

Relación de documentos entregados

Informe final y Carta de presentación del proyecto titulado: "Control del Estado Cuántico de Moléculas Frías" C.I. 7967.

Anexos:

- 1a) Borrador del Artículo, "Estudio de la dinámica de poblaciones vibracionales en moléculas di-alcalinas (RbCs)" por el estudiante Luis Felipe Rivas.
- 1b) Borrador del Artículo, " Collective dynamics of polar molecules in 1D optical lattices" por Vanessa Olaya y Karem Rodriguez, a ser sometido a European Physics Journal-D.
- 2a) Trabajo de Grado, "Solving Dirac equation for H2+ using B-splines" por el estudiante de pregrado Mario Henao Ayala.
- 2b) Acta de Sustentación del Trabajo de Grado del estudiante Mario Henao Ayala.
- 3) Presentación en el Seminario del grupo de Óptica, "Análisis de Moléculas Lineales bajo el modelo de oscilaciones pequeñas" Septiembre 25, 2015. Presentado por el estudiante Victor Alfonso Loaiza Moreno.
- 4) Desarrollos en el software Mathematica sobre "la Molécula triatómica lineal" realizado por el estudiante Victor Alfonso Loaiza Moreno.
- 5a) Ponencia en el "XXVI Congreso Nacional de Física" 29 de Septiembre al 2 de Octubre, 2015 - Manizales, Colombia. Presentado por Gustavo Marín.
- 5b) Ponencia en el "XIV Encuentro Nacional de Óptica y V Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones" Nov 16-20, 2015, Cali, Colombia. Presentado por Gustavo Marín.
- 5c) Presentación en el seminario del grupo de Física Teórica del Estado Sólido, "Interferometry and coherent transfer population using Bose-Einstein condensates", Noviembre 6, 2015, Universidad del Valle. Presentado por Gustavo Marín and Karem Rodríguez
- 6) Ponencia en el "International workshop on quantum coherence and decoherence II" Agosto 25-29, 2014 - Medellín, Colombia. Presentado por Beatriz Londoño.
- 7) Presentación en el seminario del grupo de Tecnología, Información y Complejidad Cuántica - QuanTic, "Shape resonances in ground state diatomic molecules", Marzo 25, 2015, Universidad del Valle. Presentado por Beatriz Londoño.
- 8a) Propuesta presentada a convocatoria externa, título "Formation and control of cold molecules". Presentado a la convocatoria 658-2014 CONVOCATORIA PARA PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS del PROGRAMA NACIONAL DE CIENCIAS BÁSICAS.
- 8b) Certificado de la relación de requisitos y documentos adjuntos de la propuesta a convocatoria externa.
- 8c) Verificación de envío de la propuesta a convocatoria externa.

Santiago de Cali, 15 de Diciembre de 2016

Profesor
José Raúl Quintero
Vicedecanatura de Investigaciones
Facultad de Ciencias Naturales y Exactas
Universidad del Valle

Asunto: Presentación de informe final de proyecto

Título del proyecto: Control del Estado Cuántico de Moléculas Frías C.I: 7967

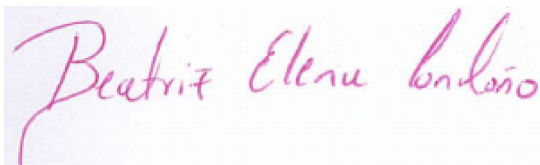
El proyecto en cuestión debió ser cerrado el mes de mayo del presente año, luego de una prórroga autorizada a finales del año 2015. El proyecto fue exitosamente ejecutado, como se podrá observar en el informe final que se anexa a esta carta. Respecto a la formación de recurso humano, uno de los pilares de este tipo de proyectos, se superaron con creces las expectativas. El informe final se ha retrasado en la entrega dado que a la fecha no hemos sometido el artículo comprometido, tenemos resultados incluso para someter dos artículos, pero varias circunstancias han retrasado el cumplimiento de dicho compromiso.

Desde enero del presente año inicie un proceso de preparación para dejar mi cargo como profesora de la Universidad del Valle, lugar en el cual laboré hasta el día 31 de marzo de 2016, todos los involucrados en el proyecto cumplimos a cabalidad las responsabilidades, sólo restaba someter el artículo y presentar el informe final, lo cual acordamos era mi total responsabilidad. Sin embargo diversas circunstancias familiares y el radicarme fuera del país, motivo por el cual renuncie a la Universidad, desencadenaron en mi incumplimiento.

Ahora me dirijo a ustedes para solicitar sea considerado el informe final que se adjunta a esta carta como prueba de una correcta ejecución del proyecto y se nos conceda un tiempo prudente para someter el artículo, sin que este conlleve a infracciones por parte de los participantes que aún continúan vinculados a la Universidad. Es mi compromiso someter dicho artículo, pero requiero tiempo para su preparación.

Se adjunta Informe de avance con sus respectivos soportes

Atentamente,



Beatriz Elena Londoño Flórez
CC 32108113

Con copia a: Luis Norberto Granda, jefe del Departamento de Física

Santiago de Cali, 15 de Diciembre de 2016

Profesor
José Raúl Quintero
Vicedecanatura de Investigaciones
Facultad de Ciencias Naturales y Exactas
Universidad del Valle

Asunto: Compromiso pendiente para el informe final de proyecto

Título del proyecto: Control del Estado Cuántico de Moléculas Frías C.I: 7967

Junto con la presente se entrega el informe final del proyecto en cuestión cuya investigadora principal es la doctora Beatriz Londoño. Como ella explica en su carta de presentación aún no tenemos soporte para uno de los productos mínimos del proyecto. Concretamente, aún no se ha sometido ni publicado un artículo tipo B. Por medio de la presente manifestamos nuestro compromiso para entregar el soporte de dicho producto el día 15 de enero de 2017. De esta manera daremos cumplimiento a cabalidad a las responsabilidades ligadas a este proyecto.

Atentamente,



Karem Cecilia Rodríguez R.
CC 52517246



Javier Madroñero Pabón
CC 87714245

Fecha de presentación del Informe: Día Mes Año

1. Datos generales del Proyecto

Código del proyecto: C.I. 7967			
Título del proyecto: Control del Estado Cuántico de Moléculas Frías			
Facultad o Instituto Académico: Ciencias Naturales y Exactas			
Departamento o Escuela: Física			
Grupo (s) de investigación: Óptica Cuántica – Fisteo – Quantic			
Entidades: Universidad del Valle			
Palabras claves: átomos fríos, moléculas frías, control cuántico			
Investigadores ¹	Nombre	Tiempo asignado	Tiempo dedicado
Investigador Principal	Beatriz Elena Londoño Flórez	5h/semana	5h/semana
Coinvestigadores	Karem Rodriguez	5h/semana	5h/semana
	Javier Madroñero	5h/semana	5h/semana
	Luis Rivas - estudiante pregrado	10h/semana	10h/semana
Otros participantes	Física – Monitor	10h/semana	10h/semana
	Mario Henao - estudiante pregrado	10h/semana	10h/semana
	Física – Monitor (Graduado)	5h/semana	5h/semana
	Victor Loaiza - estudiante pregrado	5h/semana	5h/semana
	Física – Semillero de investigación	5h/semana	5h/semana
	Gustavo Marín - estudiante pregrado	5h/semana	5h/semana
	Física – Semillero de investigación		

2. Resumen ejecutivo:

El rápido avance en la tecnología de fuentes de radiación y la ingeniería a nivel nanométrico van de la mano con exhaustivos análisis numéricos y analíticos, como el llevado a cabo en este proyecto, que nos permiten comprender la magnitud y complejidad de la espectroscopia molecular y su dinámica a temperaturas muy bajas ($T \sim \mu K$). La presencia de radiación permite proponer esquemas de control cuántico sobre los diversos grados de libertad internos de las moléculas (estados hiperfinos, rotacionales, vibracionales). Hemos analizado aquí la dinámica de dos y tres estados electrónicos acoplados, en los cuales una gran cantidad de niveles

¹ Todas las personas relacionadas en el informe y que participen en el proyecto deben haber suscritas el acta de propiedad intelectual de acuerdo con los formatos establecidos.

vibracionales están involucrados. Usando trenes de pulsos hemos realizado cálculos sistemáticos para analizar la dinámica de las poblaciones vibracionales en tiempo real y en la molécula de RbCs, buscando conjuntos de parámetros del pulso que nos permitan llegar al nivel vibracional cero del estado base electrónico, estudiando la influencia de las características del tren de pulsos sobre la dinámica de estas poblaciones.

La espectroscopía de moléculas como el RbCs y KRb pone en evidencia el importante rol del acople espín – órbita, con el objeto de acercarnos a una descripción completa de esta interacción en moléculas di-alcalinas, se obtuvo como primer paso una solución numérica a la ecuación de Dirac para la molécula de H_2^+ . Se estudia en detalle la metodología utilizada para llevar el problema a un problema de valores propios generalizado y se realiza la implementación numérica para obtener la energía del estado base de este sistema, donde un análisis de convergencia pone en evidencia la limitante sobre los recursos computacionales de los que se dispone.

Controlar dinámica de los grados internos moleculares gobernados por la interacción dipolar vía campos eléctricos externos constituye un reto actualmente. Nosotros estudiamos la transferencia de población coherente entre los subniveles de energía rovibracionales más bajos cargando un grupo de moléculas di-alcalinas (en particular LiCs) cargadas en una red óptica unidimensional y expuestas a un campo externo tipo DC.

Por último y no menos importante con el ánimo de involucrar estudiantes jóvenes en actividades de investigación relacionadas con el presente proyecto, se hace un análisis académico de una molécula lineal resolviendo su dinámica vibracional desde un punto de vista clásico y usando el software Mathematica. También se involucra a los estudiantes jóvenes en la implementación de métodos numéricos para solucionar ecuaciones diferenciales, con el ánimo de crear familiaridad con problemas dependientes del tiempo. Estudiando la implementación numérica de un interferómetro tipo Mach-Zehnder aprovechando las propiedades ondulatorias de una nube de materia ultra fría con perfil gaussiano. Los experimentos numéricos se llevan a cabo analizando y solucionando la ecuación de Gross-Pitaevskii, la cual es una ecuación diferencial parcial de segundo orden no lineal. Se exploran cambios dinámicos en los potenciales externos de atrapamiento tanto adiabática como no adiabáticamente. La solución numérica se realiza mediante una utilización adecuada del método de diferencias finitas para la discretización espacial y de Runge-Kutta para la temporal.

Abstract

The rapid advance in radiation source technology and nanometric engineering require exhaustive numerical and analytical analyzes, such as the one carried out in this project, which allow us to understand the magnitude and complexity of molecular spectroscopy and its dynamics at very low temperatures ($T \sim \mu K$). The presence of radiation allows proposing quantum control schemes on the internal degrees of freedom of molecules (hyperfine, rotational, vibrational states). We have analyzed the dynamics of two and three coupled electronic states, in which a large number of vibrational levels are involved. Using pulse trains we have performed systematic calculations to analyze the dynamics of the vibrational populations in real time and in the molecule of RbCs, looking for sets of pulse parameters that allow us to reach the zero vibrational level of the electronic ground state, studying the influence of the Characteristics of the pulse train on the dynamics of these populations.

The spectroscopy of molecules such as the RbCs and KRb show the important role of the spin - orbit coupling, in order to approach a complete description of this interaction in di-alkaline

molecules, a first approach was obtained, the numerical solution of Dirac equation for H_2^+ . We study details of the methodology used to bring the problem to a generalized eigenvalue problem and we have performed the numerical implementation to obtain the energy of the ground state of this system, where a convergence analysis shows the limitation on the available computational resources.

We study strongly-interacting molecular bose-gases load on an one-dimensional lattice to analyze the coherent population transfer between the singlet and triplet rovibrational sublevels in the molecular Mott-insulator regime as a function of the dipolar interaction an external DC electric field.

Last but not least with the intention of involving young students in research activities related to the present project, an academic analysis of a linear molecule is made, resolving its vibrational dynamics from a classical point of view and using Mathematica software. Young students were also involved in the implementation of numerical methods to solve differential equations, in order to create familiarity with time-dependent problems. We study the numerical implementation of a Mach-Zehnder interferometer taking advantage of the ondulatory properties of the ultracold matter with at initial Gaussian profile. The numerical experiments were performed solving the Gross-Pitaevskii equation which is a non-linear second order partial differential equation. We had explored dynamical changes in the external trapping potential in the adiabatic and non-adiabatic regime. The numerical solution was obtained by means of a suitable mixture of finite difference for the spatial discretization and Runge-Kutta for the temporal part.

3. Síntesis del proyecto:

En el presente proyecto nos trazamos como objetivo estudiar la dinámica de estados internos de moléculas polares en su interacción con la radiación, con la tarea de obtener conclusiones sobre las posibilidades de control cuántico sobre los grados de libertad internos de moléculas reales, obtenidas y analizadas experimentalmente. Hoy podemos afirmar que dicho objetivo se ha cumplido mediante el trabajo de los estudiantes involucrados en el proyecto, ver anexos.

Cálculos sistemáticos de la dinámica de poblaciones vibracionales en la excitación de la molécula de RbCs fueron realizados (Anexo 1a). Mediante la solución de un sistema multinivel de dos estados acoplados por un tren de pulsos, se encuentra que el aumento en la población del nivel vibracional a poblar está fuertemente regido por la intensidad y ancho del pulso usado, mientras que la separación temporal de los pulsos tiene poca influencia sobre este, aunque se introducen pulsos chirpeados, los valores de chirp usados hasta la fecha en las simulaciones, no nos permiten tener una conclusión verás sobre la influencia del chirp en la selectividad. Son así varios los parámetros a manipular en el tren de pulsos: la intensidad, el ancho, el chirp, la tasa de repetición, el desfase entre pulsos consecutivos, y todos ellos tienen roles en la dinámica. Mediante el uso del software Mathematica se resuelve el conjunto de poblaciones vibracionales involucradas para dos y tres estados acoplados mediante el tren de pulsos. Anterior a este proyecto se contaba con la implementación numérica para el sistema de dos estados, durante el proyecto la extensión a tres estados electrónicos acoplados por la radiación láser fue obtenida. El principal aporte de este estudio radica en la opción de observar la dinámica en tiempo real de los multiniveles vibracionales acoplados mediante trenes de pulsos láser y encontrar así el efecto de cada parámetro de control sobre dicha dinámica. Los estados electrónicos excitados en esta molécula de RbCs y otras como KRb presentan fuerte acople espín – órbita, fue así como dentro de este proyecto se plantea la idea de usar la ecuación de

Dirac para describir las moléculas diatómicas alcalinas, esta es una idea bastante ambiciosa, por tanto se plantea iniciar el sistema más simple posible que permita comprender la complejidad de la ruta metodológica a seguir (Trabajo de grado Anexo 2a, Acta de Sustentación Anexo 2b).

Con el ánimo de familiarizar a los estudiantes con conceptos relacionados con dinámica molecular y con soluciones numéricas implementadas en el software Mathematica, se analiza una molécula lineal, bajo un enfoque clásico y desde la aproximación de oscilaciones pequeñas. El Lagrangiano del sistema es planteado y el conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas resultante se resuelve y presenta de una manera dinámica en el software Mathematica (ver Anexo 3 y 4).

Siguiendo con el tren de ideas, y deseando controlar la dinámica poblacional en los dos estados rovibracionales más bajos, estudiamos la transferencia de población coherente entre los subniveles de energía cargando moléculas di-alcalinas (en particular LiCs) en una red óptica unidimensional y expuestas a un campo externo tipo DC. El sistema de muchos cuerpos es trabajando utilizando el formalismo de estados producto de matriz (MPS por sus siglas en inglés) y el método de TEBD (Time-evolving block-decimation) para realizar la evolución temporal del sistema fuertemente correlacionado. El trabajo se ha condensado en el anexo 1b.

También se realizó la implementación numérica de un interferómetro tipo Mach-Zehnder usando una onda de materia ultrafría mediante la ecuación de Gross-Pitaevskii. Hacemos una discretización espacial con el método de diferencias finitas y solucionamos numéricamente la ecuación diferencial con el método de Rugen-Kutta de 4to orden para un perfil gaussiano inicial. Se analizaron diferentes potenciales de atrapamiento como función de la posición y el tiempo. Se prestó especial interés en tres casos: cambios adiabáticos, súbitos y mezclados. Se exploran trampas simétricas y asimétricas también. Como principal conclusión, podemos controlar posición y fase de la onda de materia ultrafría mediante su dinámica usando la guía de onda perfecta que se obtuvo cuando los cambios dinámicos del potencial son adiabáticos. Frente a cambios no adiabáticos la energía cinética domina la dinámica del sistema. Y finalmente, se acumula una fase por la diferencia en longitud de los dos caminos y se presentaron los perfiles de interferencia. Los resultados fueron presentados en el Congreso Nacional de Física 2015 (Anexo 5a), el Encuentro Nacional de Óptica 2015 (Anexo 5b) y el seminario del grupo de Física Teórica del Estado Sólido de la Universidad del Valle (Anexo 5c).

4. Impactos actual o potencial:

Académico (aportes a la docencia, aportes a la formación de recursos humanos).

El mayor impacto del presente proyecto se observa en la formación de recurso humano. Fueron 4 los estudiantes involucrados en el desarrollo del proyecto: dos en calidad de semillero de investigación y dos en calidad de monitores. Los semilleros eran estudiantes de pregrado en Física de cuarto y quinto semestre, con ellos se adelantaron labores de inicio al rol de investigador, asignándoles tareas académicas relacionadas con la temática del proyecto, ambos desarrollaron un excelente trabajo y lo presentaron en seminarios de grupo (Ver anexos del 3 al 5c) y en dos eventos nacionales (anexos 5a y 5b). Los otros dos estudiantes vinculados en calidad de monitores, en su último año de la carrera de Física, desarrollaron tareas analíticas y numéricas directamente relacionadas con los objetivos del proyecto, ambos presentaron seminarios de grupo y uno de ellos finalizó su trabajo de grado en el marco de este proyecto (ver Anexos 1a, 1b, 2a y 2b).

Es de resaltar que este proyecto tenía comprometido sólo la vinculación de un estudiante en calidad de Semillero de Investigación, pero con la vinculación de estos cuatro estudiantes los aportes a la formación de recurso humano superaron las expectativas

Investigativo (divulgación de resultados).

Los investigadores y estudiantes involucrados en el en el proyecto presentamos seminarios de grupo en varias ocasiones en los grupos del Departamento de Física:
grupo de Óptica Cuántica (anexo 3),
grupo de Física Teórica del Estado Sólido (anexo 5c) y
grupo de Tecnología, Información y Complejidad Cuántica - Quantic (anexo 7).

Eventos Científicos Internacionales:

1. Evento: "International workshop on quantum coherence and decoherence II" Agosto 25-29, 2014 - Medellín, Colombia. Presentado por Beatriz Londoño, (anexo 6).

Eventos Científicos Nacionales:

1. Evento: "XXVI Congreso Nacional de Física" 29 de Septiembre al 2 de Octubre, 2015 - Manizales, Colombia. Presentado por Gustavo Marín, (anexo 5a).
2. Evento: "XIV Encuentro Nacional de Óptica y V Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones" Noviembre 16 - 20, 2015 - Cali, Colombia. Presentado por Gustavo Marín, (anexo 5b).

Es de resaltar que el proyecto estaba comprometido con un evento nacional, sin embargo fueron varios los seminarios institucionales, los congresos nacionales e incluso un evento internacional en los cuales se tuvo participación, por tanto el compromiso de divulgación científica fue logrado con alta expectativa.

Este proyecto tiene el compromiso de someter un artículo tipo B, tal como se explica en la carta de presentación han sido varios los motivos que han llevado al incumplimiento del mismo, el más relevante de ellos: la desvinculación de la Universidad de la investigadora principal, quien espera cumplir en los próximos meses con dicho compromiso, como se puede observar en el material adjunto hay resultados más que meritorios y suficientes para someter una publicación.

Desarrollos futuros - Proyecto presentado a convocatoria externa.

Actualmente se adelanta el desarrollo del proyecto de ciencias básicas – COLCIENCIAS 2015-2018, los documentos del proyecto presentado a la convocatoria externa son presentados en los Anexos 8a, 8b y 8c. Proyecto titulado "Formation and control of cold molecules" con CI 1006, el cual germinó en la ejecución del presente proyecto de convocatoria interna de la Universidad del Valle. El proyecto de convocatoria externa fue liderado por la Dra. Beatriz Londoño, entonces profesora del Departamento de Física, quien fue la investigadora principal durante el inicio del mismo, luego de su desvinculación con la Universidad del Valle, ha sido la profesora Karem Rodríguez quien a continuado como investigadora principal del proyecto. Aunque la investigadora Beatriz Londoño ya no hace parte del cuerpo docente de la Universidad, la relación científica con los involucrados en el proyecto ha continuado y el desarrollo de investigación en el campo de las moléculas frías se ha seguido fortaleciendo. Es de resaltar que este proyecto abrió las puertas a establecer relaciones entre investigadores del departamento de Física y Química y que en estos nuevos proyectos e ideas se han establecido relaciones y fortalecido redes de conocimiento e investigación.

5. Productos:

Tabla No. 1. **Cantidad y tipo de productos pactados en el *Acta de Trabajo y Compromiso* y productos finalmente presentados**

TIPO DE PRODUCTOS	No. de PRODUCTOS PACTADOS				No. de PRODUCTOS PRESENTADOS			
Productos de nuevos conocimientos								
Artículo en revista ISI-SCOPUS:	Q1	Q2	Q3	Q4	Q1	Q2	Q3	Q4
Artículo completo publicado en revistas indexadas	A1	A2	B	C	A1	A2	B	C
			1					
Libros de autor que publiquen resultados de investigación								
Capítulos en libros que publican resultados de investigación								
Productos o procesos tecnológicos patentados o registrados								
Prototipos y patentes								
Software								
Productos o procesos tecnológicos usualmente no patentables o protegidos por secreto industrial								
Normas basadas en resultados de investigación								
Formación de recursos humanos	No. de estudiantes vinculados		No. de tesis		No. De estudiantes Vinculados		No. De tesis	
Estudiantes de pregrado					2		1	
Semillero de Investigación	1				2			
Estudiantes de maestría								
Estudiantes de doctorado								
Joven investigador								
Productos de divulgación								

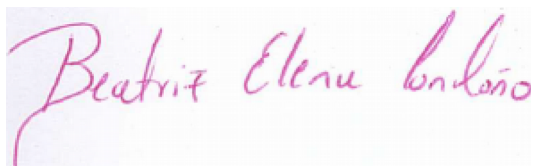
Publicaciones en revistas no indexadas				
Ponencias presentadas en eventos (congresos, seminarios, coloquios, foros)	No. de ponencias nacionales	No. de ponencias internacionales	No. de ponencias nacionales	No. de ponencias internacionales
Propuesta de investigación	1		2	1
Propuestas presentadas en convocatorias externas para búsqueda de financiación.	1		1	

Tabla No. 2. Detalle de productos

Para cada uno de los productos obtenidos y relacionados en la tabla anterior, indique la información solicitada para cada uno, anexando copia de las respectivas constancias. Como anexo a este formato encontrará el instructivo para la revisión de informes finales y productos

Tipo de producto:	Tesis de pregrado
Nombre General:	Solving Dirac equation for H2+ using B-splines
Nombre Particular:	Solving Dirac equation for H2+ using B-splines
Ciudad y fechas:	Cali, Septiembre 2, 2016
Participantes:	Mario Henao Ayala, Beatriz Londoño, Javier Madroño.
Sitio de información:	Biblioteca Central.
Formas organizativas:	Grupo de Tecnología, Información y Complejidad Cuántica - Quantic, Grupo de Óptica Cuántica, ambos Departamento de Física, Universidad del Valle.

La presente versión del informe contiene las observaciones de los evaluadores:



Firma del investigador principal

VoBo. Vicedecano de Investigaciones

Anexos 1:

1a) Borrador del Artículo, “Estudio de la dinámica de poblaciones vibracionales en moléculas di-alcalinas (RbCs)” por el estudiante Luis Felipe Rivas.

1b) Borrador del Artículo, “ Collective dynamics of polar molecules in 1D optical lattices” por Vanessa Olaya y Karem Rodríguez, a ser sometido a European Physics Journal-D.

Estudio de la dinámica de poblaciones vibracionales en moléculas di-alcalinas (RbCs)

Luis Felipe Rivas M.

Universidad del Valle, Colombia

(Dated: June 24, 2015)

En este se presenta un resumen de las actividades realizadas en el periodo Septiembre-noviembre de 2014 y febrero-junio de 2015 en la monitoria de investigación con la proferosa Beatriz Elena Londoño F. Se expone brevemente los sistemas de dos estados, la estructura de las moléculas diatómicas y la dinámica poblacional de sus estados vibracionales.

I. INTRODUCCIÓN

Estudiar la dinámica de poblaciones en una molécula a bajas temperatura cuando es excitada por un campo electromagnético es importante dado que permite proponer esquemas de control cuántico.

En este trabajo se desarrollarán las bases para realizar un estudio de la dinámica de las poblaciones vibracionales en una molécula di-alcalina cuando es excitada por un tren de pulsos electromagnéticos. Además se aplican estas a una molécula de RbCs.

II. SISTEMA DE DOS Y TRES ESTADOS

El sistema de dos estados es el sistema cuántico no trivial más simple que se puede encontrar en la naturaleza. Además, muchos sistemas de múltiples estados pueden modelarse como un sistema de dos estados. Estos pueden ser representados por una superposición de dos vectores, los cuales forman una base completa en un espacio de Hilbert. En la representación de interacción (Dirac) toma la forma¹:

$$\psi = a(t)e^{-iw_g t} |g\rangle + b(t)e^{-iw_e t} |e\rangle \quad (1)$$

Los coeficientes tienen una dependencia temporal cuya evolución está determinada por 2.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a(t)e^{-iw_g t} \\ b(t)e^{-iw_e t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{a,a} & H_{a,b} \\ H_{b,a} & H_{b,b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t)e^{-iw_g t} \\ b(t)e^{-iw_e t} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Otro sistema bastante interesante es el de tres estados, este enriquece el análisis del problema agregando nuevas características que resultaría más complicado o imposible de estudiar mediante el de dos estados. Estos pueden ser representados por una superposición de tres vectores, los cuales forman una base completa en un espacio de Hilbert. En la representación de interacción toma la

forma²:

$$\Psi = a(t)e^{-iw_{g1} t} |g_1\rangle + c(t)e^{-iw_{g2} t} |g_2\rangle + b(t)e^{-iw_e t} |e\rangle \quad (3)$$

los coeficientes tienen una dependencia temporal cuya evolución está determinada por 4.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a(t)e^{-iw_{g1} t} \\ b(t)e^{-iw_e t} \\ c(t)e^{-iw_{g2} t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{a,a} & H_{a,b} & H_{a,c} \\ H_{b,a} & H_{b,b} & H_{b,c} \\ H_{c,a} & H_{c,b} & H_{c,c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t)e^{-iw_{g1} t} \\ b(t)e^{-iw_e t} \\ c(t)e^{-iw_{g2} t} \end{pmatrix} \quad (4)$$

III. MOLÉCULAS DIATÓMICAS^[2]

Sistemas de núcleos y electrones confinados son conocidos como moléculas, en esta sección se discutirá la estructura de estas, en particular de las moléculas diatómicas. Consideremos una molécula diatómica compuesta por los núcleos A y B, de masas M_A y M_B , junto con un número N de electrones. La distancia entre núcleos será denotada por R ($R = R_A - R_B$). La posición de los electrones con respecto al origen (el centro de masa de A y B) por $r_1, r_2, \dots, r_N$. La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el sistema (despreciando las interacciones debidas a los spines) es 5.

$$[T_N + T_e + V]\psi(R; r_1, r_2, \dots, r_N) = E\psi(R; r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (5)$$

Donde T_N y T_e representan la energía cinética del núcleo y la de los electrones respectivamente. la energía potencial del sistema (interacciones electrostáticas) es representada por V.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para los electrones moviéndose en un campo de núcleos fijos en las posiciones R_A y R_B es conocida como la ecuación de onda de los electrones (6), donde se puede observar que los autovalores $E_q(R)$ dependen de la distancia entre núcleos en todos los niveles electrónicos q.

$$[T_N + T_e]\Phi_q(R; r_1, r_2, \dots, r_N) = E_q\Phi_q(R; r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (6)$$

¹ Denotamos el estado de menor energía por g (ground) y el de mayor energía por e (excited).

² Denotamos los estados de menor energía por g_1 y g_2 respectivamente, mientras el de mayor energía por e.

Las autofunciones de 6 forman un conjunto completo para cada conjunto de valores R y pueden ser tomadas como ortonormales. Esto nos permite formar una base con las autofunciones en la cual expandimos la función de onda de la molécula 7.

$$\psi(R; r_1, r_2, \dots r_N) = \sum_q F_q(R) \Phi_q(R; r_1, r_2, \dots r_N) \quad (7)$$

Los coeficientes $F_q(R)$ son funciones de onda, las cuales están asociadas al movimiento de los núcleos cuando el sistema de electrones está en el estado q . Para encontrar $F_q(R)$ evaluamos 7 en 5 y proyectamos sobre $\Phi_s(R)$, obteniendo 8.

$$\begin{aligned} \sum_q \left[\int dr_1 dr_2 \dots dr_N \Phi_s^*(R) T_N F_q(R) \Phi_q(R) \right] \\ + [E_s(R) - E] F_s(R) = 0 \\ s = 1, 2, 3 \dots \end{aligned} \quad (8)$$

La acción del operador T_N en el producto $\Phi_q F_q$ está dada por:

$$\begin{aligned} T_N(\Phi_q F_q) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[F_q(\nabla_R^2 \Phi_q) + 2(\nabla_R F_q \cdot \nabla_R \Phi_q) \right. \\ \left. + \Phi_q(\nabla_R^2 F_q) \right] \end{aligned} \quad (9)$$

Aplicando la aproximación de Born-Oppenheimer, la cual consiste en considerar que la función de onda de los electrones cambia muy poco para las diferentes distancias internucleares con respecto a como ha cambiado la función de onda nuclear, esto nos permite despreciar $\nabla_R \Phi_q$ con respecto a $\nabla_R F_q$ para los valores de R cerca del equilibrio R_0 . Entonces, la ecuación ψ se desacopla y $F_s(R)$ satisface la ecuación de onda nuclear 10.

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_R^2 + E_s(R) - E \right] F_s(R) = 0 \\ s = 1, 2, 3 \dots \end{aligned} \quad (10)$$

IV. DINÁMICA DE POBLACIONES VIBRACIONALES PARA MOLÉCULAS DIATÓMICAS

Si despreciamos los efectos de relajación sobre una molécula diatómica, la evolución temporal de su estado está determinada por 11, donde H_0 es el hamiltoniano de la molécula diatómica (tratado en la sección anterior) y $V(t)$ da cuenta de las interacciones exteriores que permiten acoplar sus estados.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (H_0 + V(t)) \psi \quad (11)$$

A. Sistema de dos estados

En la representación de interacción y aproximando el sistema de electrones como uno de dos niveles, la función

de onda de la molécula está dada por 12. Donde los estados vibracionales son representados por n y los electrónicos por e y g .

$$\psi = \sum_n a_n e^{-i w_{gn} t} |g, n\rangle + b_n e^{-i w_{en} t} |e, n\rangle \quad (12)$$

Reemplazando 12 en 11 y proyectando sobre las bases, obtenemos que la dinámica de las poblaciones está determinada por el conjunto de ecuaciones representadas por 13.

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_j &= \sum_n b_n e^{-i(w_{en} - w_{gj})t} \langle j, g | V(t) | e, n \rangle \\ i\hbar \dot{b}_k &= \sum_n a_n e^{-i(w_{gn} - w_{ek})t} \langle k, e | V(t) | g, n \rangle \\ j, k &= 1, 2 \dots \end{aligned} \quad (13)$$

Si $V(t)$ describe la interacción de la molécula con un tren de pulsos, podemos aproximar esta con un dipolo eléctrico $V(t) = -d \cdot E(t)$, donde d es el operador momento de transición dipolar y $E(t)$ representa el campo eléctrico. Adicionalmente asumimos que esta interacción no cambia los estados base de la molécula.

$E(t)$ toma la forma

$$E(t) = f(t) e^{-i w_L t} \quad (14)$$

Denotamos por δ_{en} (δ_{gn}) la diferencia entre la frecuencia w_{en} (w_{gn}) y la frecuencia del estado que se ha seleccionado como blanco para cada nivel electrónico. Considerando que la frecuencia de la onda electromagnética es igual a la diferencia de frecuencias entre los blancos, la dinámica de las poblaciones entonces está representada por 15.

$$\begin{aligned} i\dot{a}_j &= -\frac{1}{2} \sum_n b_n e^{-i(\delta_{en} - \delta_{gj})t} \Omega[n, j] f(t) \\ i\dot{b}_k &= -\frac{1}{2} \sum_n a_n e^{-i(\delta_{gn} - \delta_{ek})t} \Omega[k, n] f^*(t) \\ j, k &= 1, 2 \dots \end{aligned} \quad (15)$$

Donde $\Omega[n, j]$ es la frecuencia de Rabi y la definimos como

$$\Omega[n, j] = \frac{2 \langle j, g | d | e, n \rangle}{\hbar} \quad (16)$$

Si resolvemos 15 para el caso particular donde en los estados electrónicos g y e solo se tiene un estado vibracional, j y k respectivamente, encontramos que la solución toma la forma 17.

$$\begin{aligned} a_j &= \cos \left[\frac{1}{2} \Theta(t) \right] \\ b_k &= i \sin \left[\frac{1}{2} \Theta(t) \right] \end{aligned} \quad (17)$$

donde

$$\Theta(t) = d \langle j, g | d | e, n \rangle \int_{x=-\infty}^{x=t} f(x) \cdot dx \quad (18)$$

El ángulo $\Theta(t)$ es llamado área del pulso. despues de aplicar el pulso, $\Theta(\infty) = \pi$, toda la población se concentra en el estado electrónico e, obtenemos entonces la condición 19, la cual nos permite obtener valores para la amplitud del pulso en función del ancho y los coeficientes $\langle j, g|d|e, n \rangle$ ^[4] suponiendo que el pulso es gaussiano representado por 26, mas adelante estudiaremos los pulsos con mas detalle.

$$\sigma \hbar E_0 \Omega[n, j] = 2(2\pi \ln 2)^{\frac{1}{2}} \quad (19)$$

B. Sistema de tres estados

En la representación de interacción y aproximando el sistema de electrones como uno de tres niveles, la función de onda de la molécula esta dada por 12. Donde los estados vibracionales son representados por n y los electronicos por e, g_1 y g_2 .

$$\Psi = \sum_n a_n e^{-i w_{g_1 n} t} |g_1, n\rangle + c_n e^{-i w_{g_2 n} t} |g_2, n\rangle + b_n e^{-i w_{en} t} |e, n\rangle \quad (20)$$

Reemplazando 20 en 11 y proyectando sobre las bases, obtenemos que la dinámica de las poblaciones esta determinada por el conjunto de ecuaciones representadas por 21.

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_j &= \sum_n b_n e^{-i(w_{en} - w_{g_1 j})t} \langle j, g_1 | V(t) | e, n \rangle + \\ &\quad c_n e^{-i(w_{g_2 n} - w_{g_1 j})t} \langle j, g_1 | V(t) | g_2, n \rangle \\ i\hbar \dot{b}_k &= \sum_n a_n e^{-i(w_{en} - w_{g_1 k})t} \langle k, e | V(t) | g_1, n \rangle + \\ &\quad c_n e^{-i(w_{g_2 n} - w_{ek})t} \langle k, e | V(t) | g_2, n \rangle \\ i\hbar \dot{c}_l &= \sum_n a_n e^{-i(w_{g_1 n} - w_{g_2 l})t} \langle l, g_2 | V(t) | g_1, n \rangle + \\ &\quad b_n e^{-i(w_{en} - w_{g_2 l})t} \langle l, g_2 | V(t) | e, n \rangle \\ &\quad j, k, l = 1, 2 \dots \end{aligned} \quad (21)$$

Si $V(t)$ describe la interacción de la molécula con un tren de pulsos, podemos aproximar esta con un dipolo eléctrico $V(t) = -d \cdot E(t)$, donde d es el operador momento de transición dipolar y $E(t)$ representa el campo eléctrico. Adicionalmente asumimos que esta interacción no cambia los estados base de la molécula. $E(t)$ toma la forma

$$E(t) = E_0 f(t) e^{-i w_{L1} t} + E_1 f(t - t_0) e^{-i w_{L2} t} \quad (22)$$

La dinámica de las poblaciones entonces esta representada por 23. Denotamos por δ_{en} ($\delta_{g_1 n}$ y $\delta_{g_2 n}$) la diferencia entre la frecuencia w_{en} ($w_{g_1 n}$ y $\delta_{g_2 n}$) y la frecuencia del estado que se ha seleccionado como blanco para cada nivel electrónico. Considerando que la frecuencias de las ondas electromagnéticas es igual a la diferencia de fre-

cuencias entre los blancos.

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_j &= \sum_n b_n e^{-i(\delta_{en} - \delta_{g_1 j})t} \Omega[n, j] f(t) \\ i\hbar \dot{b}_k &= \sum_n a_n e^{-i(\delta_{en} - \delta_{g_1 k})t} \Omega[j, n] f^*(t) \\ &\quad + c_n e^{-i(\delta_{g_2 n} - \delta_{ek})t} \Xi[k, n] f(t - t_0) \\ i\hbar \dot{c}_l &= \sum_n b_n e^{-i(\delta_{en} - \delta_{g_2 l})t} \Xi[n, l] f^*(t - t_0) \\ &\quad j, k, l = 1, 2 \dots \end{aligned} \quad (23)$$

Donde $\Omega[n, j]$ y $\Xi[n, l]$ los definimos como

$$\begin{aligned} \Omega[n, j] &= \frac{2 \langle j, g_1 | d | e, n \rangle}{\hbar} \\ \Xi[n, j] &= \frac{2 \langle j, e | d | g_2, n \rangle}{\hbar} \end{aligned} \quad (24)$$

V. TRENES DE PULSOS

Un pulso es una sola perturbación que se mueve a través de un medio. Un tren de pulsos consiste en una sucesión de N pulsos, esta idea está matemáticamente representada por la ecuación 25 donde $f(t)$ es la envolvente del pulso, w la frecuencia de la onda, ϕ la fase, T el tiempo entre pulsos, E_0 la amplitud de la onda y $\hat{e}$ la dirección del campo eléctrico.

$$\hat{E}(t) = Re \sum_{k=0}^{N-1} \hat{e} f(t - kT) e^{i w t - i k T + i \phi} \quad (25)$$

Un tipo de pulso, el cual vamos a utilizar para estudiar las poblaciones en la molécula de RbCs, es el gaussianos, estos son pulsos cuya envolvente es una función gaussiana. Entonces, tomamos $f(t)$ como 26, donde: μ define el retraso del pulso y σ define el ancho de este.

$$f(t) = E_0 e^{-2 \ln(2) \frac{(t - \mu)^2}{\sigma^2}} \quad (26)$$

En la figura 1 podemos observar un pulso gaussiano y su transformada de fourier.

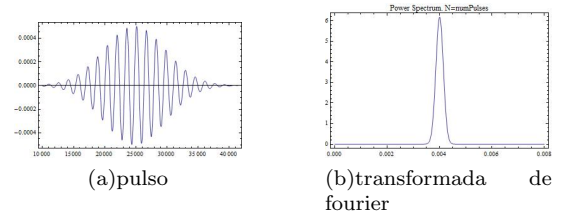


FIG. 1 Pulso gaussiano. El retraso del pulso es 24805.6 as, la amplitud es 0.0005 a.u. y el ancho 8268.52 as. La frecuencia de la onda son 0.006 as^{-1} .

En la figura 2 podemos observar un tren de 5 pulsos gaussianos y su transformada de fourier.

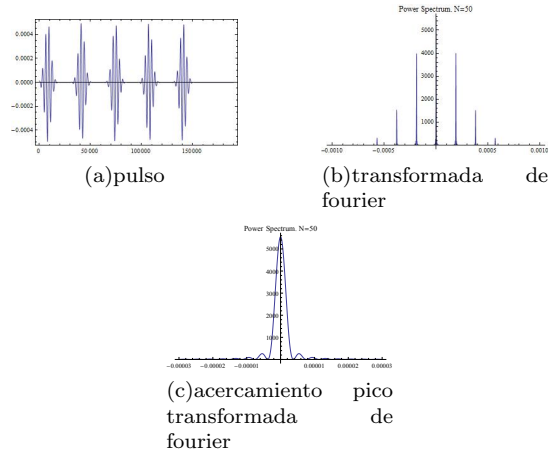


FIG. 2 Tren de 5 pulsos gaussianos. El retraso de los pulsos es 24805.6 as, la amplitud es 0.0005 a.u., el ancho 4961.11as, el tiempo de repetición entre pulsos es 33074.1as y sin desfase. La frecuencia de la onda son 0.002 as^{-1} .

Cuando la frecuencia del pulso varía con el tiempo se dice que tiene un chirp. En el caso particular de los pulsos gaussianos el efecto del chirp se puede observar en la figura 3.

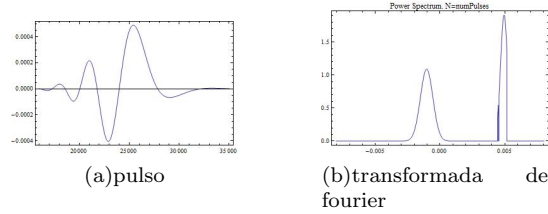


FIG. 3 Pulso gaussiano con chirp (aproximación lineal de la frecuencia con coeficiente $0.0000001 \text{ as}^{-2}$). El retraso de los pulsos es 24805.6 as, la amplitud es 0.0005 a.u. y el ancho 4961.11as. La frecuencia de la onda es 0.006 as^{-1} .

Un tren de pulsos con chirp se puede representar mediante 27.

$$\hat{E}(t) = \text{Re} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{e}f(t - kT)e^{i\Lambda(t) - ikT + i\phi} \quad (27)$$

donde

$$\Lambda(t) = \int_0^t w(t' - kT)dt' \quad (28)$$

VI. RESULTADO

Se aplicó lo expuesto anteriormente para estudiar las poblaciones vibracionales en una molécula de RbCs. Supusimos que inicialmente toda la población de la molécula está concentrada en el estado $s=36$, debido a la interacción entre la molécula y un pulso electromagnético

se acoplan los estados g ($s=36, 37$ y 38) y e ($s=42, 43$ y 44)³.

El Mathematica nos permite mediante el programa “Multilevel system driven by coherent pulse train” de Andrei Derevianko, sobre el cual hemos hecho algunas modificaciones, solucionar numéricamente las ecuaciones 15.

Tomamos $f(t)$ como 26 (pulso gaussiano), donde μ es 0.2ps. En las tablas 1, 2 y 3 se registran los valores de $\Omega[n, j]$, w_{gj} y w_{en} respectivamente, los cuales fueron obtenidos de una base de datos.

	42	43	44
36	-0.029356	0.028664	-0.027177
37	-0.036851	0.034169	-0.03109
38	-0.03457	0.030558	-0.026669

TABLE I Valores $\Omega[n, j]$ donde n toma los valores 36, 37 y 38 y j los valores 42 43 44.

j	$w_{gj} (\text{as}^{-1})$
36	0
37	7.52632×10^{-6}
38	0.0000138375

TABLE II Valores w_{gj} .

n	$w_{en} (\text{as}^{-1})$
42	0
43	0.000209351
44	0.000418077

TABLE III Valores w_{en} .

Los datos obtenidos sobre las poblaciones vibracionales de la molécula son presentados en las figuras 1, 2 y 3 en anexos.

En la figuras se puede observar que los estados 43 y 44 son los menos poblados, en especial cuando la amplitud del pulso es mas baja. Cuando la amplitud del pulso es 1215124 a.u. los estados mas poblados en general son 36 y 37. Cuando la amplitud es de 0.001 a.u. los mas poblados son 36 y 42. Para ambas amplitudes y pulsos más cortos (10^{-14} s y 10^{-13} s) las poblaciones se concentran mayormente en 43 que entre los demás estados e . Pero a medida que se aumenta el ancho del pulso, cuando la amplitud es 0.001 a.u. la población se empieza a concentrar mayormente en 42, cuando la amplitud es 1215124 a.u. la población se empieza a concentrar mayormente en 44.

³ Cuando la molécula esta en los estados vibracionales $s=36, 37$ y 38 es porque el estado electrónico es g y cuando este en los estados vibracionales $s=42, 43$ y 44 es porque el estado electrónico es e .

VII. REFERENCIAS

- [1]. D. Griffiths. Introduction to Quantum Mechanics (2nd ed.)(2005). p. 353.
- [2]. B. H. Bransden, C. J. Joachain. Physics of atoms and molecules. John Wiley and Son Inc (1st ed.) (1982). p. 383-394.
- [3]. Nikolay V. Vitanov, Peter L. Knight. Coherent excitation of a two-state system by a train of short pulses, Phys. Review A vol 52, 3 (1995).
- [4]. Beatriz. E. Londoño. Ultracold stable ground state RbCs molecules through photoassociation below the $\text{Rb}(5s)\text{Cs}(6p\ 1/2)$ dissociation limit.

I. ANEXOS

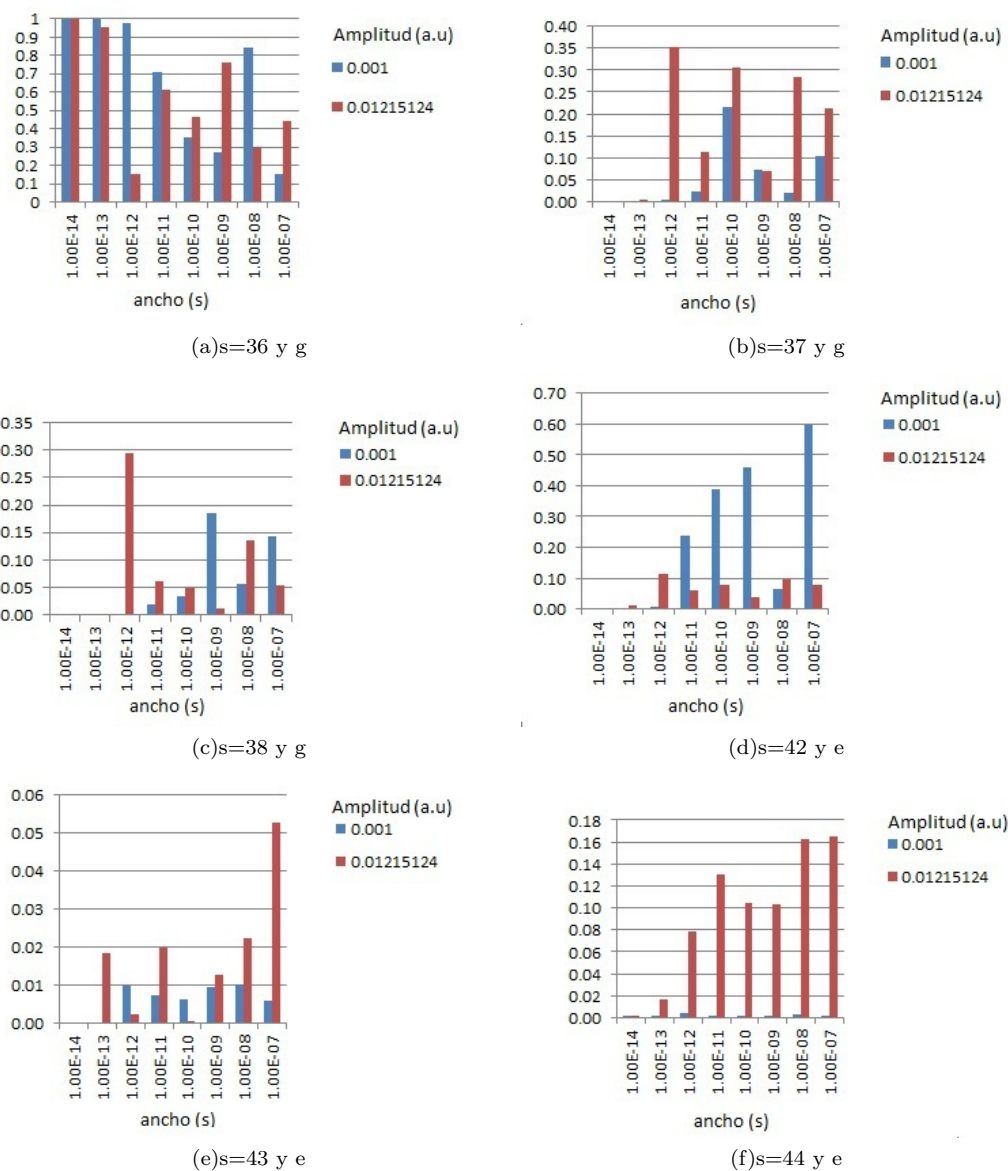


FIG. 1 Respuesta poblaciones estado vibracionales molécula RbCs despues de ser sometida a un pulso gaussiano con diferentes anchos y amplitudes, agrupada por estados vibracionales.

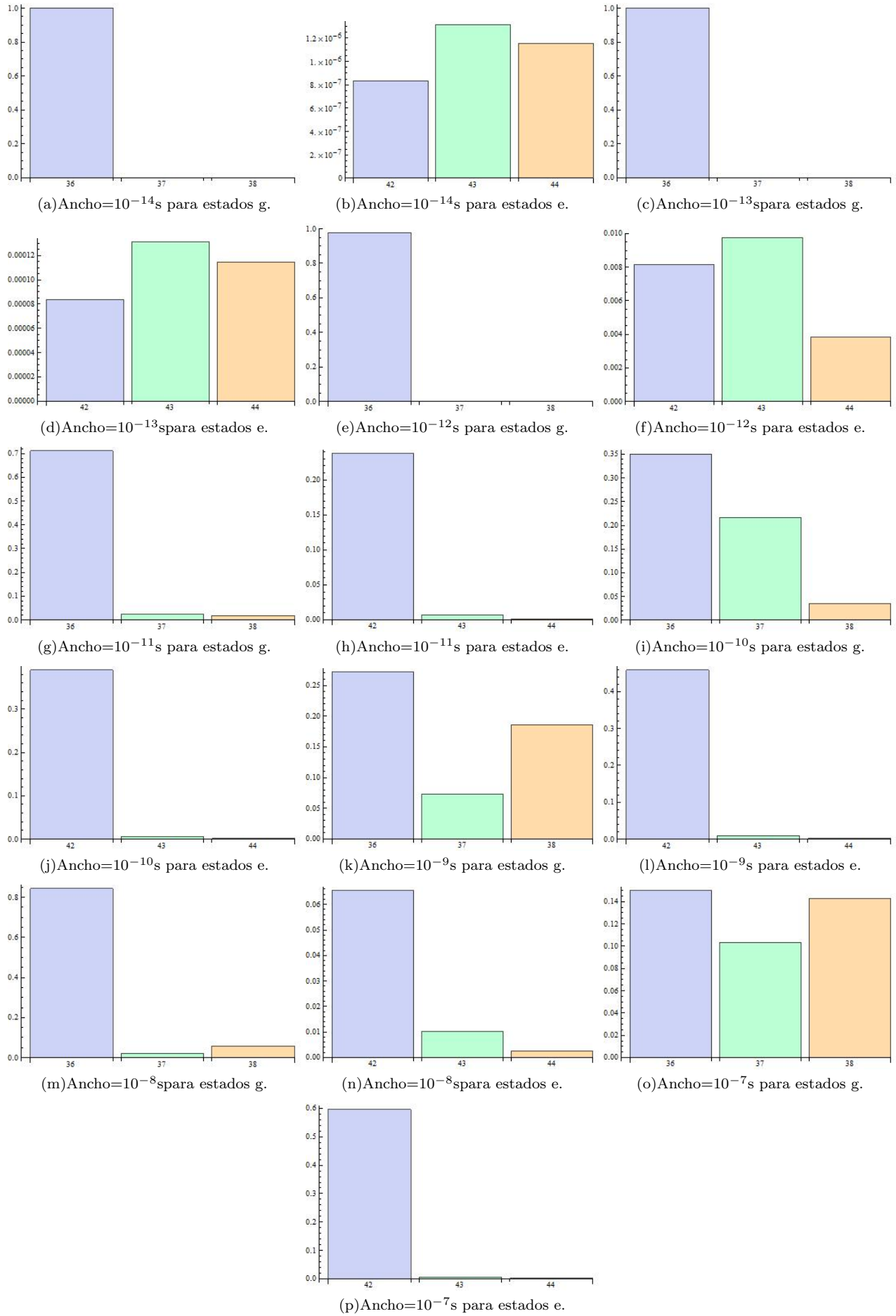


FIG. 2 Respuesta poblaciones estados vibracionales molécula RbCs despues de ser sometida a un pulso gaussiano con diferentes anchos y amplitud 10^{-4} , agrupada en estados electronicos.

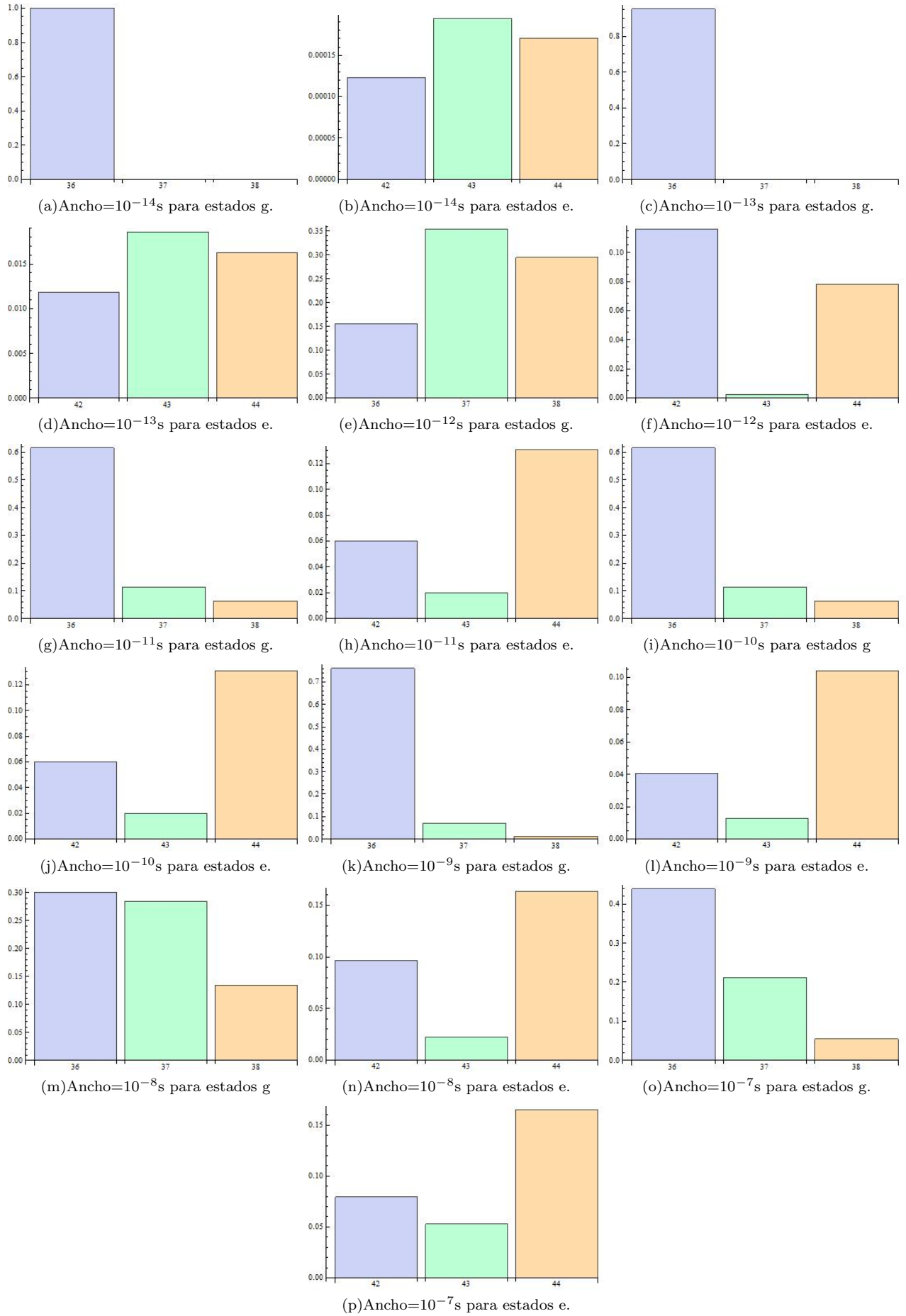


FIG. 3 Respuesta poblaciones estados vibracionales molécula RbCs despues de ser sometida a un pulso gaussiano con diferentes anchos y amplitud 0.012151214 a.u., agrupada en estados electrónicos.

Collective dynamics of polar molecules in 1D optical lattices

Vanessa Olaya¹ and Karen Rodríguez^{1,2}

¹ Departamento de Física, Universidad del Valle, Cali, Colombia

² Centre for Bioinformatics and Photonics – CiBioFi, Calle 13 No. 100-00, Edificio 320 No. 1069, Cali, Colombia

Received: date / Revised version: date

Abstract. We study a LiCs strongly-interacting molecular gas loaded on an one-dimensional lattice. The molecules are in the lowest electronic and rovibrational state. Allowing the molecules being in the rotational states $N = 0, 1$, the coherent population transfer between the singlet and triplet sublevels in the molecular Mott-insulator regime as a function of an external DC electric field is analyzed. Due to the large inter-molecular lattice distance and low filling, the dipole-dipole interaction in the nearest-neighbor approximation governs the excitation dynamics. The full set of internal degrees of freedom are taken into account and the numerical simulations are performed using the Matrix Product State formalism. Coherent excitation transference along the lattice are shown for several electric field intensities. The excitation-entanglement dynamics is also presented for moderate and strong field limits leading to ...

PACS. 020.0020 Atomic and molecular physics – 020.1670 Coherent optical effects.

1 Introduction

The new era of cold quantum matter involving ultracold and quantum degenerate molecular gases is currently on the focus of interest within the atomic physics, molecular physics and physical chemistry communities. The richness of molecular physics, besides the enormous control and high tunability, leads to an abroad spectra of applications in diverse fields going from precision measurement and high-resolution spectroscopy [9, ?, ?] to ultracold chemistry [12] and quantum information processing [13].

Cold lattice gases, either atomic or molecular, are often proposed as quantum simulators mimicking, for instance, the Hubbard [8] and Heisenberg [6, ?] models, serving as a paved way to develop new experimental, theoretical and numerical tools.

The production of ultracold ground state molecules opens the path to derive effective many-body models for nonreactive molecules in tight traps as optical tweezers [32, 33] and optical lattices [31]. [Ver archivo biblioMolecules.bib](#)

The successful association of two pre-cooled atoms to form molecules has been achieved using Feshbach resonances [14] and photoassociation [15]. Due to the atom-atom association mechanism, it has been shown experimentally [16, ?] and numerically [18] that photoassociation in a laser-cooled mixture of 85Rb and 133Cs atoms, followed by radiative stabilization, populates preferentially a $3\Sigma_+$ levels with low binding energy. Hence the triplet-rovibrational excited state has higher probability to be populated [19] and a further technique known as stimulated Raman adiabatic passage or STIRAP [20] must be implemented to undergo the singlet-rovibrational ground

state. Although this technique is experimentally complex, it is highly efficient and state-selective. Nevertheless, it can only be applied once per experimental realization, limiting the ultimate number of ground state molecules.

Hence, it is interesting to analyze the coherent population transfer between the singlet [21] and triplet sublevels of the rovibrational ground-state in the Mott-insulator-molecular regime [22] as a function of the dipolar interaction and an external DC electric field. For which strongly interacting many-body molecular gases loaded on one-dimensional optical lattices are studied.

This document is divided as follows: in sect. 2 we describe both the model of the molecular lattice system and the implemented numerical method. Section 3 is devoted to the molecular excitations dynamics in presence of an external DC electric field. Finally, a summary is included in sect. 4.

2 Model and method description

2.1 Molecular Hamiltonian in the Mott-insulator regime

We consider an optical lattice fully filled with one molecule per lattice site. The lattice sites are separated by 400 nm [28], hence, we assume that tunneling between lattice sites is completely suppressed. Considering a low lattice filling the on-site Hubbard interaction is neglected as well. Thus, the interaction between the molecules is solely determined by the long-range anisotropic dipole-dipole interaction.

Therefore, the Hamiltonian representing the system focus on the excitation energy operator[29];

Aquí debe ir una figura del sistema figuresystem

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{N_{mol}} \left(B_e \hat{N}_n^2 - \mathbf{d}_n \cdot \mathbf{E} \right) + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_{mol}} \sum_{m \neq n}^{N_{mol}} \hat{V}_{dd}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m), \quad (1)$$

where $\mathbf{r}_n$ is the position of the n -th lattice site, B_e is the rotational constant, $\mathbf{d}_n$ is the electric dipole operator of the individual molecules, $\mathbf{E}$ is the constant electric field, $\hat{N}_n$ is the rotational angular momentum operator of the molecule at the site n and $\hat{V}_{dd}$ is the dipole-dipole interaction between molecules in different lattice sites. N_{mol} is the total number of molecules.

Hamiltonian (1) can be transformed by means of the second quantization formalism introducing the bosonic field operators, $\sum_{nf} \hat{b}_{nf}^\dagger \psi_n^f(\zeta_n)$, where $\psi_n^f(\zeta_n)$ is the isolated molecule eigenfunction with eigenvalue ϵ_f and ζ_n represents the internal degrees of freedom of the n -th molecule in the f state.

The local rotational Hamiltonian, $\sum_n B_e \hat{N}_n^2$, corresponds to the crystal energy operator without intermolecular interactions, this term becomes diagonal in the single molecule basis,

$$\hat{H}_0 \equiv \sum_{nf} \epsilon_f \hat{b}_{nf}^\dagger \hat{b}_{nf}. \quad (2)$$

The DC field, $\mathbf{E}$, contributes as a potential acting only on the internal coordinates of a single molecule, and it couples two different local molecular states,

$$\hat{V}_n \equiv \sum_{n,f,g} \hat{b}_{ng}^\dagger \hat{b}_{nf} \langle g | \mathbf{d}_n \cdot \mathbf{E} | f \rangle. \quad (3)$$

Finally, the dipole-dipole operator, $\hat{V}_{dd}$, involves two different sites and mixes two different molecular states, its second quantization representation is given by,

$$\hat{U}_{nm} \equiv \sum_{n,f,g,m,f',g'} \hat{b}_{nf}^\dagger \hat{b}_{mg}^\dagger \hat{b}_{mg} \hat{b}_{nf} \langle f'g' | \hat{V}_{dd}^{nm} | gfg \rangle. \quad (4)$$

The expected values in equations (3) and (4) are given by,

$$\begin{aligned} \langle g | \mathbf{d}_n \cdot \mathbf{E} | f \rangle &= \int \psi_n^{*g}(\zeta_n) \mathbf{d}_n \cdot \mathbf{E} \psi_n^f(\zeta_n) d\zeta_n, \\ \langle f'g' | \hat{V}_{dd}^{nm} | gfg \rangle &= \\ &= \int \psi_n^{*f'}(\zeta_n) \psi_m^{*g'}(\zeta_m) \hat{V}_{dd}^{nm} \psi_m^g(\zeta_m) \psi_n^f(\zeta_n) d\zeta_n d\zeta_m. \end{aligned} \quad (5)$$

In absence of a static electric field, the rotational ground state of a given diatomic molecule has a rotational momentum $N = 0$. While the first excited rotational state $N = 1$ is triply degenerated. In the presence of an electric field, the Stark effect is accounted for, the degeneracy of

$N = 1$ is lifted and splits into two subenergy levels corresponding to the projections $M = 0$ and $M = \pm 1$ on the electric field quantization axis (see fig. field) aquí va la imagen de como cambia los estados con el campo que aún no la tengo. For a strong field, the system reduces to a two-level problem considering exclusively the states with projections $M = 0$ at the field axes, for the two involved rotational states $N = 0, 1$ [reference]. Whereas for a moderate slow static electric field the complete system must be considered.

It is convenient to introduce new excitation operators defined by the relations [30],

$$\hat{B}_{nf} = \hat{b}_{n0}^\dagger \hat{b}_{nf}, \quad \hat{B}_{nf}^\dagger = \hat{b}_{nf}^\dagger \hat{b}_{n0}, \quad (6)$$

where the operator $\hat{B}_{nf}$ ($\hat{B}_{nf}^\dagger$) annihilates (creates) the state f of the n -th molecule.

Making use of this new operators and the relations (2), (3) and (4) the excitation energy operator (1) is finally written in second-quantization representation as follows, for further reading see Ref. [30],

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \epsilon_{eg} \sum_n \hat{B}_{n,M}^\dagger \hat{B}_{n,M} + \frac{1}{2} \sum_{n,m \neq n} J_{n,m}^{M,M'} \hat{B}_{n,M}^\dagger \hat{B}_{m,M} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{M,M' \neq M} \sum_{n,m \neq n} J_{n,m}^{M,M'} \hat{B}_{n,M}^\dagger \hat{B}_{m,M'}, \end{aligned} \quad (7)$$

where the matrix elements $J_{n,m}^{M,M'} \equiv \langle f'g' | \hat{V}_{dd}^{nm} | gfg \rangle$ determine the selections rules among the molecules.

The Hamiltonian (7) allows us to describe the excitations behavior as a function of the external electric field and to study the coherent transfer population between the two involved rovibrational molecular sublevels. The coefficients $J_{n,m}^{M,M'}$ provide the molecular selection rules, which determine the restricted phase space accessible at low-energy and lead to the coherent and reversible process taking place in the system.

The next step is to find the matrix elements of the dipole-dipole interaction in order to determine the dynamics of the problem. In general, the Molecular Fixed Frame (MFF) is used to describe a system of this sort, but due to the applied static electric field the best way to represent the intermolecular interaction is in the Laboratory Fixed Frame (LFF). Here, Euler angles ϕ, θ, χ relate these two frames according to fig. (euler). The long-range anisotropic interaction for polar molecules in the LFF is given by [34],

$$\hat{V}_{dd}(\mathbf{r}) = -\frac{\sqrt{6}}{r^3} \sum_{q=-2}^2 -1^q C_{-q}^2(\mathbf{r}) [\hat{d}_n \otimes \hat{d}_m]_q^{(2)}, \quad (8)$$

where $C_{-q}^2(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_{-q}^{(2)}(\mathbf{r})$ are the reduced spherical harmonics (non-normalized) that describe the movement of the intermolecular axis $\hat{e} = \frac{\mathbf{r}}{r}$, here $\mathbf{r} = \mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m$, donde q es...?. The one-dimensional confinement due to the lattice reduce this operator to a simple factor.

The operators in (8) contain the information about the size of the dipole moment and the term is equal to $\sum_p \langle 1p, 1q - p | 2q \rangle \hat{T}_p^1(\hat{d}_n) \hat{T}_{q-p}^1(\hat{d}_m)$, which is a second rank tensor product of two tensors of rank one $\hat{T}_i^1(\hat{d}_j)$ each one of them represents the dipole moment operator of the molecules in the site $j \in \{n, m\}$, donde p es...?, cómo relacionamos q y p con f y g o con M y M'.

A simple form to calculate the matrix element of the dipole-dipole interaction is by using the Wigner 3-j symbols;

$$\begin{aligned} \langle \hat{V}_{dd} \rangle = & (-1)^{M'_n + M'_m + M_l + 1} [l, l', J_n, J'_n, J_m, J'_m] \\ & \times \frac{d^2 \sqrt{6}}{r^3} \begin{pmatrix} l & 2 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 2 & l' \\ -M_l & M_l - M'_l & M'_l \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ M_n - M'_n & M_m - M'_m & M_l - M'_l \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} J_n & 1 & J'_n \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_n & 1 & J'_n \\ -M_n & M_n - M'_n & M'_n \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} J_m & 1 & J'_m \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_m & 1 & J'_m \\ -M_m & M_m - M'_m & M'_m \end{pmatrix}. \quad (9) \end{aligned}$$

Here $[J]$ is a short-hand notation for $\sqrt{2J+1}$.

Esta matriz está tal cual la referencia, como tal en la referencia no citan nada, simplemente la ponen porque se puede llegar a ella "relativamente fácil", pero tedioso, de todas formas voy a cambiarle algunas cosas (simplificar algunas matrices) para que no quede igual

ALgo importante que a'un no he está es poner explicitamente la reglas de selection y como se pueden ver en la forma matricial de la interaction dipolar, y podra ponerse un ejemplo (imagen que an no tengo) de estas probabilidades de poblar uno u otro estado dependiendo de como sea la configuracion of the two-sites system

2.2 Time evolution calculation

Numerical calculations reveal important aspects in the ultracold interacting molecular behavior. In low dimensions, quantum fluctuations are enhanced and therefore quantum particles systems, in general, are not susceptible to the standard mean field or perturbation expansion methods and one has to turn to non-perturbative techniques and numerical methods. Here, we use the Matrix Product State (MPS) ansatz [23–26] to efficiently approximate the quantum states. This formalism is highly recommended when the amount of entanglement in the system is limited reducing the calculation complexity from an original exponential to an algebraic growing of the Hilbert space. Based on the MPS state representation, we use the Time-Evolving Block Decimation (TEBD) method [24] to analyze numerically the molecular quantum-chain dynamics, taking into account the quantum entanglement are correlations. This algorithm takes advantage from the fact that the Hamiltonian can be written as the sum over an *even* and an *odd* sites and then, the time evolution operator

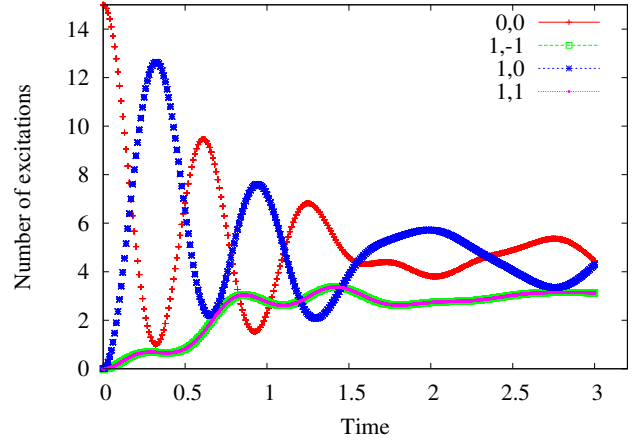


Fig. 1: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo para un campo eléctrico de 1500V/cm para un estado inicial en donde todas moléculas de la red se encuentran en el estado base rotacional

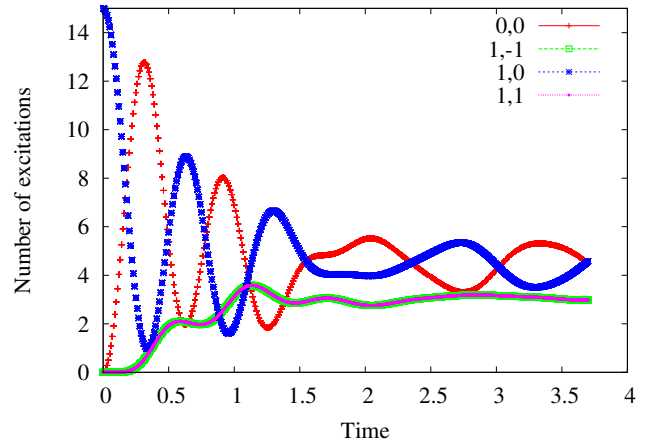


Fig. 2: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo para un campo eléctrico de 1500V/cm para un estado inicial en donde todas moléculas de la red se encuentran en el estado 1,0

is approximated using the Trotter-Suzuki expansion formula [27]. Since the entanglement of the system grows on time, to keep the matrices of the same size means to lose information through out the time evolution. In order to avoid so, one has to adapt the value of the entanglement parameter χ in each time-step to keep the state as faithful to the real one as much as possible.

The discussion about the system depends on the fact that the dipole-dipole interaction for the nearest neighbor molecules separated by 400nm is small compared with the rotational energy $B_e \hat{N}_n^2$, it means that the intermolecular interaction could be disregarded for the second neighbor [reference]. This approximation allows us to use our numerical method for the time evolution calculation.

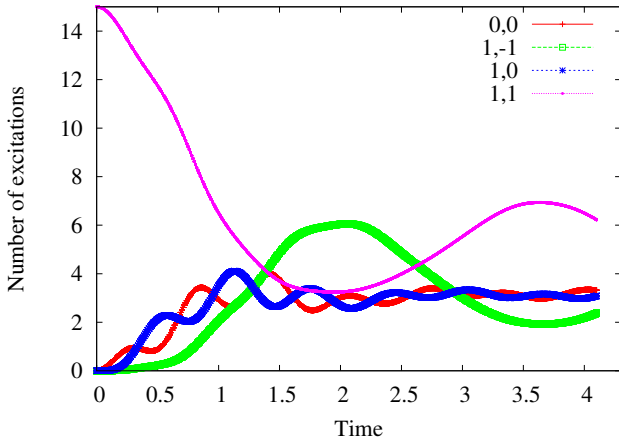


Fig. 3: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo para un campo eléctrico de 1500V/cm para un estado inicial en donde todas moléculas de la red se encuentran en el estado 1,1

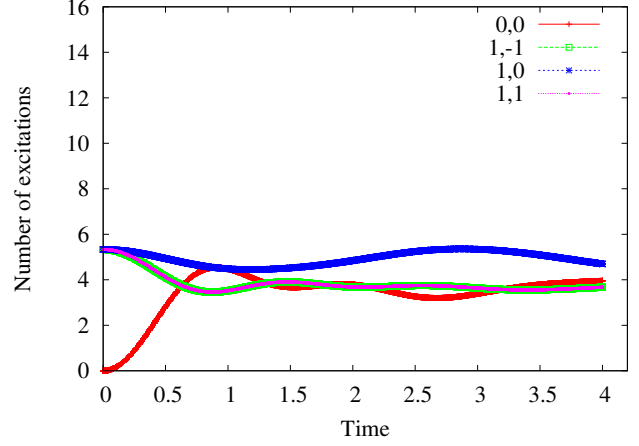


Fig. 5: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo para un campo eléctrico de 200V/cm para un estado inicial en donde todas moléculas se encuentran en una superposición equiprobable de los estados (1,-1), (1,0), (1,1)

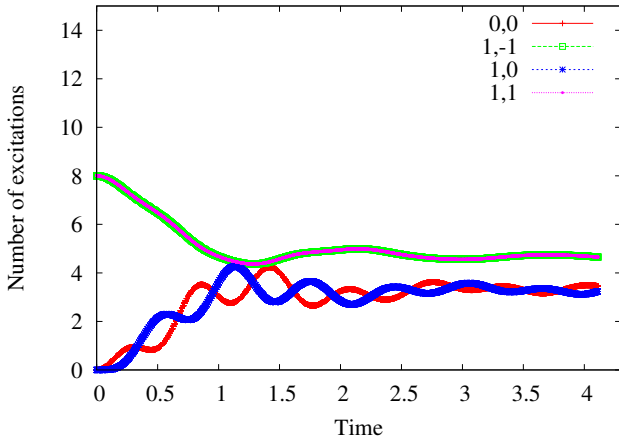


Fig. 4: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo para un campo eléctrico de 1500V/cm para un estado inicial en donde todas las moléculas de la mitad de la red se encuentran en el estado inicial 1,1, mientras que la otra mitad se encuentra en el estado inicial 1,-1

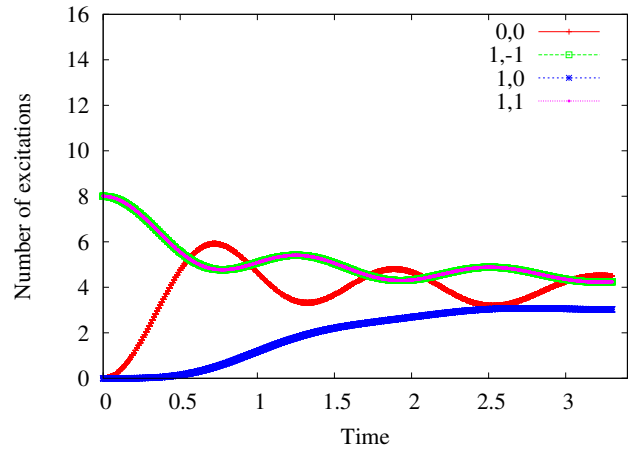


Fig. 6: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo para un campo eléctrico de 200V/cm para un estado inicial en donde todas moléculas se encuentran en una superposición equiprobable de los estados (1,-1), (1,1)

3 Molecular excitation dynamics

We will consider different scenarios that are given for a particular static electric field and initial state of the system. All the possible combination of these conditions are shown in the fig. tal as a function of time.

For systems with $E=200V/cm$:

The static electric field couples the states with same projection, it means states with $\langle N, M = 0 \rangle$, where $N = 0, 1$ and because of that for low electric field (200V/cm) the dynamic of a systems where the initial state is $\langle 0, 0 \rangle$ and $\langle 1, 0 \rangle$ have the same shape, but at different times. This is due that for initial state with all the molecules are in their ground rotational state (fig. tal) the molecules

will populated faster the three different state with $N = 1$, compare with the case where the inicial state is $\langle 1, 0 \rangle$ (fig. tal), here the molecules have just one option at first: go to the rotational ground state and after that they are allow to populated the states with $N = 1$. This phenomenon can be seen in figure 0t where the states $\langle 1, \pm 1 \rangle$ remain at zero for longer time that in figure 0s.

Besides the system represented by figure 0s is the only one that shows the tendency to a stationary state after a ≈ 1.5 in time scale.

If the $\langle 1, 1 \rangle$ state is taken to be the initial state for all the molecules (figure 1) the system will drop the population into $\langle 0, 0 \rangle$ state, then into $\langle 1, -1 \rangle$ and finally the $\langle 1, 0 \rangle$ will enter in the dynamic. The field dressed states

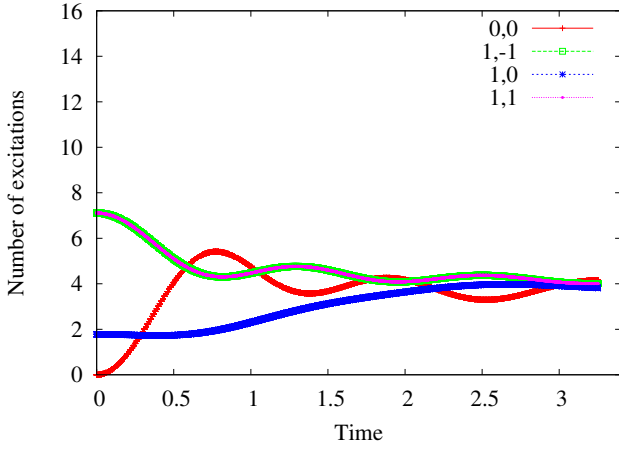


Fig. 7: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo para un campo eléctrico de 200V/cm para un estado inicial en donde todas moléculas se encuentran en una superposición de los estados $(1,-1)$, $(1,0)$, $(1,1)$ con una "distribución de pesos" de 2,1,2 respectivamente para cada estado

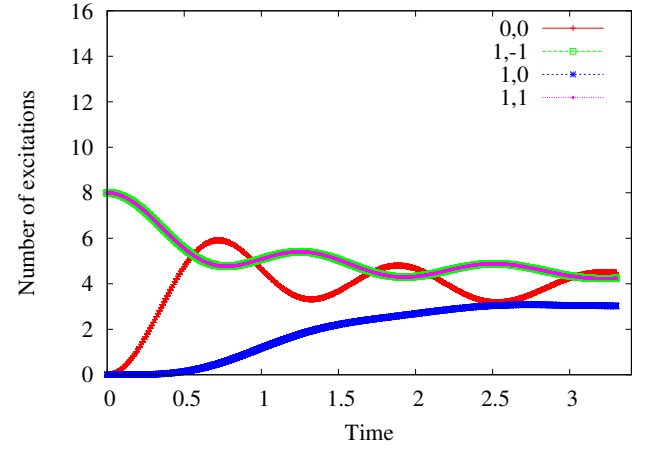


Fig. 9: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo para un campo eléctrico de 200V/cm para un estado inicial en donde todas moléculas se encuentran en una superposición de los estados $(1,-1)$, $(1,1)$ con una "distribución de pesos" de 3,3 respectivamente para cada estado

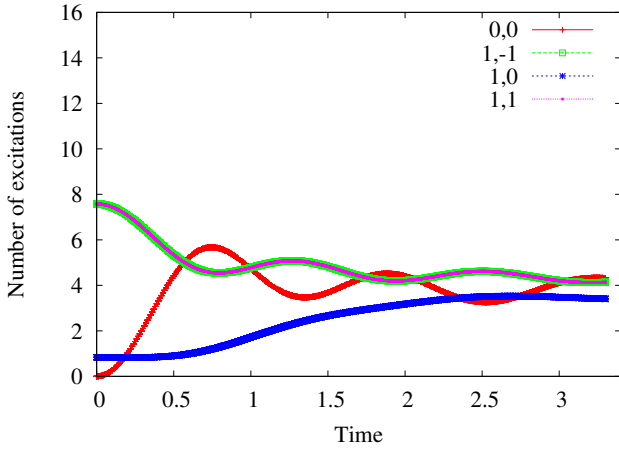


Fig. 8: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo para un campo eléctrico de 200V/cm para un estado inicial en donde todas moléculas se encuentran en una superposición de los estados $(1,-1)$, $(1,0)$, $(1,1)$ con una "distribución de pesos" de 3,1,3 respectivamente para cada estado

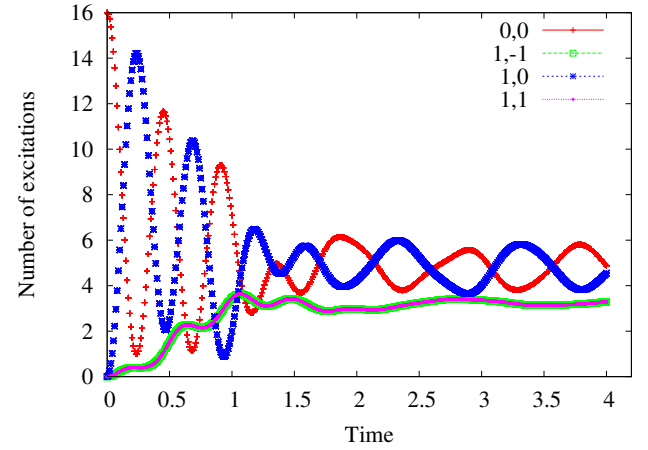


Fig. 10: Número de excitaciones de cada tipo que se presentan a lo largo del tiempo en un campo eléctrico crítico para la molécula de LiCs de 2100V/cm para un estado inicial en donde todas moléculas se encuentran en el estado base rotacional. Es mejor no tener en cuenta esta imagen porque como se ve en ella, no se obtiene que la dinámica para los estados $(1,1)$ y $(1,-1)$ tienda a cero como se esperaba y debe ser porque el modelo teórico que estamos utilizando no aplica

with $M = \pm 1$ have the same energy, hence they have the same probability to be populated that is the reason that $\langle 1, -1 \rangle$ state comes first in the dynamic than $\langle 1, 0 \rangle$ state for this case where the population starts at $\langle 1, 1 \rangle$ state.

What would happen if half of the molecules are in $\langle 1, 1 \rangle$ state and the other are in $\langle 1, -1 \rangle$ state? This particular case can be seen in figure 4. $\langle 1, 1 \rangle$ and $\langle 1, -1 \rangle$ states will behave like one-state making that the population $\langle 1, 0 \rangle$ state remains constant and null up to a time of 0.5. In fact this case is the same that loading all the molecules in an symmetrical superposition of $\langle 1, -1 \rangle$ and $\langle 1, 1 \rangle$ states, this is shown in figure super 101.

As the electric field increase **(but low enough to consider its action small compare with the rotational energy of each molecule-cita)* the coupling between the states with $M = 0$ gets stronger, therefore the dynamic will be reduce to this two states. In fact, figure tal shows this type of dynamic for an electric field equal to 1500V/cm and where the inial state for all the molecules has $M = 0$, $\langle 1, \pm 1 \rangle$ states do not play a significant role for the time evolution. In contrast, making $\langle 1, 1 \rangle$ the initial state bring us to a

different time evolution (figure tal), according to the selection rules molecules will go to the ground states, but due to the action of the electric field $\langle 1, 0 \rangle$ state have a large probability to take a part in the dynamic once the the ground states get into it as well, that why it is possible to see the coherent transference of population between $\langle N, M = 0 \rangle$ ($N = 0, 1$) states, but at the same time $\langle 1, \pm 1 \rangle$ states are struggling to be equally populated and have a coherent transference of population mediated by rotational ground state.

In agreement to reference [tal](#) the first rotational excited state ($N = 1$) has the greatest probability to be populated after a STIRAP process to decrease the excitement fo the molecule, in order to compare the numeral data with the experiment, we propose a particular inicial states where all the molecules are in a linear combination of equal-probable $N = 1$ -states (figure tal). Here can be seen that after time equals to 1 the dynamic tends to a constant value of population per state, this seems to happen in all cases, but in this particular one occurs faster. For a non-equal superposition of states with $N = 0$ (figure tal) the system is likely to stabilize after time 3 and around an number that equally populated states: 4.

Finally for all the different inicial states the dynamic will be between 2 and 6 ocupation per states after a time equal to 3. [se me acab la inspiración, maana sigo estucando el texto](#)

- La condición inicial.
- Fijar dos campos DC.
- Evolución coherente de la poblacin para dicha condición inicial y comparar los dos campos DC.
- Cambiar la condicin inicial a un estado superposicin nicamente con los estados del triplete (puede ser Fock o estado coherente) y presentar como evolucionan las poblaciones de las excitaciones.

4 Summary

5 Acknowledgments

This work has been supported by Universidad del Valle under the internal project 7967. The authors also acknowledges the support from the Colombian Science, Technology and Innovation Fundation — COLCIENCIAS under project 1106-712-49884 (contract FP-005-2015).

References

1. Bloch, I., Dalibard, J. and Zwerger, W. (2008), Rev. Mod. Phys. 80, 885.
2. Greiner, M., Mandel, O., Esslinger, T., Hansch, T.W. and Bloch, I. (2002), Nature (London) 415, 39.
3. Jördens, R., Strohmaier, N., Gnter, K., Moritz, H. and Esslinger (2008), T. Nature (London) 455, 204.
4. Schneider, U., Hackermuller, L., Will, S., Best, T., Bloch, I., Costi, T. A., Helmes, R. W., Rasch, D. and Rosch, A. (2008), Science 322, 1520.
5. Trotzky, S., Cheinet, P., Flling, S., Feld, M., Schnorrberger, U., Rey, A. M., Polkovnikov, A., Demler, E. A., Lukin, M. D. and Bloch, I. (2008), Science. 319, 295.
6. Rodríguez, K., Argüelles, A., Colomé-Tatché, M., Vekua, T. and Santos, L. (2010), Phys. Rev. Lett. 105, 050402.
7. Rodríguez, K., Argüelles, A., Kolezhuk, A. K., Santos, L. and Vekua, T. (2011), Phys. Rev. Lett. 106, 105302.
8. Rodríguez, K., Manmana, S. R., Rigol, M., Noack, R. M. and Muramatsu, A. (2006), New J. Phys. 8, 169.
9. Hudson, J. J., Sauer, B. E., Tarbutt, M. R. and Hinds, E. A. (2002), Phys. Rev. Lett. 89, 023003.
10. Zelevinsky, T., Kotochigova, S. and Ye, J. (2008), Phys. Rev. Lett. 100, 043201.
11. DeMille, D., Sainis, S., Sage, J., Bergeman, T., Kotochigova, S. and Tiesinga, E. (2008), Phys. Rev. Lett. 100, 043202.
12. Krems, R. V. (2005), Int. Rev. Phys. Chem. 24, 99.
13. DeMille, D. (2002), Phys. Rev. Lett. 88, 067901
14. Köhler, T., Gral, K. and Julienne, P. S. (2006), Rev. Mod. Phys. 78, 1311.
15. Jones, K. M., Tiesinga, E., Lett, P. D. and Julienne, P. S. (2006), Rev. Mod. Phys. 78, 483.
16. Kerman, A. J., Sage, J. M., Sainis, S., Bergeman, T. and DeMille, D. (2004), Phys. Rev. Lett., 92, 033004.
17. Sage, J. M., Sainis, S., Bergeman, T. and DeMille, D. (2005), Phys. Rev. Lett., 94, 203001.
18. Londoo, B. E., Mahecha, J., Luc-Koenig, E. and Crubellier, A. (2011) Phys. Chem. Chem. Phys., 13, 18738.
19. Lang, F., Winkler, K., Strauss, C., Grimm, R. and Hecker Denschlag, J. (2008), Phys. Rev. Lett. 101, 133005.
20. Bergmann, K., Theuer, H. and Shore, B. W. (1998), Rev. Mod. Phys. 70, 1003.
21. Deiglmayr, J., Grochola, A., Repp, M., Mrtlbauer, K., Glck, C., Lange, J., Dulieu, O., Wester, R., and Weidemller, M. (2008), Phys. Rev. Lett. 101, 133004.
22. Volz, T., Syassen, N., Bauer, D. M., Hansis, E., Dürr S., and Rempe G. (2006), Nature Phys. 2, 692.
23. Vidal, G. (2003), Phys. Rev. Lett. 91, 147902.
24. Vidal, G. (2004), Phys. Rev. Lett. 93, 040502.
25. Verstraete, F., Garca-Ripoll, J. J. and Cirac (2004), J. I., Phys. Rev. Lett. 93, 207204.
26. Verstraete, F., Porras D. and Cirac, J. I. (2004), Phys. Rev. Lett. 93, 227205.
27. Suzuki M. (1990), Phys. Lett. A 146,319.
28. Bloch, I. (2005), Nature Phys. 1, 23.
29. Herrera, F. and Litinskaya, M. and Krems, R. V. (2010), Phys. Rev. A 82, 033428.
30. Agranovich, V., *Excitations in Organic Solids*, Oxford University Press,2008.
31. DocajPRL2016
32. KaufmanPRX2012
33. ThompsonPRL2013
34. TicknorPRA2007
35. RablPRA2007

Anexos 2:

2a) Trabajo de Grado, “Solving Dirac equation for H_2^+ using B-splines” por el estudiante de pregrado Mario Henao Ayala.

2b) Acta de Sustentación del Trabajo de Grado del estudiante Mario Henao Ayala.

Trabajo de grado
(Proyecto de investigación)

Facultad de Ciencias Naturales y Exactas
Universidad del Valle



Solving Dirac equation for H_2^+ using B-splines

By:
Mario A. Henao Ayala

Advisor:
Prof. Javier Madroñero

Co-advisor:
Dr. Beatriz Londoño

Santiago de Cali, Septiembre 2 del 2016

Contents

Abstract	iii
Resumen	v
Introduction	1
1 Dirac equation for H_2^+	3
1.1 Dirac equation formalism	3
1.1.1 Derivation of <i>Dirac equation</i>	3
1.1.2 Comments on the positivity of probability	4
1.1.3 Dirac matrices	4
1.2 Methodology	5
1.2.1 Dirac equation for H_2^+ in elliptic coordinates	5
1.2.2 Reducing one dimension of the problem	6
2 Numerical implementation of Dirac Equation for H_2^+ in elliptic coordinates	9
2.1 B-splines as a basis set	9
2.1.1 General aspects of the B-splines	9
2.2 Code description	11
2.3 Example: Yukawa potential	13
2.4 Discussion on convergence	13
2.4.1 Dilation transformation	14
2.4.2 Preliminary results	14
3 Summary and outlook	17
A Dirac Equation for H_2^+	19

Abstract

Controlled formation of molecules in the ground state has represented a challenge. Nevertheless, there has been important advances in this direction in molecular physics and chemistry due to its variety of applications, specially for being good candidates for quantum simulators. Photo-association is a technique developed to achieve this task starting from ultracold gases of atoms and carefully carrying it to a molecular system in the ground state. This technique has been proved to be enhanced via spin-orbit couplings in the system. Due to this, it is important to understand from a relativistic point of view the behavior of molecular systems.

In this work we present a numerical approach to the solution of the *Dirac equation* for the H_2^+ molecule. In the first chapter we show the methodology used to reduce the problem to a *generalized eigenvalue problem*. In the second chapter we describe the numerical implementation which is finally used to calculate the ground state energy for the system and we discuss on the convergence of the results obtained.

Resumen

La formación controlada de moléculas en el estado base ha representado un desafío, pero al tiempo también ha habido importantes avances en esta dirección en física molecular y química debido a su variedad de aplicaciones, en especial por ser buenos candidatos para ser simuladores cuánticos. La foto-asociación es una técnica desarrollada para cumplir esta tarea empezando desde un gas de átomos ultrafríos y llevándolos cuidadosamente hasta el estado base de un sistema molecular. Se ha probado que esta técnica se ve favorecida por el acople espín-órbita presente en el sistema. Debido a esto es importante entender los sistemas moleculares desde una perspectiva relativista.

En este trabajo presentamos un acercamiento numérico a las solución de la *ecuación de Dirac* para la molécula de H_2^+ . En el primer capítulo mostramos la metodología utilizada para llevar el problema a un *problema de valores propios generalizado*. En el segundo capítulo describimos la implementación numérica que finalmente es usada para calcular la energía del estado base de este sistema y discutimos sobre la convergencia de los resultados obtenidos.

Introduction

Photo-association of cold atoms has been the first successful approach to form molecules in the ground state at temperatures in the order of micro-Kelvin. The major challenge to the formation of these molecules is to take the long distances between atoms in an ultracold gas to the typical distances of a molecular bond in the ground state [1]. The energy level structure and the ro-vibrational wave functions of alkali dimers, when we take into account heavy atoms, is drastically changed due to *spin-orbit coupling*. This coupling is the responsible of phenomena that enhances photo-association such as excited electronic molecular potentials with double well structure and resonant couplings between electronic states [2].

Perturbative approaches to the *spin-orbit coupling* take us to approximate functions that in general have to be adjusted to the experimental data of the specific molecule studied. Several works treat the problem by starting from *Schrödinger equation* and introducing *spin-orbit coupling* as a perturbation to the Hamiltonian [1–5].

High resolution spectroscopy, thank to photo-association of cold atoms, has revealed the important role of *spin-orbit coupling* [6], in particular to enhance the photo-association process [1–3].

Molecular potentials corresponding to excited electronic states exhibits interesting properties on creating molecules in the ground state, the majority of examples in the literature come from creation of double well potentials and resonant coupling of two electronic states, and both phenomena are present in heavy alkali dimers due to its strong *spin-orbit coupling* [3–5].

Rigorous calculations [5, 7] study this *spin-orbit* interaction starting from *Schrödinger equation* as mentioned before. However, solving *Dirac equation* for heavy molecules is a difficult task. In this work we propose an approach to this problem, that is solving *Dirac equation* for the simplest possible molecule which is H_2^+ to start the understanding of this coupling from a more fundamental point of view.

We use a basis, called B-splines, introduced by Schoenberg in 1946 [8] and already successfully used in several atomic and molecular systems showing good results in both bound and continuum states [9–13] not only for *Schrödinger equation* but also for *Dirac equation*.

In Chapter 1 we discuss the formalism of *Dirac equation* together with some definitions and properties of quantities of physical interest. Then we expose a coordinate system useful to reduce the problem of the H_2^+ molecule to 4 coupled differential equations due to a symmetry related to the conservation of the z -component of the total angular momentum of the electron; this problem can be transformed into a *generalized eigenvalue problem*. In Chapter 2 we present the procedure used to solve numerically the *generalized eigenvalue problem* presented in the previous chapter. First we present some important properties of *B-splines*, then we describe the numerical method

to find the eigenvalues for the H_2^+ molecule, showing an example of a previous version of the program to solve the 1-dimensional *Screened hydrogen atom*, (*Yukawa potential*), and finally we show some preliminary results on the ground state energies of this molecule and discuss on the convergence. In Chapter 3 we give some conclusions and perspectives of this work.

Chapter 1

Dirac equation for H_2^+

Knowing that the *spin-orbit coupling* is an merely relativistic effect, it is important to consider the problem under the Dirac formalism to have a more fundamental idea about this interaction in specific. In this section we will explain in brief the Dirac equation formalism and we will explain the methodology used to reduce the initial problem for the the H_2^+ molecule to a 2-dimensional system of 4 coupled differential equations.

1.1 Dirac equation formalism

1.1.1 Derivation of *Dirac equation*

The idea behind the *Dirac equation* is basically to construct a equation able to describe the behavior of a *spin-1/2* particle in the framework of *Special Relativity* [14], introduced by P.A.M Dirac in 1929. We claim that solutions of that equation must satisfy the *Einstein relation* for energy

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4, \quad (1.1)$$

where p and m are the momentum and mass of the particle, respectively, and c is the speed of the light.

In order to have a positive *density* (built from the wave function), we need to consider a differential equation of first order, in contrast to *Klein-Gordon equation*. The requirement of relativistic covariance demands that the spatial derivatives may only be of first order too [15], in atomic units that is

$$i \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} = [c \alpha^k p_k + \beta m c^2] \bar{\phi} = \left[\frac{c}{i} \alpha^k \partial_k + \beta m c^2 \right] \bar{\phi} \equiv H \bar{\phi}. \quad (1.2)$$

As we can see the Hamiltonian H is linear in the rest energy and in momentum but the coefficients α^k and β can not be just numbers because they will not satisfy (1.1), thus they have to be $N \times N$ matrices and $\bar{\phi}$ is necessarily an N -component quantity.

We also need (1.2) to be Lorentz covariant and there exist a conserved 4-current whose time component is a positive density.

Acting two times the hamiltonian on a wave function $\bar{\phi}$ and comparing this to the *Klein-Gordon equation* we can see that the matrices must satisfy the following relationships

$$\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 2\delta^{ij} \mathbb{I}, \quad \alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0, \quad (\alpha^i)^2 = \beta^2 = \mathbb{I}. \quad (1.3)$$

1.1.2 Comments on the positivity of probability

Writing the adjoint to $\bar{\phi}$ as

$$\bar{\phi}^\dagger = (\bar{\phi}_1^*, \dots, \bar{\phi}_N^*), \quad (1.4)$$

and multiplying it to (1.2) we can build a continuity equation, if and only if the matrices α^i and β are hermitian, i.e.,

$$(\alpha^i)^\dagger = \alpha^i, \quad \beta^\dagger = \beta. \quad (1.5)$$

The quantity that fulfills this continuity equation is the *density* defined by

$$\rho \equiv \bar{\phi}^\dagger \bar{\phi} = \sum_{\alpha=1}^N \bar{\phi}_\alpha^* \bar{\phi}_\alpha \quad (1.6)$$

and the *current density*

$$j^k \equiv c \bar{\phi}^\dagger \alpha^k \bar{\phi}, \quad (1.7)$$

with temporal component $j^0 \equiv c\rho$, which is positive definite, and can be interpreted as a probability density [15].

1.1.3 Dirac matrices

According to (1.3) these matrices possess only eigenvalues ± 1 ; also they are traceless

$$\text{Tr} \alpha^k = \text{Tr} \beta = 0, \quad (1.8)$$

then we can say that at least that N is even. Finally it can be proven that the smallest N possible to realize the algebraic structure in (1.3) is 4 [15].

A particular representation of the *Dirac matrices* is

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}, \quad (1.9)$$

that together with (1.2) is referred to as the *standard representation* of the *Dirac equation*; the quantity $\bar{\phi}$ is called a 4-spinor, or *Dirac spinor* [15].

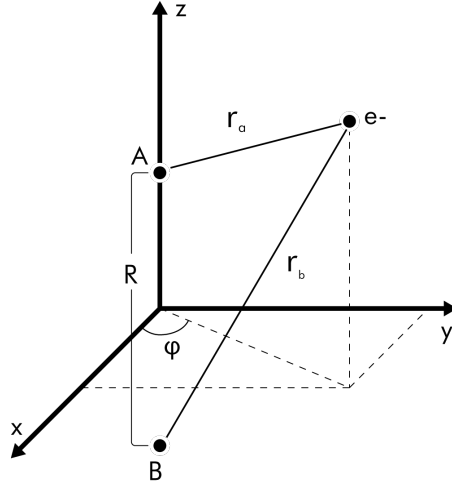


Figure 1.1: diagram for H_2^+ molecule, nuclei A and B lay on z-axis

1.2 Methodology

1.2.1 Dirac equation for H_2^+ in elliptic coordinates

When we have systems like H_2^+ where there is no more spherical symmetry, due to the two nuclei interacting with the electron, it is useful to solve the problem in *elliptic coordinates* defined by

$$\rho := \frac{r_a + r_b}{R}, \quad \tau := \frac{r_a - r_b}{R}, \quad \varphi := \text{usual polar angle}, \quad (1.10)$$

where $r_{a,b}$ and φ are shown in Fig. 1.1 and the ranges of these variables are $1 \leq \rho < \infty$, $-1 \leq \tau \leq 1$ and $0 < \varphi \leq 2\pi$.

Their relation to Cartesian coordinates are

$$x = \frac{R}{2} \cos \varphi \sqrt{(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)}, \quad y = \frac{R}{2} \sin \varphi \sqrt{(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)}, \quad z = -\frac{R\rho\tau}{2}. \quad (1.11)$$

In general, using atomic units, the potential energy for diatomic molecules is the sum of individual *Coulomb Potentials*

$$V = -\frac{Z_a e^2}{r_a} - \frac{Z_b e^2}{r_b}, \quad (1.12)$$

where $Z_{a,b}$ are the atomic charge for each nucleus in the molecule

In the case of H_2^+ we have $Z_a = Z_b =: Z$, therefore,

$$V(\rho, \tau) = \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right). \quad (1.13)$$

We know that the Dirac equation in general form reads

$$\bar{E} \begin{pmatrix} \bar{\phi}_1 \\ \bar{\phi}_2 \\ \bar{\phi}_3 \\ \bar{\phi}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V + mc^2 & 0 & p_z & p_x - ip_y \\ 0 & V + mc^2 & p_x + ip_y & -p_z \\ p_z & p_x - ip_y & V - mc^2 & 0 \\ p_x + ip_y & -p_z & 0 & V - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\phi}_1 \\ \bar{\phi}_2 \\ \bar{\phi}_3 \\ \bar{\phi}_4 \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

1.2.2 Reducing one dimension of the problem

Using (1.11) we can calculate each of the momentum operators in terms of the elliptic coordinates. Since p_z does not depend on φ it is possible to use the *Ansatz* [16]

$$\bar{\phi}_k(\rho, \tau, \varphi) = \phi_k(\rho, \tau) e^{i(\mu - 1/2 + \lambda_k)\varphi}, \quad (1.15)$$

which is a consequence of the conservation of the projection to the z-axis of the total angular momentum of the electron due to the cylindrical symmetry of the problem. Here $\lambda_k = (0, 1, 0, 1)$ for $k = (1, 2, 3, 4)$ and μ is the projection on the z -axis of the total angular momentum of the electron. This *Ansatz* let us to eliminate the coordinate φ from our equations and we get a two-dimensional system of four coupled differential equations that look like

$$\bar{E}\phi_1 = \bar{A}_+\phi_1 + \bar{B}\phi_3 + \bar{C}_+\phi_4, \quad (1.16)$$

$$\bar{E}\phi_2 = \bar{A}_+\phi_2 - \bar{B}\phi_4 + \bar{C}_-\phi_3, \quad (1.17)$$

$$\bar{E}\phi_3 = \bar{A}_-\phi_3 + \bar{B}\phi_1 + \bar{C}_+\phi_2, \quad (1.18)$$

$$\bar{E}\phi_4 = \bar{A}_-\phi_4 - \bar{B}\phi_2 + \bar{C}_-\phi_1, \quad (1.19)$$

where $\bar{A}_\pm, \bar{B}, \bar{C}_\pm$ are first order differential operators in the coordinates ρ and τ defined by the following expressions (see the details in App. A)

$$\begin{aligned} \bar{A}_\pm &:= \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) \pm mc^2 \right], \quad \bar{B} := -i \frac{2\hbar}{R} \frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2)\tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1)\rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right], \\ \bar{C}_\pm &:= i \frac{2\hbar}{R} \left[\frac{(\mu \pm 1/2)}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} - \frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right], \end{aligned} \quad (1.20)$$

At this point what we have is a sort of *eigenvalue problem* if we write the problem in matrix form

$$\bar{E} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{A}_+ & 0 & \bar{B} & \bar{C}_+ \\ 0 & \bar{A}_+ & \bar{C}_- & \bar{B}^* \\ \bar{B} & \bar{C}_+ & \bar{A}_- & 0 \\ \bar{C}_- & \bar{B}^* & 0 & \bar{A}_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix}. \quad (1.21)$$

In the next chapter we will show that the representation of (1.21) in a *B-spline* basis leads to a *generalized eigenvalue problem*. We point out that the transformation (1.15) is non-unitary. Therefore, the *generalized eigenvalue problem* is not anymore hermitian and its eigenvalues are in general complex. As we will see in Sec. 2.4.2 the ground state is real.

Chapter 2

Numerical implementation of Dirac Equation for H_2^+ in elliptic coordinates

In this section we will discuss some general and important properties of the basis functions we used to expand our matrices and wave functions called B-splines in order to diagonalize the problem depicted in the previous section. We also explain how the computational process works in an schematic way and finally we comment on some preliminary results for the ground state energies of the H_2^+ molecule.

2.1 B-splines as a basis set

From the computational point of view it is important to use a numerical stable basis to calculate physical quantities; The spline bases, or *B-splines* is a basis that has demonstrated good approximations solving both Schrödinger [10, 11] and Dirac [12, 13] equations. It is a basis set introduced by Schoenberg in 1946 [8] and later summarized by de Boor [17]. This basis has some properties that are useful for numerical calculations that we will see in a moment.

2.1.1 General aspects of the B-splines

It is necessary to introduce a partition of an interval, called *box*, to be able to define what a B-spline basis is. Let us consider an interval $I = [a, b]$ divided into l subintervals $I_j = [x_j, x_{j+1}]$ such that,

$$a = x_1 < x_2 < \cdots < x_{l+1} = b. \quad (2.1)$$

The set of points $\{x_j\}$ are called *breakpoints* (bps).

A *B-spline* is a *piecewise polynomial function* (pp-function) over $[a, b]$ of order k ¹, which usually provides a good approximation of wavefunctions in a rather easy way.

¹That is, a function which restricted to each interval I_j is a polynomial of maximum degree $k - 1$

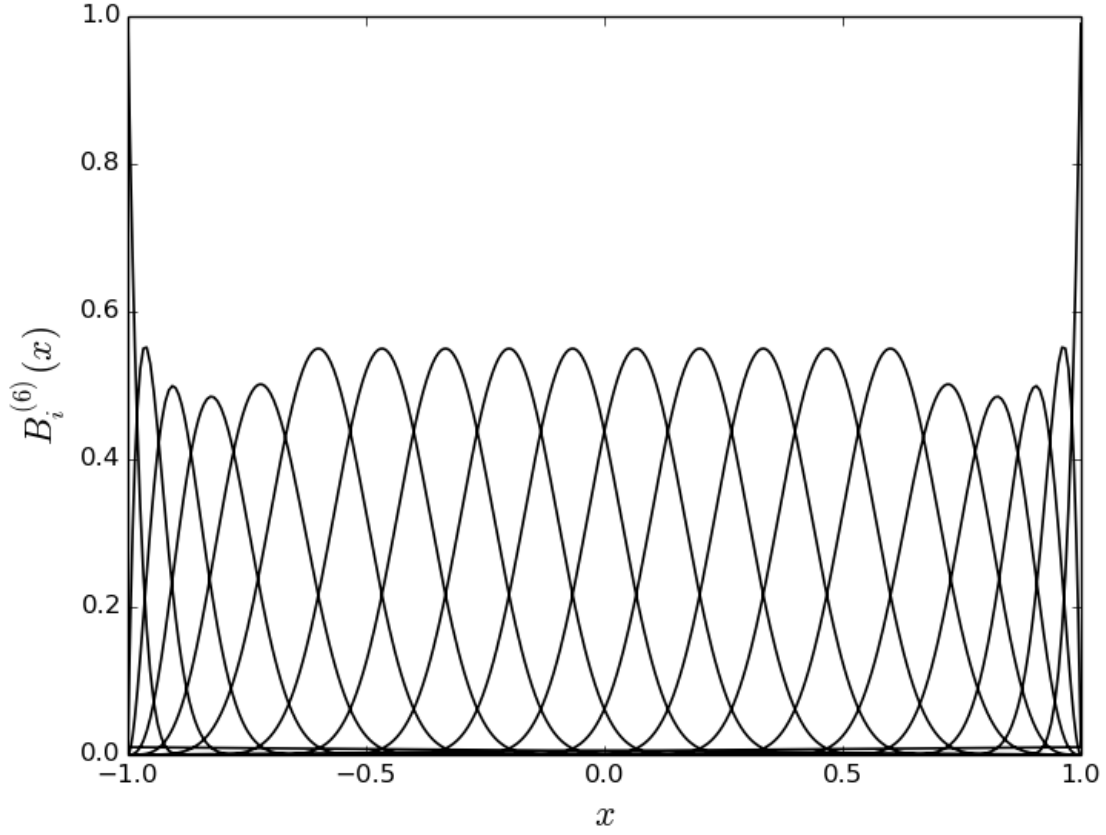


Figure 2.1: Complete set of 20 B-splines of order 6 in a box $[-1, 1]$ with a equally spaced sequence of bps

B-splines can be constructed recursively in the following way:

The B-spline functions of lowest order ($k = 1$) are step functions of the form

$$B_i^1(x) = \begin{cases} 1 & x_i \leq x < x_{i+1} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.2)$$

and the higher order B-splines constructed from the recursion relation [17, 18]

$$B_i^k(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+k-1} - x_i} B_i^{k-1}(x) + \frac{x_{i+k} - x}{x_{i+k} - x_{i+1}} B_{i+1}^{k-1}(x), \quad (2.3)$$

In Fig. 2.1 we plot the set of B-splines of order $k = 6$, in a box $[-1, 1]$ with a equally spaced sequence of bps.

Some useful properties of these functions are listed bellow and can be visualized in Fig. 2.1

1. $B_i(x)$ is a pp-function of order k over $[x_i, x_{i+k}]$.

2. $B_i(x) > 0$ for $x \in]x_i, x_{i+k}[$ and zero elsewhere.
3. $B_i(x)B_j(x) = 0$ for $|i - j| \geq k$. This property tells us that exactly k B-splines are nonzero over $]x_i, x_{i+k}[$ which is numerically very useful because matrices built with B-splines (overlap, hamiltonian, etc) are exactly k -banded.
4. Normalization property: $\sum_i B_i(x) = 1$ over all the box.

The definitions (2.2) and (2.3) shows that B-spline functions of order k are indeed pp-functions of maximum degree $k - 1$ and they provide us an algorithm to calculate the value of a B-spline at x starting from the B-spline of order 1. In the numerical calculations we used FORTRAN routines developed by de Boor [17] such that BSPLVP to evaluate all k B-splines that are nonzero and its derivatives at a certain x given the order k , the knot sequence $\{x_j\}$, and the index of the left-closest knot to x .

The Dirac equation involves derivatives of first order. Therefore, we will also need to calculate derivatives of B-splines. The derivative of a B-spline of order k is also a pp-function of order $k - 1$ which can be computed from (2.3):

$$\frac{dB_i^k(x)}{dx} = \frac{k-1}{x_{i+k-1} - x_i} B_i^{k-1}(x) - \frac{k-1}{x_{i+k} - x_{i+1}} B_{i+1}^{k-1}(x). \quad (2.4)$$

We thus use the same subroutine BSPLVP to evaluate these derivatives by changing the spline order ($k \rightarrow k - 1$).

2.2 Code description

We prepare, separately, each B-spline basis for ρ and τ using the routines BSPLVP [17] in the boxes $[1, \rho_{\max}]$ and $[-1, 1]$ respectively. Since our problem is to diagonalize the matrix in (1.21) each component of the vector ϕ_k can be expanded in the following way

$$\phi_k(\rho, \tau) = \sum_{i_\rho=1}^{n_\rho} \sum_{i_\tau=1}^{n_\tau} C_{i_\rho i_\tau}^k B_{i_\rho}(\rho) B_{i_\tau}(\tau) \quad (2.5)$$

where $B_{i_\rho}(\rho), B_{i_\tau}(\tau)$ are B-spline functions of a certain order and i_ρ, i_τ are the indices in the box used to each coordinate ρ, τ respectively, and n_ρ, n_τ are the total number of B-splines used to expand each component of the *Dirac spinor* in its respective directions.

Then we have to find the matrix representation in the B-spline basis of each operator in (1.20); we have to keep in mind that the right-hand side of (1.21) turns into an *overlap matrix* S because B-splines are not orthogonal, that is

$$S_{ij} = \langle B_{i_\rho}(\rho) B_{i_\tau}(\tau) | B_{j_\rho}(\rho) B_{j_\tau}(\tau) \rangle. \quad (2.6)$$

Here, i, j are indices that keep a relationship with the B-spline indices i_ρ, i_τ , according to the specific storage of the matrix elements used. Due to the fact that our problem is 2-dimensional the matrices built with this B-spline basis are almost block-banded matrices, see Fig. 2.2.

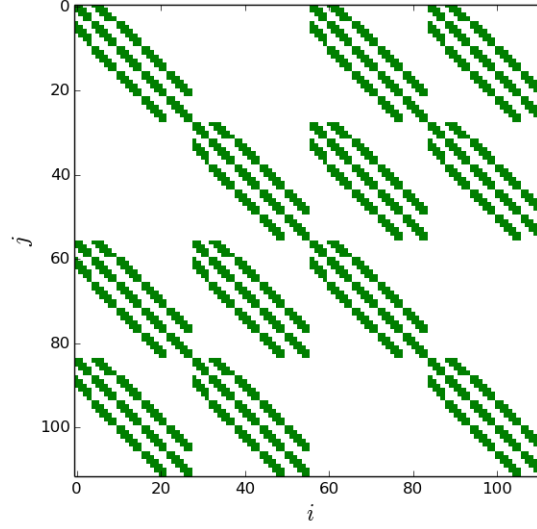


Figure 2.2: Matrix structure for the right-hand matrix in (1.21) for a small basis of 6 elements in each direction ρ and τ of order 2. We used the natural way to storage the elements of the matrix, where $i = 1, 2, \dots, 4n_\rho n_\tau$ corresponds to pairs of indices $i_\rho i_\tau = 11, 12, \dots, 1n_\tau, 21, 22, \dots, 2n_\tau, \dots, n_\rho 1, n_\rho 2, \dots, n_\rho n_\tau$ and the same for j ; and then we apply the boundary conditions mentioned after. In this particular basis the matrix has three 3-bands in each block.

It is important to remember that the boundary conditions are present in what we may think are ill-defined points in (1.20), for instance the positions $(\rho, \tau) = (1, -1)$ and $(\rho, \tau) = (1, 1)$ are exactly the positions of nuclei A and B respectively in the H_2^+ molecule. For numerical purposes we lift these divergences by multiplying (1.21) by $\bar{D} := [(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}(\rho^2 - \tau^2)$. The other boundary conditions are

$$\phi_k(\rho_{\max}, \tau) = 0 \quad (2.7)$$

for each k , because we are interested in bound states of the problem. Since the only B-spline that is nonzero in $\rho_{\max}$ is B_{n_ρ} , see Fig. 2.1, we have

$$\phi_k(\rho_{\max}, \tau) = \sum_{i_\tau=1}^{n_\tau} C_{n_\rho i_\tau}^k B_{n_\rho}(\rho_{\max}) B_{i_\tau}(\tau) = 0, \quad (2.8)$$

which lead us to n_τ conditions for each component of the *Dirac spinor*.

Once the matrices are built we use a LAPACK subroutine called ZGGEV to find the *eigenvalues* of the *generalized eigenvalue problem*.

Table 2.1: Eigenvalues $E(\lambda)$ for the first two levels on the hydrogen atom with a Yukawa potential for $l = 0$, in atomic units.

λ	$E_1(\lambda)$	λ	$E_2(\lambda)$
0.1	-0.4070580306134	0.01	-0.1152932851679
0.2	-0.3268085113691	0.02	-0.1061483202446
0.3	-0.2576385863030	0.03	-0.0975317861346
0.4	-0.1983760833618	0.04	-0.0894146341851
0.5	-0.1481170218899	0.05	-0.0817711957952
0.6	-0.1061359075058	0.06	-0.0745785344127
0.7	-0.0718335559045	0.07	-0.0678159599814
0.8	-0.0447043044973	0.08	-0.0614646562123
0.9	-0.0243141938274	0.09	-0.0555073885532

2.3 Example: Yukawa potential

The procedure explained before is a generalization of a previous code developed by us to solve the 1-dimensional *Schrödinger equation* in presence of the *Yukawa potential*, or *Screened hydrogen atom*, where

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{Ze^{-\lambda r}}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} \quad (2.9)$$

here, l is the angular momentum quantum number of the electron and λ is called the screen parameter.

The structure of the code is exactly the same but here it is much simpler because we need to build just one B-spline basis and our wave function is a scalar function. Also the operators we have to represent in matrices are the *effective potential*, *kinetic energy* and the *overlap*. Finally we use a *Lanczos algorithm* [19–22] to diagonalize our problem and thus find the energies of the system.

We used a basis of $n = 351$ B-splines of order $k = 8$ in a box $[0, 100]$ with a equally spaced knot sequence and a screen parameter λ changing from 0.01 to 0.9. In Tab. 2.1 we show our results for the first two energy levels for $l = 0$ and several values of the parameter λ . We write down there the converged significant digits which coincide with the results reported in [23].

2.4 Discussion on convergence

In contrast to the *Yukawa problem* for the H_2^+ molecule we need to expand 4 wave functions in 2 different directions ρ and τ which leads us to a $(4n_\rho n_\tau - 4n_\tau - 8) \times (4n_\rho n_\tau - 4n_\tau - 8)$ matrix to diagonalize. Thus, the biggest basis that we could use was obtained for $n_\rho = n_\tau = 80$ which leads us to a $25\,272 \times 25\,272$ matrix which requires 10 GB of storage space. Including the overlap matrix and working space for the LAPACK subroutines our code requires approximately 40 GB of RAM which rounds the limit of our computer resources. It is worth to mention that this number of basis functions is small compared with the one used *Yukawa problem*.

2.4.1 Dilation transformation

We have to keep in mind that the equation we are solving is a relativistic problem, that is the eigenvalues we are looking for are, in atomic units,

$$E = c^2 + \epsilon \quad (2.10)$$

and for atomic and molecular systems the term $c^2 \approx 18778.8624182$ is way bigger than ϵ so we used a *unitarity transformation* to the Hamiltonian to avoid ill conditioned matrices. Our Hamiltonian has three terms $c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$, βmc^2 and the potential $V(\mathbf{r}) \propto -\frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b}$; according to what we said before these three terms are of different orders of magnitude so we can apply a *dilation transformation*, mediated by the dilation unitary operator [24]

$$D_\theta = \exp\left(i\theta \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{2}\right) \quad (2.11)$$

and defining $\theta = \log \gamma$ effectively results in the transformation of position and momentum operators according to

$$\mathbf{r} \rightarrow \gamma \mathbf{r}, \quad \mathbf{p} \rightarrow \frac{\mathbf{p}}{\gamma}. \quad (2.12)$$

The unitarity of this transformation guarantees that the eigenvalues are unchanged. However, as a consequence of the truncation of the basis, leading to a finite matrix representation, there is a numerically induced dependence. Therefore, γ can be used as an effective variational parameter.

2.4.2 Preliminary results

We did a plenty number of calculations for the ground state energy of the H_2^+ molecule varying the number of B-splines n_ρ, n_τ used in each direction, the order of these functions k_ρ, k_τ , the maximum value $\rho_{\max}$ and the dilation parameter γ and we show in the following tables the results obtained.

The *Ansatz* (1.15) leads to a non-hermitian *generalized eigenvalue problem* with complex eigenvalues. A typical (positive energy) spectrum is shown in Fig. 2.3. However, the ground state (with lowest positive energy) exhibits an effectively zero imaginary part. Indeed, the absolute value of its imaginary part is less than 10^{-11} atomic units in all our calculations. In Tab. 2.2 we show the ground state eigenvalue as a function of the box size $\rho_{\max}$, the number of B-splines n and their order k for $\gamma = 1/c$, being $c = 137.0359895$ the speed of light.

From Tab. 2.2 we also obtain that the optimal value for the box size $\rho_{\max}$, among the possible values our computer resources allow us to explore, is near 250. For this value we performed more calculations for different values of the dilation parameter γ as shown in Tab. 2.3.

The results presented in Tab. 2.3 still exhibit a dependence on the box size, and therefore, on the basis size. We cannot conclude that they are converged. Indeed, a direct comparison with other calculations (see Refs. [25, 26]), where the obtained energy of the ground state is $E = 18777.76$, confirms this observation. We observe that increasing the size of the basis improves

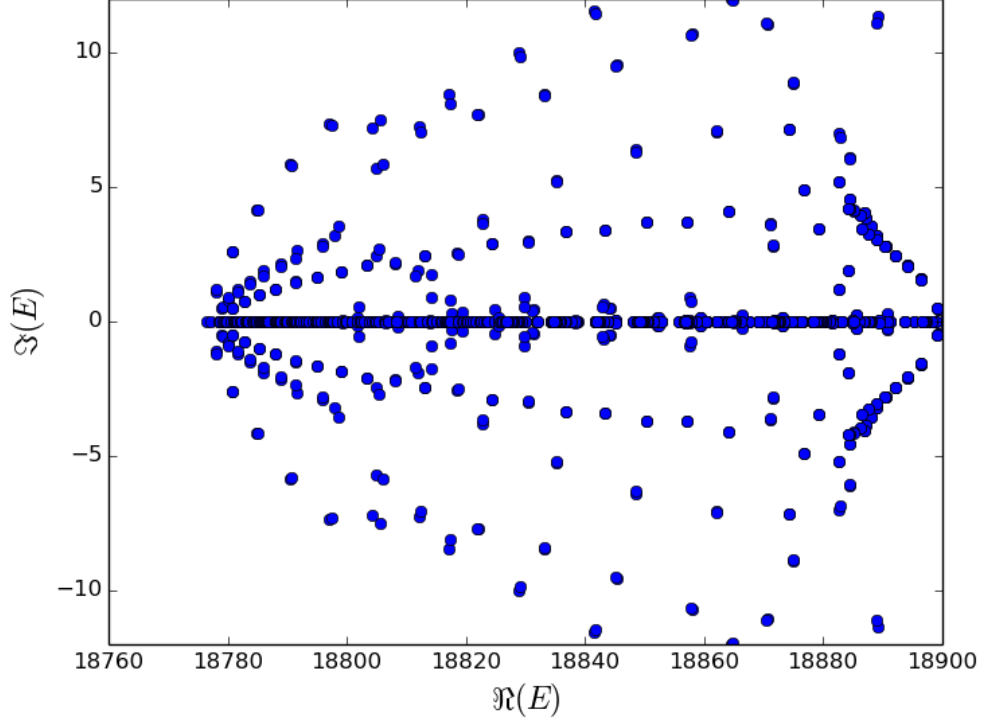


Figure 2.3: $\Re(E)$ vs $\Im(E)$ of some positive eigenvalues E , for a basis of $n = 30$ of order $k = 4$.

Table 2.2: Eigenvalues E , in atomic units, of the ground state of H_2^+ for different $\rho_{\max}$ varying the size of the basis $n = n_\rho = n_\tau$, order $k = k_\rho = k_\tau$ and $\gamma = 1/c$.

$\rho_{\max}$	$n; k$	E	$\rho_{\max}$	$n; k$	E
40	20; 4	17887.8	60	20; 4	18526.7
40	30; 4	17041.0	60	30; 4	18386.8
40	37; 5	16094.2	60	37; 5	18338.3
40	80; 6	15992.8	60	80; 6	18727.0
80	20; 4	18740.8	100	20; 4	18753.5
80	30; 4	18745.8	100	30; 4	18745.1
80	37; 5	18744.5	100	37; 5	18784.5
80	80; 6	18743.9	100	80; 6	18750.4
150	20; 4	18767.0	250	20; 4	18767.7
150	30; 4	18767.3	250	30; 4	18768.7
150	37; 5	18767.4	250	37; 5	18768.6
150	80; 6	18767.6	250	80; 6	18768.7

Table 2.3: Eigenvalues E , in atomic units, for the ground state of H_2^+ varying the dilation parameter γ using a basis of $n = 30$ B-spline functions of order $k = 4$ and $c = 137.0359895$ is the speed of light.

$\rho_{\max}$	γ	E
250	$1/c$	18774.9
250	$1/70$	18776.5
300	$1/c$	18775.5
300	$1/100$	18776.2
300	$1/70$	18776.6

the convergence. Unfortunately we cannot go beyond the basis size presented here with our currently available computer resources.

Chapter 3

Summary and outlook

We presented a systematic way of numerically calculating the ground state energy for the H_2^+ molecule, starting from *Dirac equation* and reducing it to a *generalized eigenvalue problem* to find the eigenvalues of the matrix representation of the problem using B-spline functions as basis. In the process we explored an interesting *Ansatz* that allows us to get rid of a spatial dimension of the problem considering conservation of the z -component of the total angular momentum of the electron. It was evident that the computational limitations did not allow us to approach to better results. An improvement of the convergence is expected by increasing the basis size.

We think that is important to optimize the program to a point where there is no needed so much storage capacity for the matrices and be able to get better results. Once this part is solved one might think in generalizing the idea to more complicated systems such as alkali dimers and start focusing on the *spin-orbit coupling* to understand in a more fundamental way the photo-association process, which is a very useful technique for both physicists and chemists.

Appendix A

Dirac Equation for H_2^+

In this appendix we are interested in derive the *Dirac equation* with fixed nuclei for H_2^+ in elliptic coordinates. In general form, *Dirac equation* for a stationary system reads

$$\bar{E}\bar{\phi}(\mathbf{r}) = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 + V(\mathbf{r})]\bar{\phi}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.1})$$

where $\bar{E}$ is the energy of the system, $\bar{\phi}$ is a 4-component *Dirac spinor*, $\boldsymbol{\alpha}$ and β are *Dirac matrices* and $V(x)$ is the external potential.

In matrix form this equation look like this

$$\bar{E} \begin{pmatrix} \bar{\phi}_1 \\ \bar{\phi}_2 \\ \bar{\phi}_3 \\ \bar{\phi}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V + mc^2 & 0 & p_z & p_x - ip_y \\ 0 & V + mc^2 & p_x + ip_y & -p_z \\ p_z & p_x - ip_y & V - mc^2 & 0 \\ p_x + ip_y & -p_z & 0 & V - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\phi}_1 \\ \bar{\phi}_2 \\ \bar{\phi}_3 \\ \bar{\phi}_4 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Elliptic coordinates are defined by (A.3)

$$\rho := \frac{r_a + r_b}{R}, \quad \tau := \frac{r_a - r_b}{R}, \quad \varphi := \text{usual polar angle}, \quad (\text{A.3})$$

where $r_{a,b}$ and φ are depicted in Fig. A.1 and their relation to Cartesian coordinates are

$$x = \frac{R}{2} \cos \varphi \sqrt{(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)}, \quad y = \frac{R}{2} \sin \varphi \sqrt{(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)}, \quad z = -\frac{R\rho\tau}{2}. \quad (\text{A.4})$$

The ranges of these new variables are $1 \leq \rho < \infty$, $-1 \leq \tau \leq 1$ and $0 < \varphi \leq 2\pi$.

It is also important to know the explicit form of each component of the momentum operator $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ as a function of ρ , τ and φ . As $\mathbf{p} = -i\hbar \sum_j \frac{\mathbf{e}_j}{h_j} \frac{\partial}{\partial x_j}$, where $\mathbf{e}_j$ and h_j are the unitary vector and the *Lamé coefficient* in the x_j direction respectively, we have

$$p_x = \frac{2\hbar}{iR} \left[\frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \cos \varphi \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) + \frac{-\sin \varphi}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \quad (\text{A.5})$$

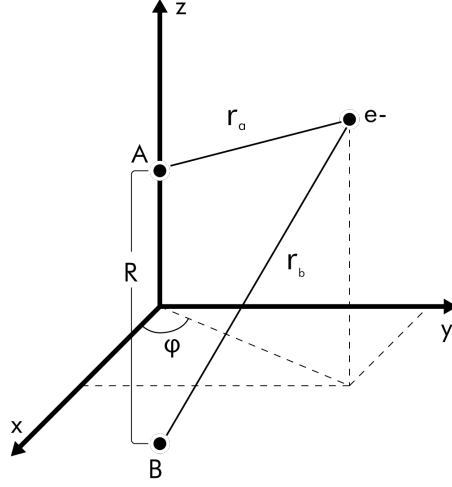


Figure A.1: diagram for H_2^+ molecule, nuclei A and B lay on z-axis

$$p_y = \frac{2\hbar}{iR} \left[\frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \sin \varphi \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) + \frac{\cos \varphi}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right], \quad (\text{A.6})$$

$$p_z = \frac{2\hbar}{iR} \frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2) \tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1) \rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right], \quad (\text{A.7})$$

and the potential

$$V(\rho, \tau) = \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right). \quad (\text{A.8})$$

Using (A.2),(A.5-A.8) it is possible to write the equation for every component of the *Dirac spinor*

$$\begin{aligned} \bar{E}\bar{\phi}_1 = & \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) + mc^2 \right] \bar{\phi}_1 + \frac{2\hbar}{iR} \left[\frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2) \tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1) \rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right] \right] \bar{\phi}_3 \\ & + \frac{2\hbar}{R} e^{-i\varphi} \left[\frac{-1}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} - i \left[\frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right] \right] \bar{\phi}_4, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} \bar{E}\bar{\phi}_2 = & \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) + mc^2 \right] \bar{\phi}_2 - \frac{2\hbar}{iR} \left[\frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2) \tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1) \rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right] \right] \bar{\phi}_4 \\ & - \frac{2\hbar}{R} e^{i\varphi} \left[\frac{-1}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \left[\frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right] \right] \bar{\phi}_3, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned}\bar{E}\bar{\phi}_3 = & \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) - mc^2 \right] \bar{\phi}_3 + \frac{2\hbar}{iR} \left[\frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2)\tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1)\rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right] \right] \bar{\phi}_1 \\ & + \frac{2\hbar}{R} e^{-i\varphi} \left[\frac{-1}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} - i \left[\frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right] \right] \bar{\phi}_2, \quad (\text{A.11})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{E}\bar{\phi}_4 = & \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) - mc^2 \right] \bar{\phi}_4 - \frac{2\hbar}{iR} \left[\frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2)\tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1)\rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right] \right] \bar{\phi}_2 \\ & - \frac{2\hbar}{R} e^{-i\varphi} \left[\frac{-1}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \left[\frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right] \right] \bar{\phi}_1, \quad (\text{A.12})\end{aligned}$$

What we can see from this system of equations is that the coordinate φ couples just $\bar{\phi}_1$ with $\bar{\phi}_3$ and $\bar{\phi}_2$ with $\bar{\phi}_4$, so we can use the following *Ansatz*

$$\bar{\phi}_k(\rho, \tau, \varphi) = \phi_k(\rho, \tau) e^{i(\mu - 1/2 + \lambda_k)\varphi} \quad (\text{A.13})$$

where the parameter $\lambda_k = (0, 1, 0, 1)$ for $k = (1, 2, 3, 4)$. Using this *Ansatz* we can eliminate the coordinate φ from our equations and we get a two-dimensional system of four differential equations

$$\begin{aligned}\bar{E}\phi_1 = & \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) + mc^2 \right] \phi_1 - i \frac{2\hbar}{R} \left[\frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2)\tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1)\rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right] \right] \phi_3 \\ & + i \frac{2\hbar}{R} \left[\frac{\mu + 1/2}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} - \frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right] \phi_4, \quad (\text{A.14})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{E}\phi_2 = & \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) + mc^2 \right] \phi_2 + i \frac{2\hbar}{R} \left[\frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2)\tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1)\rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right] \right] \phi_4 \\ & + i \frac{2\hbar}{R} \left[-\frac{\mu - 1/2}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} - \frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right] \phi_3, \quad (\text{A.15})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{E}\phi_3 = & \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) - mc^2 \right] \phi_3 - i \frac{2\hbar}{R} \left[\frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2)\tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1)\rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right] \right] \phi_1 \\ & + i \frac{2\hbar}{R} \left[\frac{\mu + 1/2}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} - \frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right] \phi_2, \quad (\text{A.16})\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\bar{E}\phi_4 = & \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) - mc^2 \right] \phi_4 + i \frac{2\hbar}{R} \left[\frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2)\tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1)\rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right] \right] \phi_2 \\ & + i \frac{2\hbar}{R} \left[-\frac{\mu - 1/2}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} - \frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right] \phi_1. \quad (\text{A.17})\end{aligned}$$

As we can see we might have some troubles when the denominators $(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)$ and $[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}$ are zero; these points are actually the positions of the nuclei: $(\rho, \tau) = (1, 1)$ for nucleus B and $(\rho, \tau) = (1, -1)$ for nucleus A so these problems can be avoided by imposing boundary conditions but anyhow numerically we need to lift these divergences, to do that we define the following quantities

$$\begin{aligned}\bar{A}_\pm &:= \left[\frac{Ze^2}{R} \left(\frac{-4\rho}{\rho^2 - \tau^2} \right) \pm mc^2 \right], \quad \bar{B} := -i \frac{2\hbar}{R} \frac{1}{\rho^2 - \tau^2} \left[(1 - \rho^2)\tau \frac{\partial}{\partial \rho} + (\tau^2 - 1)\rho \frac{\partial}{\partial \tau} \right], \\ \bar{C}_\pm &:= i \frac{2\hbar}{R} \left[\frac{(\mu \pm 1/2)}{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}} - \frac{[(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}}{\rho^2 - \tau^2} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \tau \frac{\partial}{\partial \tau} \right) \right], \quad \bar{D} := [(\rho^2 - 1)(1 - \tau^2)]^{1/2}(\rho^2 - \tau^2),\end{aligned}\tag{A.18}$$

and we multiply (A.14)-(A.17) by $\bar{D}$ getting the system

$$\bar{D}\bar{E}\phi_1 = \bar{D}(\bar{A}_+\phi_1 + \bar{B}\phi_3 + \bar{C}_+\phi_4)\tag{A.19}$$

$$\bar{D}\bar{E}\phi_2 = \bar{D}(\bar{A}_+\phi_2 - \bar{B}\phi_4 + \bar{C}_-\phi_3)\tag{A.20}$$

$$\bar{D}\bar{E}\phi_3 = \bar{D}(\bar{A}_-\phi_3 + \bar{B}\phi_1 + \bar{C}_+\phi_2)\tag{A.21}$$

$$\bar{D}\bar{E}\phi_4 = \bar{D}(\bar{A}_-\phi_4 - \bar{B}\phi_2 + \bar{C}_-\phi_1)\tag{A.22}$$

Using the convention $X = \bar{D}\bar{X}$ for $\bar{X} = \bar{A}_\pm, \bar{B}, \bar{C}_\pm, \bar{E}$ we can write our problem in matrix form

$$E \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_+ & 0 & B & C_+ \\ 0 & A_+ & C_- & B^* \\ B & C_+ & A_- & 0 \\ C_- & B^* & 0 & A_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix}\tag{A.23}$$

which is an *eigenvalue problem*.

Bibliography

- [1] Juris Ulmanis, Johannes Deiglmayr, Marc Repp, Roland Wester, and Matthias Weidemüller. *Ultracold molecules formed by photoassociation: Heteronuclear dimers, inelastic collisions, and interactions with ultrashort laser pulses*. *Chemical Reviews* **112**(9), 4890–4927 (2012). DOI: [10.1021/cr300215h](https://doi.org/10.1021/cr300215h).
- [2] Christiane P. Koch and Moshe Shapiro. *Coherent Control of Ultracold Photoassociation*. *Chemical Reviews* **112**(9), 4928–4948 (2012). DOI: [10.1021/cr2003882](https://doi.org/10.1021/cr2003882).
- [3] B. E. Londoño, J. E. Mahecha, E. Luc-Koenig, and A. Crubellier. *Resonant coupling effects on the photoassociation of ultracold Rb and Cs atoms*. *Physical Review A* **80**(3), 032511 (2009). DOI: [10.1103/PhysRevA.80.032511](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.80.032511).
- [4] W. C. Stwalley, J. Banerjee, M. Bellos, R. Carollo, M. Recore, and M. Mastroianni. *Resonant Coupling in the Heteronuclear Alkali Dimers for Direct Photoassociative Formation of X(0,0) Ultracold Molecules*. *The Journal of Physical Chemistry A* **114**(1), 81–86 (2010). DOI: [10.1021/jp901803f](https://doi.org/10.1021/jp901803f).
- [5] H. Salami, T. Bergeman, B. Beser, J. Bai, E. H. Ahmed, S. Kotochigova, A. M. Lyyra, J. Huennekens, C. Lisdat, A. V. Stolyarov, O. Dulieu, P. Crozet, and A. J. Ross. *Spectroscopic observations, spin-orbit functions, and coupled-channel deperturbation analysis of data on the $A \Sigma^+ 1 u$ and $b \Pi 3 u$ states of Rb₂*. *Physical Review A* **80**(2), 022515 (2009). DOI: [10.1103/PhysRevA.80.022515](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.80.022515).
- [6] Jean Mawhin and André Ronveaux. *Schrödinger and Dirac equations for the hydrogen atom, and Laguerre polynomials*. *Archive for History of Exact Sciences* **64**(4), 429–460 (2010). DOI: [10.1007/s00407-010-0060-3](https://doi.org/10.1007/s00407-010-0060-3).
- [7] DAVID EDVARDSSON, STEN LUNELL, and CHRISTEL M. MARIAN. *Calculation of potential energy curves for Rb₂ including relativistic effects*. *Molecular Physics* **101**(15), 2381–2389 (2003). DOI: [10.1080/0026897031000121307](https://doi.org/10.1080/0026897031000121307).
- [8] I. J. Schoenberg. *Contributions to the Problem of Approximation of Equidistant Data by Analytic Functions*. In *I. J. Schoenberg Selected Papers*, pages 3–57. Birkhäuser Boston, Boston, MA (1988).
- [9] Carlos Mario Granados-Castro. *Time-Dependent Feshbach Method for the Dynamical Study of Photoionization and Autoionization in Two-Electron Atomic Systems*. (2012).

- [10] Bruce W. Shore. *Solving the radial Schrodinger equation by using cubic-spline basis functions*. *The Journal of Chemical Physics* **58**(9), 3855 (1973). DOI: [10.1063/1.1679740](https://doi.org/10.1063/1.1679740).
- [11] B W Shore, Fernbach S Alder B, Rotenberg M (eds), Bain R A N, Bardsley J, Zel'dovich Ya B Baz' A I, Perelomov A M, Blatt J M F, Weiskopf V, Bloch C, Brenig W R, Haag, Hibbert A Burke P G, Robb W D, Burke P G D, Robb W, Burke P G J, Seaton M, Chung K T Chen J C Y, Sinfailam A-L, Courant R D, Hilbert, Eu B C J, Ross, Fano U, Fels M F W, Hazi A, Feshbach H, Foldy L L D, Waleka J, Fox L, Garside L W, Tobocman, Gear C W, Gottfried K, Haglund M E D, Robson, Ham F S, Harris F E, Hazi A W S, Taylor H, Heller E J, Hodgson P G, Humblet J, Humblet J L, Rosenfeld, Jackson J L E, Wyatt R, Balint-Kurti G G Johnson B R, Levine R D, Lambert J D, Lane A M G, Thomas R, Levinson N, Mahaux C A, Weidenmüller H, Matese J J W, Henry R J, Mikhlin S G, Mikhlin S G L, Smolitskiy K, Mott N F W, Massey H S, Newton R, Oberoi R S K, Nesbet R, Oberoi R S K, Nesbet R, Percival I, Risberg V, Seaton M J, Seaton M J, Shore B W, Shore B W, Smith K, Stetter H J, Taylor H S, Truhlar D G, Truhlar D G, and Wolken G Jr. *Use of boundary-condition wavefunctions for bound states, continuum states, and resonances*. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **7**(18), 2502–2517 (1974). DOI: [10.1088/0022-3700/7/18/015](https://doi.org/10.1088/0022-3700/7/18/015).
- [12] W. R. Johnson, S. A. Blundell, and J. Sapirstein. *Finite basis sets for the Dirac equation constructed from B splines*. *Physical Review A* **37**(2), 307–315 (1988). DOI: [10.1103/PhysRevA.37.307](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.37.307).
- [13] M. H. Chen, K. T. Cheng, and W. R. Johnson. *Relativistic configuration-interaction calculations of $n=2$ triplet states of heliumlike ions*. *Physical Review A* **47**(5), 3692–3703 (1993). DOI: [10.1103/PhysRevA.47.3692](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.47.3692).
- [14] Bernd Thaller. *The Dirac Equation*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg (1992).
- [15] Franz Schwabl. *Advanced Quantum Mechanics*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg (2008).
- [16] G. B. Deineka. *Dirac-Fock calculation for H , H_2^+ and H_2 in a strong magnetic field by the Hermitian basis of B-splines*. , 1–22 (1999).
- [17] Carl. De Boor. *A practical guide to splines : with 32 figures*. Springer (2001).
- [18] H Bachau, E Cormier, P Decleva, J E Hansen, and F Martín. *Applications of B -splines in atomic and molecular physics*. *Reports on Progress in Physics* **64**(12), 1815–1943 (2001). DOI: [10.1088/0034-4885/64/12/205](https://doi.org/10.1088/0034-4885/64/12/205).
- [19] Cornelius Lanczos. *An iterative method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral*. *Journal of Research of the National Bureau of Standards Section B* **45**(225) (1950).
- [20] B. N. Parlett, D. S. Scott, Chandler Davis, W. M. Kahan, W. Kahan, B. N. Parlett, Shmuel Kaniel, Cornelius Lanczos, C. C. Paige, and C. C. Paige. *The Lanczos algorithm with selective orthogonalization*. *Mathematics of Computation* **33**(145), 217–238 (1979). DOI: [10.1090/S0025-5718-1979-0514820-3](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1979-0514820-3).

- [21] Thomas Ericsson, Axel Ruhe, J. H. Argyris, Th. L. Johnsen, R. A. Rosanoff, J. R. Roy, James R. Bunch, Linda Kaufman, J. Alan George, Paul S. Jensen, C. C. Paige, C. C. Paige, Beresford N. Parlett, B. N. Parlett, D. S. Scott, Axel Ruhe, Gilbert Strang, and George J. Fix. *The spectral transformation Lánczos method for the numerical solution of large sparse generalized symmetric eigenvalue problems*. *Mathematics of Computation* **35**(152), 1251–1251 (1980). DOI: [10.1090/S0025-5718-1980-0583502-2](https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1980-0583502-2).
- [22] Andreas Krug. *Alkali Rydberg States in Electromagnetic Fields*. (2001).
- [23] Edward R. Vrscaj. *Hydrogen atom with a Yukawa potential: Perturbation theory and continued-fractions – Padé approximants at large order*. *Physical Review A* **33**(2), 1433–1436 (1986). DOI: [10.1103/PhysRevA.33.1433](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.33.1433).
- [24] Javier Madronero. *Spectral properties of planar helium under periodic driving* (2004).
- [25] Atsushi Ishikawa, Hiroyuki Nakashima, and Hiroshi Nakatsuji. *Solving the Schrödinger and Dirac equations of hydrogen molecular ion accurately by the free iterative complement interaction method*. *Journal of Chemical Physics* **128**(12), 1–13 (2008). DOI: [10.1063/1.2842068](https://doi.org/10.1063/1.2842068).
- [26] Hiroyuki Nakashima and Hiroshi Nakatsuji. *Non-Born-Oppenheimer potential energy curve: Hydrogen molecular ion with highly accurate free complement method*. *Journal of Chemical Physics* **139**(7), 1–10 (2013). DOI: [10.1063/1.4818161](https://doi.org/10.1063/1.4818161).



UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE CIENCIAS
ACTA DE EVALUACIÓN DE TRABAJO DE GRADO
PROGRAMA ACADÉMICO DE FÍSICA.

JURADO CONFORMADO POR:

1. DR. JAVIER MADROÑERO
2. DR. JOSÉ GUILLERMO LÓPEZ

El día 4 de Octubre de 2016 a las 4:00 P.M se llevó a cabo la ENTREGA DE LA EVALUACIÓN () SUSTENTACIÓN (X) del INFORME FINAL DEL TRABAJO DE GRADO titulado: "**SOLVING DIRAC EQUATION FOR H_2^+ USING B-SPLINES**". Presentado por el estudiante MARIO ANDRÉS HENAO AYALA código 0940114 bajo la dirección del Dr. JAVIER MADROÑERO.

Candidato a Grado para la ceremonia de:

RESULTADO DE LA EVALUACIÓN:

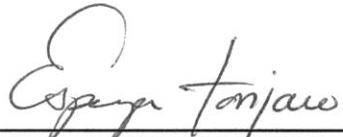
- ☒ APROBADO.
☐ RECOMENDACIÓN DE DISTINCIÓN DE MERITORIO.
☐ RECOMENDACIÓN DE DISTINCIÓN DE LAUREADO.
☐ REPROBADO.

Se recomienda modificaciones: SI () NO ☒.

OBSERVACIONES


JAVIER MADROÑERO
DIRECTOR


JOSÉ GUILLERMO LÓPEZ
JURADO


ESPERANZA TORIJANO
DIRECTORA PROGRAMA ACADÉMICO

Anexos 3:

3) Presentación en el Seminario del grupo de Óptica, “Análisis de Moléculas Lineales bajo el modelo de oscilaciones pequeñas” Septiembre 25, 2015. Presentado por el estudiante Victor Alfonso Loaiza Moreno.



Análisis de Moléculas Lineales bajo el modelo de oscilaciones pequeñas.

Seminario de Óptica

Departamento de Física, Universidad del Valle

Victor Alfonso Loaiza moreno

Aspectos generales de las oscilaciones pequeñas.

Considerando un sistema con n grados de libertad $\hat{q}_i$ el cual esta en equilibrio estable en las posiciones $\hat{q}_i = q_i^0$, podemos expresar los desplazamientos alrededor de equilibrio como:

$$\hat{q}_i = q_i^0 + q_i$$

Donde la energia cinetica y potencial son de la forma $T = \tau(\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_n; \dot{\hat{q}}_1, \dots, \dot{\hat{q}}_n) \hat{q}_i \hat{q}_j$ y $V(\hat{q}_1, \dots, \hat{q}_n)$. Haciendo series de Taylor alrededor del punto de equilibrio e ignorando terminos de orden superior a 2 obtenemos el lagrangiano como:

$$L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) = \frac{1}{2} T_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j - \frac{1}{2} V_{ij} q_i q_j$$

$$V_{ij} = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial \widehat{q}_i \partial \widehat{q}_j} \right|_{\vec{\widehat{q}} = \vec{q}^0} \quad T_{ij} = \tau(q_i^0, \dots, q_i^0) \widehat{q}_i$$

Donde obtenemos un sistema de n ecuaciones acopladas:

$$T_{ij} \ddot{q}_j + V_{ij} q_j = 0$$

Sean $\mathbf{T}$ y $\mathbf{V}$ las matrices cuyos elementos son T_{ij} y V_{ij} , podemos escribir matricialmente las ecuaciones de movimiento como:

$$\ddot{\vec{q}}(t) + \mathbf{T}^{-1} \mathbf{V} \vec{q}(t) = 0$$

Donde $\mathbf{T}$ y $\mathbf{V}$ son simetricas

Buscamos una matriz invertible $\mathbf{A}$ tal que $\mathbf{A}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{W}_D$ con $\mathbf{W}_D$ diagonal, así las ecuaciones pasan a ser :

$$\ddot{\vec{q}} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{W}_D\mathbf{A}\vec{q} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A}\ddot{\vec{q}} + \mathbf{W}_D\mathbf{A}\vec{q} = 0$$

Definiendo $\vec{n}(t) = \mathbf{A}\vec{q}(t)$, obtenemos n ecuaciones desacopladas de la forma:

$$\ddot{\vec{n}}(t) + \mathbf{W}_D\vec{n}(t) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \ddot{n}_j + \omega_j^2 n_j = 0$$

Si $\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V}$ es simétrica el procedimiento es simple, se hallan los valores y vectores propios de $\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V}$ y se construye $\mathbf{A}$ con los vectores propios normalizados como sus filas así $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$ y los valores propios serán las componentes $\mathbf{W}_D$.

Si $\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V}$ no es simétrica podemos escribir $\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V} = \mathbf{T}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{W}\mathbf{T}^{\frac{1}{2}}$ con $\mathbf{W} = \mathbf{T}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{V}\mathbf{T}^{-\frac{1}{2}}$, donde $\mathbf{W}$ es simétrica y tiene el mismo polinomio característico que $\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V}$, por tanto si $\mathbf{U}$ es la matriz ortogonal que diagonaliza $\mathbf{W}$ se obtiene que :

$$\mathbf{T}^{-1}\mathbf{V} = \mathbf{T}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{U}^T \mathbf{W}_D \mathbf{U} \mathbf{T}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{W}_D \mathbf{A}$$

Con $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{T}^{\frac{1}{2}}$ y $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{T}$ obteniendo como se pretendia :

$$\ddot{\vec{q}} + \mathbf{A}^{-1} \mathbf{W}_D \mathbf{A} \vec{q} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \ddot{n}_j + \omega_j^2 n_j = 0$$

Con lo cual procedemos finalmente a resolver las ecuaciones diferenciales para $n_j(t)$ en terminos de $n_j(0)$.

Las cantidades $n_j(t)$ son las combinaciones lineales de las coordenadas $q_j(t)$ que tienen una evolución temporal independiente, estas cantidades son los modos normales de oscilación del sistema.

Ahora podemos solucionar $q_j(t)$ recordando que $\vec{n} = \mathbf{A}\vec{q}$ y $\vec{q} = \mathbf{A}^{-1}\vec{n}$, para ello hallamos $\vec{n}(0)$ y $\dot{\vec{n}}(0)$ al aplicar $\mathbf{A}$ sobre $\vec{q}(0)$ y $\dot{\vec{q}}(0)$ respectivamente así podemos terminar de determinar $\vec{n}(t)$. Finalmente aplicamos $\mathbf{A}^{-1}$ obteniendo a $\vec{n}(t)$ obteniendo $\vec{q}(t)$.

Amortiguamiento en oscilaciones pequeñas.

En el apartado anterior se mostro como se puede describir la evolución de un sistema acoplado descrito por las ecuaciones :

$$\mathbf{T}\ddot{\vec{q}}(t) + \mathbf{V}\vec{q}(t) = 0$$

Ahora se considerara un sistema con terminos de amortiguamiento dados por la matriz κ de la siguiente forma.

$$\mathbf{T}\ddot{\vec{q}}(t) + \kappa\dot{\vec{q}}(t) + \mathbf{V}\vec{q}(t) = 0$$

$$\ddot{\vec{q}}(t) + \mathbf{T}^{-1}\kappa\dot{\vec{q}}(t) + \mathbf{T}^{-1}\mathbf{V}\vec{q}(t) = 0$$

$$\kappa = a\mathbf{T} + b\mathbf{V}$$

$$\ddot{\vec{q}} + (a\mathbf{I} + b\mathbf{A}^{-1}\mathbf{W}_D\mathbf{A})\dot{\vec{q}} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{W}_D\mathbf{A}\vec{q} = 0$$

$$\mathbf{A} \ddot{\vec{q}} + (a + b\mathbf{W}_D)\mathbf{A}\dot{\vec{q}} + \mathbf{W}_D\mathbf{A}\vec{q} = 0$$

$$\ddot{n}_j + (a + b\omega_j^2)\dot{n}_j + \omega_j^2 n_j = 0$$

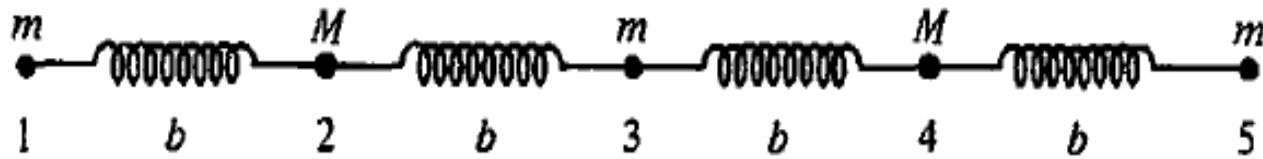
Molecula Triatomica Lineal



$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix} \quad \mathbf{V} = k \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{W}_D = \left(0 ; \frac{k}{m} ; \frac{k}{m} \left(1 + 2 \frac{m}{M} \right) \right)$$

Molecula Penta Atomica lineal



$$T = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m \end{pmatrix}$$

$$V = \begin{pmatrix} k & -k & 0 & 0 & 0 \\ -k & 2k & -k & 0 & 0 \\ 0 & -k & 2k & -k & 0 \\ 0 & 0 & -k & 2k & -k \\ 0 & 0 & 0 & -k & k \end{pmatrix}$$

$$W_D = \left\{ 0, \frac{k \left(2m + M - \sqrt{4m^2 + M^2} \right)}{2mM}, \frac{k \left(2m + 3M - \sqrt{4m^2 + M^2} \right)}{2mM}, \frac{k \left(2m + M + \sqrt{4m^2 + M^2} \right)}{2mM}, \frac{k \left(2m + 3M + \sqrt{4m^2 + M^2} \right)}{2mM} \right\}$$

Anexos 4:

- 4) Desarrollos en el software Mathematica sobre “la Molécula triatómica lineal” realizado por el estudiante Victor Alfonso Loaiza Moreno.

$$\text{(Debug) } \ln[1] := \mathbf{A} = \left\{ \left\{ \frac{m}{\sqrt{2m+M}}, \frac{M}{\sqrt{2m+M}}, \frac{m}{\sqrt{2m+M}} \right\}, \right. \\ \left. \left\{ \sqrt{\frac{m}{2}}, 0, -\sqrt{\frac{m}{2}} \right\}, \left\{ \frac{\sqrt{mM}}{\sqrt{2}\sqrt{2m+M}}, \frac{-\sqrt{2}\sqrt{mM}}{\sqrt{2m+M}}, \frac{\sqrt{mM}}{\sqrt{2}\sqrt{2m+M}} \right\} \right\};$$

$$\mathbf{L} = 20;$$

$$\mathbf{Ain} = \left\{ \left\{ \frac{1}{\sqrt{2m+M}}, \frac{1}{\sqrt{2m}}, \frac{\sqrt{M}}{\sqrt{2m}\sqrt{2m+M}} \right\}, \right. \\ \left. \left\{ \frac{1}{\sqrt{2m+M}}, 0, \frac{-\sqrt{2m}}{\sqrt{M}\sqrt{2m+M}} \right\}, \left\{ \frac{1}{\sqrt{2m+M}}, \frac{-1}{\sqrt{2m}}, \frac{\sqrt{M}}{\sqrt{2m}\sqrt{2m+M}} \right\} \right\};$$

$$\mathbf{ne} = \left\{ n1''[x] + a n1'[x], \frac{k n2[x]}{m} + \left(a + \frac{b k}{m} \right) n2'[x] + n2''[x], \right. \\ \left. \frac{k \left(1 + \frac{2m}{M} \right) n3[x]}{m} + \left(a + \frac{b k \left(1 + \frac{2m}{M} \right)}{m} \right) n3'[x] + n3''[x] \right\};$$

```
(Debug) In[5]:= Manipulate[
  ns = {NDSolve[{ne[[1]] == 0, n1[0] == (A.{o, p, q})[[1]], n1'[0] == (A.{o1, p1, q1})[[1]]},
    n1, {x, -200, 1000}], NDSolve[{ne[[2]] == 0, n2[0] == (A.{o, p, q})[[2]],
    n2'[0] == (A.{o1, p1, q1})[[2]]}, n2, {x, -200, 1000}],
  NDSolve[{ne[[3]] == 0, n3[0] == (A.{o, p, q})[[3]], n3'[0] == (A.{o1, p1, q1})[[3]]},
    n3, {x, -200, 1000}], k = k1, a = a1, b = b1, m = m1, M = M1};
  Dynamic[Grid[{{"Modo Normal 1", "Modo normal 2", "Modo normal 3"}, {
    Plot[n1[x] /. ns[[1]], {x, -140, 140}, AspectRatio → 1, PlotRange → All],
    Plot[n2[x] /. ns[[2]], {x, -140, 140}, AspectRatio → 1, PlotRange → All],
    Plot[n3[x] /. ns[[3]], {x, -140, 140}, AspectRatio → 1, PlotRange → All]
  }, {"x1(t)", "x2(t)", "x3(t)"},
    {Plot[(Ain.{n1[x] /. ns[[1]], n2[x] /. ns[[2]], n3[x] /. ns[[3]])[[1]],
      {x, 0, 500}, AspectRatio → 1, PlotRange → All],
    Plot[(Ain.{n1[x] /. ns[[1]], n2[x] /. ns[[2]], n3[x] /. ns[[3]])[[2]],
      {x, 0, 500}, AspectRatio → 1, PlotRange → All],
    Plot[(Ain.{n1[x] /. ns[[1]], n2[x] /. ns[[2]], n3[x] /. ns[[3]])[[3]],
      {x, 0, 500}, AspectRatio → 1, PlotRange → All]}], Frame → All], Grid[
    {{Dynamic[g[x_] := (Ain.{n1[x] /. ns[[1]], n2[x] /. ns[[2]], n3[x] /. ns[[3]])[[1]]},
    Dynamic[f[x_] := (Ain.{n1[x] /. ns[[1]], n2[x] /. ns[[2]], n3[x] /. ns[[3]])[[2]]},
    Dynamic[h[x_] := (Ain.{n1[x] /. ns[[1]], n2[x] /. ns[[2]], n3[x] /. ns[[3]])[[3]]},
    sup := Max[{g[1000][[1]] - 3 - 5 L / 3, h[0][[1]] + 3 + 5 L / 3, g[0][[1]] - 3 - 5 L / 3,
      h[1000][[1]] + 3 + 5 L / 3}], inf := Min[{g[1000][[1]] - 3 - 5 L / 3,
      h[0][[1]] + 3 + 5 L / 3, g[0][[1]] - 3 - 5 L / 3, h[1000][[1]] + 3 + 5 L / 3}],
    {Animate[Graphics3D[{{Yellow, Sphere[{g[t][[1]] - L, 0, 0}, 3]}, {LightRed,
      Sphere[{f[t][[1]], 0, 0}, 6]}, {Yellow, Sphere[{h[t][[1]] + L, 0, 0}, 3]}},
      PlotRange → {{inf, sup}, {-8, 8}, {-8, 16}}, PlotLabel →
      Style[Framed["Triatomic Linear Molecuele"], Black, Background → LightYellow],
      ViewPoint → Front, Boxed → False], {t, 0, 1000},
      AnimationRunning → False, ControlPlacement → Bottom]}],
  Delimiter, Style["Posiciones iniciales", 12, Bold],
  {{o, L / 6, "x1[0]"},
    -L / 3,
    L / 3},
  {{p, -L / 30, "x2[0]"}, -L / 3, L / 3},
  {{q, L / 6, "x3[0]"},
    -L / 3, L / 3}, Delimiter,
  Style["Velocidades iniciales", 12, Bold],
  {{o1, 0, "x1'[0]"}, -L / 60, L / 60},
  {{p1, 0, "x2'[0]"}, -L / 60, L / 60},
  {{q1, 0, "x3'[0]"}, -L / 60, L / 60},
  Style["Parametros", 12, Bold],
  {{m1, 1, "masas laterales"}, 1 / 2, 6},
  {{M1, 10, "Masa central"}, 10, 30},
  {{k1, 1 / 100, "Contante del resorte"}, 0, 2},
  {{a1, 0, "Contante del friccion Cinetica"}, 0, 1 / 64},
  {{b1, 0, "Contante del friccion Potencial"}, 0, 2},
  ControlPlacement → Left]
```

Triatomic Linear Molecule



t

▶

⏮

⏭

⏪

⏩

Posiciones iniciales

(Debug) Out[5]=

x1[0]

⛶

x2[0]

⛶

x3[0]

⛶

Velocidades iniciales

x1'[0]

⛶

x2'[0]

⛶

x3'[0]

⛶

Parametros

masas laterales

⛶

Masa central

⛶

Contante del resorte

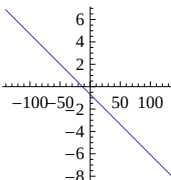
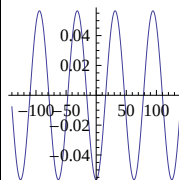
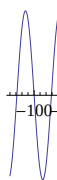
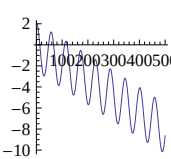
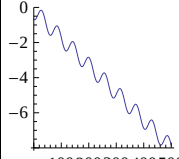
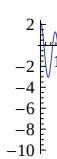
⛶

Contante del friccion Cinetica

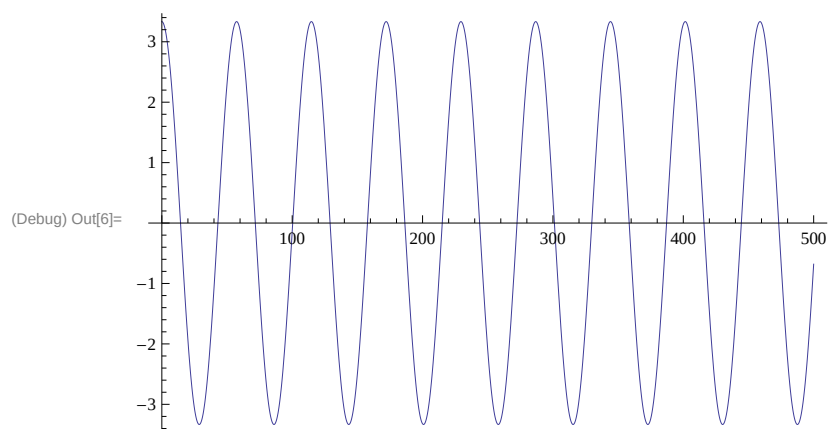
⛶

Contante del friccion Potencial

⛶

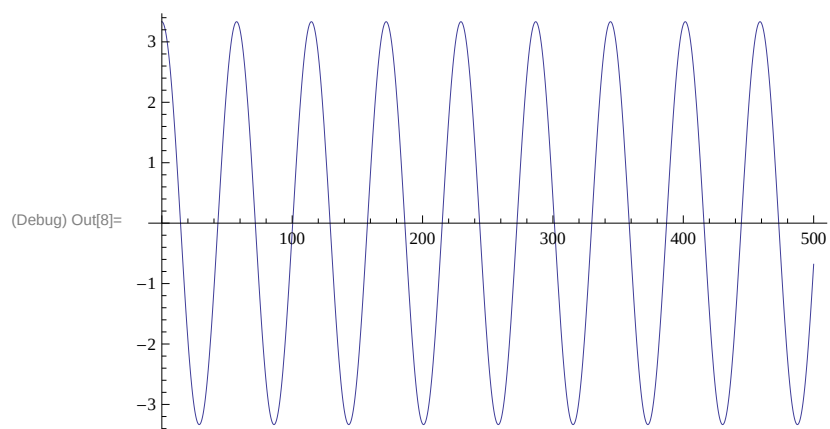
Modo Normal 1	Modo normal 2	Modo normal 3
		
x1 (t)	x2 (t)	x3 (t)
		

(Debug) In[6]:= **Plot[g[x], {x, 0, 500}]**



(Debug) In[7]:= **ParametricPlot[{g[x], h[x]}, {x, -200, 1000}]**

(Debug) In[8]:= **Plot[h[x], {x, 0, 500}]**



Anexos 5:

5a) Ponencia en el “XXVI Congreso Nacional de Física” 29 de Septiembre al 2 de Octubre, 2015 - Manizales, Colombia. Presentado por Gustavo Marín.

5b) Ponencia en el “XIV Encuentro Nacional de Óptica y V Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones” Nov 16-20, 2015, Cali, Colombia. Presentado por Gustavo Marín.

5c) Presentación en el seminario del grupo de Física Teórica del Estado Sólido, “Interferometry and coherent transfer population using Bose-Einstein condensates”, Noviembre 6, 2015, Universidad del Valle. Presentado por Gustavo Marín and Karem Rodríguez



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA
SEDE MANIZALES



CONGRESO NACIONAL DE FISICA
MANIZALES - 2015



Certifica que:

Gustavo Marín

Participó en calidad de asistente en el XXVI Congreso Nacional de Física.

Realizado
del 29 de Septiembre al 02 de Octubre de 2015
en la ciudad de Manizales - Colombia.

Carlos Vargas Hernández
Director XXVI Congreso Nacional
De Física

Hernando Ariza Calderón
Presidente Sociedad Colombiana
de Física



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE COLOMBIA
SEDE MANIZALES



CONGRESO NACIONAL DE FISICA
MANIZALES - 2015



Certifica que:

Gustavo Marín

Participó en calidad de ponente en el XXVI Congreso Nacional de Física.

Realizado
del 29 de Septiembre al 02 de Octubre de 2015
en la ciudad de Manizales - Colombia.

Carlos Vargas Hernández
Director XXVI Congreso Nacional
De Física

Hernando Ariza Calderón
Presidente Sociedad Colombiana
de Física



XIV Encuentro Nacional de Óptica
y V Conferencia Andina y del Caribe
en Óptica y sus Aplicaciones
Santiago de Cali, Noviembre 16 - 20, 2015



INTERNATIONAL
YEAR OF LIGHT
2015

La Sociedad Red Colombiana de Óptica y la Universidad del Valle

certifican que:

Gustavo Adolfo Marín Alvarado

con número de identificación 1144084976,

Participó en el XIV Encuentro Nacional de Óptica & V Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones realizado en la Universidad del Valle del 16 al 20 de Noviembre de 2015.

Prof. Efraín Solarte Rodríguez, Dr.rer.nat.

Presidente

XIV Encuentro Nacional de Óptica

V Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus

Aplicaciones

Prof. Beatriz Elena Londoño Flórez

Jefe del departamento de Física (e)

Universidad del Valle



XIV Encuentro Nacional de Óptica
y V Conferencia Andina y del Caribe
en Óptica y sus Aplicaciones

Santiago de Cali, Noviembre 16 - 20, 2015



INTERNATIONAL
YEAR OF LIGHT
2015

La Sociedad Red Colombiana de Óptica y la Universidad del Valle

certifican que:

Gustavo Adolfo Marín Alvarado

presentó la ponencia **Poster**

“Implementación numérica del interferómetro de Mach-Zehnder con ondas de materia”

Gustavo Marín, Karem Rodríguez

En el marco del XIV Encuentro Nacional de Óptica & V Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus Aplicaciones realizado en la Universidad del Valle del 16 al 20 de Noviembre de 2015.

**Prof. Efraín Solarte Rodríguez, Dr.rer.nat.
Presidente**

XIV Encuentro Nacional de Óptica
V Conferencia Andina y del Caribe en Óptica y sus
Aplicaciones

**Prof. Beatriz Elena Londoño Flórez
Jefe del departamento de Física (e)**
Universidad del Valle

**Facultad de Ciencias
Naturales y Exactas
Departamento de Física**

GRUPO DE FÍSICA TEÓRICA
DEL ESTADO SÓLIDO
CÓDIGO COL0008497

SEMINAR

Title: Interferometry and coherent transfer population using Bose-Einstein condensates.

Speakers: Jessica Gil, Gustavo Marín and Karem Rodríguez

Abstract

Nowadays, ultracold bosonic quantum degenerate gases are versatile and robust systems for probing fundamental condensed-matter physics problems with applications in quantum optics, quantum information and understanding atomic and molecular physics. Loading ultracold gases in external traps has opened innovative manipulation and control possibilities including the observation of strong correlation effects. Spinor gases, formed by particles with various available Zeeman substates, constitute an ideal system for investigating the interplay between external and internal (spin) degrees of freedom. On the other hand, the coherent properties of the Bose-Einstein condensates are of general relevance since their experimental achievement in 1997, and the interest on these systems go from the experimental realization of matter-wave counterpart for the well-known optical devices, to the application and development of precise-technology. In this talk, we present a numerical implementation of a Mach-Zehnder interferometer, where the coherence and oscillatory properties of ultracold bosonic matter-waves with Gaussian profile are explored. The system is modeled by the Gross-Pitaevskii equation and several time-dependent external trapping potentials in both the adiabatic and the non-adiabatic regime are analyzed. We also discuss the coherent transfer population among the internal degrees of freedom due to spin-changing collisions in a gas of spin-1 bosons.

Date: 6th November, 2015,

Time: 11:00 a.m.

Place: Michael Valero Auditorium

Anexos 6:

- 6) Ponencia en el “International workshop on quantum coherence and decoherence II” Agosto 25-29, 2014 - Medellín, Colombia. Presentado por Beatriz Londoño.

**International workshop on
quantum coherence and decoherence II
August 25-29, 2014 - Medellín, Colombia**

Dear
Prof. Beatriz Elena Londoño Flórez
Departamento de Física
Universidad del Valle, Colombia

On the behalf of the Organizers of the *International Workshop on Quantum Coherence and Decoherence II* held in Medellín, Colombia, from August 25-29, 2014, hereby I certify that you attended to the workshop and delivered an invited talk entitled “*Optical excitation of ultracold diatomic molecules with laser pulses*”. If you may require any further information or certificate regarding your participation, please, do not hesitate to contact me.

Further information at

<http://iwqcd2.gfam.co>
iwqcd2@fisica.udea.edu.co

Institute of Physics
University of Antioquia
Calle 70 No. 52 - 21 Medellín, Colombia
Tel: +57 4 219 6436

University Antonio Nariño
Calle 52 No. 40 - 88 Medellín, Colombia
Tel: +57 4 2161003

Yours truly,



Leonardo A. Pachon
Atomic and Molecular Physics Group | Institute of Physics, Universidad de Antioquia
email: leonardo.pachon@udea.edu.co | <http://gfam.udea.edu.co/~lpachon/index.html>
Sede de Investigaciones Universitaria - SIU -
Office: 312, Tower 1 | Tel: +57 4 2196436 | Fax: +57 4 2195630

Anexos 7:

7) Presentación en el seminario del grupo de Tecnología, Información y Complejidad Cuántica - QuanTic, "Shape resonances in ground state diatomic molecules", Marzo 25, 2015, Universidad del Valle. Presentado por Beatriz Londoño

QuantiC Seminar

Lugar: Salón de Conferencias Calima,
del Departamento de Física
Fecha: Marzo 25, 2015
Hora: 11am (10:45am → Snacks)

Shape resonances in ground state diatomic molecules

Beatriz Londoño

Departamento de Física, Universidad del Valle

The presence of shape resonances due to tunneling through the centrifugal barrier modifies strongly the dynamics of cold atom scattering. As shown on the example of the ground and lowest triplet electronic states of the $^{85}\text{Rb}^{133}\text{Cs}$ molecule, the crucial parameter is, as usual for cold collisions, the scattering length. A general description of shape resonances of diatomic molecules is given from three simple single channel asymptotic models, whose respective performances are discussed. The first model, which consists of a R^{-6} potential limited at short range by a repulsive wall, positioned to reproduce the s-wave scattering length, accounts satisfactorily for the main system-independent properties of shape resonances. Introduction in the model of energy- and angular-momentum-dependent nodal lines specific to the inner part of the potential greatly improves its efficiency.

When the energy and angular momentum dependence of the nodal lines cannot be deduced from full potential calculations or from experiment, a rough, but universal, estimate of these properties is obtained by extending the R^{-6} behavior of the potential up to the origin.

Next seminars

Date	Speaker	Title
Apr. 8	Carlos Melo	To be announced
Apr. 15	Alejandro González	To be announced

Anexos 8:

8a) Propuesta presentada a convocatoria externa, título "Formation and control of cold molecules".
Presentado a la convocatoria 658-2014 CONVOCATORIA PARA PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS del PROGRAMA NACIONAL DE CIENCIAS BÁSICAS.

8b) Certificado de la relación de requisitos y documentos adjuntos de la propuesta a convocatoria externa.

8c) Verificación de envío de la propuesta a convocatoria externa.



SISTEMA INTEGRAL DE GESTIÓN DE PROYECTOS

PRESENTACIÓN DEL PROYECTO

[Generalidades](#)
[Entidades del proyecto](#)
[Entidad Representante](#)
[Descripciones](#)
[Palabras clave](#)
[Cronograma](#)
[Resultados formación](#)
[Resultados publicaciones](#)
[Otros resultados](#)
[Cobertura - Regiones de impacto](#)
[Tipo personal](#)
[Personas](#)
[Presupuesto](#)
[Resumen por rubros](#)
[Presupuesto por entidad](#)
[Presupuesto detallado](#)
[Presupuesto global total](#)
[Presupuesto global por año](#)

Recuerde validar y enviar la información del proyecto a Colciencias

GENERALIDADES DEL PROYECTO

[Ir al menú](#)

Tipo de Proyecto	PROYECTO		
Título	Formation and control of cold molecules		
Convocatoria	658-2014 CONVOCATORIA PARA PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS		
Programa	PROGRAMA NACIONAL DE CIENCIAS BÁSICAS		
Línea Temática	INVESTIGACIÓN FUNDAMENTAL		
Tipo de financiación	RECUPERACIÓN CONTINGENTE		
Duración en meses	36		
Investigador principal	Beatriz Elena Londoño	CEDULA DE CIUDADANIA:	32108113
Lugar ejecución	CALI - VALLE DEL CAUCA		
Dirección electrónica	rector@univalle.edu.co		

ENTIDADES DEL PROYECTO (2)

[Ir al menú](#)

Nombre de la entidad	Rol
Universidad del Valle	EJECUTOR
Universidad Icesi	COEJECUTOR

ENTIDAD EJECUTORA

[Información completa de la entidad aquí](#)

[Ir al menú](#)

Entidad	Universidad del Valle		
Nit	890399010	Dígito de verificación	6
País	COLOMBIA		
Ciudad	CALI - VALLE DEL CAUCA		
Dirección	Ciudad Universitaria Meléndez, Calle 13 No 100-00		
Teléfono	5723212100	Fax	5723212100
Página web	http://www.univalle.edu.co		
Dirección electrónica	rector@univalle.edu.co		
Representante legal			

Nombre	Iván Enrique Ramos Calderón		
Tipo de identificación	CEDULA DE CIUDADANIA	Número de identificación	14989446
Clasificación			
Sector	EDUCATIVO		
Tipo de entidad	UNIVERSIDAD PUBLICA		

Grupos de investigación (Total: 3)[Menú entidad](#)

Código	COL0015366	Nombre	Grupo de Química Teórica y Computacional
Código	COL0008497	Nombre	Grupo de Física Teórica del Estado Sólido
Código	COL0014215	Nombre	Óptica Cuántica

INFORMACIÓN GENERAL DE FINANCIACIÓN[Ir al menú](#)

Valor solicitado a Colciencias:	200000000
Valor contrapartida en especie:	157714937
Valor contrapartida en dinero:	0
Valor total:	357714937

ENTIDADES - INFORMACIÓN GENERAL (Total: 2)**Entidad 1 de 2**

[Información general](#) [Grupos](#)
[Menú del proyecto](#)

[Menú entidad](#)

Información general			
Entidad	Universidad Icesi		
NIT	890316745	Dígito de verificación	5
País	COLOMBIA	Ciudad	CALI - VALLE DEL CAUCA
Dirección	Calle 18 No. 122-135 Pance		
Teléfono	5725552334	Fax	5725551441
Página web	http://www.icesi.edu.co/		
Dirección electrónica	frapie@icesi.edu.co		
Representante legal			
Nombre	Francisco Piedrahita Plata		
Tipo de identificación	CEDULA DE CIUDADANIA	Número de identificación	14934246
Datos de contacto			
Primer contacto	Nombre	Carlos Alberto Arango Mambuscay	
	Cargo	Docente	

	Teléfono	5725552334
	Dirección electrónica	caarango@icesi.edu.co
Clasificación		
Sector	PRIVADAS SIN ÁNIMO DE LUCRO	
Dirección	Calle 18 No. 122-135 Pance	
Teléfono	5725552334	
Tipo de entidad	CENTRO DE INVESTIGACIÓN	
Información adicional		
Exporta	NO	
Actividad económica	M08050 - EDUCACION SUPERIOR	
Capital		
Nacional	Público	0
	Privado	0
Extranjero	Público	0
	Privado	0
Ventas del último año	0	

Grupos (Total: 1)[Menú entidad](#)

Código	COL0093872	Nombre	Natura
---------------	------------	---------------	--------

Entidad 2 de 2

[Información general](#) [Grupos](#)
[Menú del proyecto](#)

[Menú entidad](#)

Información general			
Entidad	Universidad del Valle		
NIT	890399010	Dígito de verificación	6
País	COLOMBIA	Ciudad	CALI - VALLE DEL CAUCA
Dirección	Ciudad Universitaria Meléndez, Calle 13 No 100-00		
Teléfono	5723212100	Fax	5723212100
Página web	http://www.univalle.edu.co		
Dirección electrónica	rector@univalle.edu.co		
Representante legal			
Nombre	Iván Enrique Ramos Calderón		
Tipo de identificación	CEDULA DE CIUDADANIA	Número de identificación	14989446
Datos de contacto			
Primer contacto	Nombre	Beatriz Londoño	
	Cargo	Profesor Asistente	

	Teléfono	5723394610
	Dirección electrónica	beatriz.e.londono.f@correounivalle.edu.co
Segundo contacto	Nombre	Luz Piedad Arrigui F.
	Cargo	Profesional Vicerrectoria de Investigaciones
	Teléfono	5723212257
	Dirección electrónica	luz.arrigui@correounivalle.edu.co
Clasificación		
Sector	EDUCATIVO	
Dirección	Ciudad Universitaria Meléndez, Calle 13 No 100-00	
Teléfono	5723212100	
Tipo de entidad	UNIVERSIDAD PUBLICA	
Información adicional		
Exporta	No	
Capital		
Nacional	Público	0
	Privado	0
Extranjero	Público	0
	Privado	0
Ventas del último año	0	

Grupos (Total: 3)[Menú entidad](#)

Código	Nombre
COL0015366	Grupo de Química Teórica y Computacional
COL0008497	Grupo de Física Teórica del Estado Sólido
COL0014215	Óptica Cuántica

DESCRIPCIONES DEL PROYECTO (Total: 15)[Ir al menú](#)**Descripción 1 de 15****CONFORMACIÓN DEL EQUIPO DE INVESTIGACIÓN**

Research team.

Name - Group - COLCIENCIAS code - Function- Time commitment (Hours per week).

1. Beatriz Elena Londoño Flórez - Óptica Cuántica - COL0014215 - Lead researcher (objectives 5-7) - 10 hours/week.
2. Karem Cecilia Rodríguez Ramírez - Física Teórica del Estado Sólido - COL0008497 - Researcher (objectives 8-10) - 5 hours/week.
3. Carlos Alberto Arango Mambuscay - Natura - COL0093872 - Researcher (objectives 5-7) - 4 hours/week.
4. Julio César Arce Clavijo - Química Teórica y Computacional - COL0015366 - Researcher (objectives 1-4) - 8 hours/week.
5. José Guillermo López Sotelo - Química Teórica y Computacional - COL0015366 -Researcher (objectives 1-4) - 5 hours/week.
6. Estudiante 1 - Student (objectives 1-7) - 40 hours/week.
7. Estudiante 2 - Student (objectives 8-10) - 40 hours/week.

Descripción 2 de 15**ANTECEDENTES Y RESULTADOS PREVIOS DEL EQUIPO DE INVESTIGACIÓN SOLICITANTE EN LA TEMÁTICA ESPECÍFICA DEL PROYECTO**

Background and previous results.

The dynamics of molecular photoexcitation by femtosecond laser pulses using the alkali molecule RbCs as a model system were analyzed in reference [1]. In this scheme, the molecules are initially produced by photoassociation or magnetoassociation into bound vibrational levels close to the first dissociation threshold. Two different approaches are used: the "wavepacket" method, which is global, and the "level-by-level" method, which is restricted in the sense that the number of vibrational levels is limited to a small subset. The comparison between the results of the two approaches produced qualitative insights into the complex dynamics of the high-field regime. In particular, the important role of far-from-resonance levels, which are adiabatically excited through vertical transitions with large Franck-Condon factors, and the outstanding excitation blockade, due to the presence of a quasi-degenerate level in the lower electronic state, were clarified. Moreover, a selective transfer with femtosecond pulses in the low-field regime was observed and the accumulation of population with a coherent train of low-intensity femtosecond pulses was achieved.

Furthermore, the enhancement of photoassociation in RbCs due to spin-orbit resonance coupling, which depends on nuclear separation, was observed [2]. In addition, the influence of the variation with nuclear separation of the transition dipole moments on the electronic transitions was quantified, and the theoretical predictions about the preferential population of levels close to the first threshold in the lowest triplet state after photoexcitation followed by spontaneous emission were seen to agree with the experimental observations [2].

The dynamics of molecules (classical, semiclassical and quantum), and the coherent control of chemical reactions have been studied. In particular a molecular rotor in combined pulses with the aim to produce oriented or aligned molecules, with respect to the coherent control was analyzed. Atom-atom collisions forming diatomic molecules are controlling by the phase control of the dynamics of molecules, studied systems motivated for their biological interest [3-4].

A vast experience on strongly correlated many-body systems has been achieved on the frame work of ultra-cold quantum gases in low-dimensional optical lattices [5-8]. Out-of-equilibrium dynamical problems using both hard-core and soft-core bosons are studied in references [5-6]. Front-wave knowledge in quantum magnetism studying spinor Fermi-gases were been developed in [7] and spinor Bose-gases in [8]. Density matrix renormalization group (DMRG) codes based on matrix product states (MPS) formulation for these problems were developed. The codes allow the numerical calculation of local and non-local observables such as population, magnetization, correlation functions, critical exponents, among others, in both ways statically and dynamically.

In reference [9] the energies and lineshapes of some of the resonances associated with centrifugal-barrier tunneling (quasibound) states that arise at high values of the rotational quantum number J in the rovibrational eigenspectrum, within the ground electronic state, of molecular hydrogen (H_2) were determined. In addition, the cross-sections for the quadrupole O-, Q- and S-branch transitions from vibrational states close to the dissociation threshold into these resonances were evaluated and found to be up to three orders of magnitude larger than the fundamental S-branch transition $v''=0, J''=0$ toward $v'=1, J'=2$. These preliminary results strongly indicate that the direct, i.e. within the ground electronic state, photoassociation of diatomic molecules through orbiting resonances is a quite plausible mechanism. These calculations were performed employing an optical-potential real-time wavepacket propagation method [9-11], which allows the treatment of bound, quasi-bound and continuum states on the same footing and the determination of an eigen or an optical spectrum in a single calculation.

In reference [12] it was shown that a treatment of photoejection processes in terms of wavepackets is more convenient than the one in terms of scattering eigenstates, not only because it allows a dynamical description of the phenomena, but because the cross-sections and other observables can be extracted from the time-dependent wavefunction. Since a direct photoassociation process is, in a sense, the inverse of a photoejection one, analogous consideration should be applicable in this case.

Molecular dynamics was studied in complex system such as $Ne + Ar_2$ by quantum and classical point view. This has allowed explored the implementation of the Wigner function as a straightforward way to incorporate the most important quantum mechanical effects in classical simulations of collisions involving cold weakly bound complexes. [13]

Descripción 3 de 15**RESUMEN EJECUTIVO**

Short summary.

The success and efficiency of the coherent control of chemical reactions requires preparation of the reactants, which can be molecules or atoms, in specific states. Cold molecules formation from cold atoms by external fields and their dynamics must be analyze, this demands the knowledge of precise details about the molecular structure and collisions processes between

atoms. The rapid progress in the technology of radiation sources and nanoscale engineering give us access to much accuracy information on this cold matter. We need to study and understand this information with the expectation to obtain control over the quantum processes; in fact it is a major role of the theoretical counter part of the field.

For the first time in Colombia, a group has combined experiences and knowledge from different areas on topics like: control of chemical reaction by light, collision of atoms, creation of molecules, strongly correlated many-body systems, and molecular reaction dynamics, to do contributions in a new and excited research area on Cold Molecules.

The current mechanism to produce cold molecules from photoassociation of pair of cold atoms involves two or more steps [14-17]. The one-step process, which is proposed here using cold alkali atoms initially trapped in orbiting resonances, to go on translational cold molecules in their ground electronic states are an original proposal in the cold molecules field. Chirped laser pulses to control the population transfer during the process are used. We focus in molecules of experimental interest for example KRb.

After the formation of molecule by above proposal or another, the transferring of the molecule toward specific rovibrational states are studied. Methodologies well established experimentally like STImulated Raman Adiabatic Passage - STIRAP [14-17] and Stark-induced Adiabatic Raman Passage - SARP [17] are theoretically explored, to obtain real parameters of pulses to get the control over internal degrees of freedom of molecule. We expect that the methodology performed of project is extended to other polar molecules as LiCs, RbCs.

Due to photoassociation mechanism the triplet-rovibrational excited state has high probability to be populated [2, 14-17], thus STIRAP process involves passage from triplet to singlet-rovibrational ground state. Hence, it is interesting to analyze the coherent direct-transfer population between the singlet and triplet sublevels of the rovibrational of the Mott-Insulator molecular ground-state [26] as a function of the Coulomb on-site and nearest-neighbor interactions. For which on a strongly interacting many-body molecular gas loaded on one-dimensional optical lattices are studied.

Some spectroscopic details of the molecule are taken from literature, such as electronic potentials, long-range contributions, van Der Waals coefficients, scattering lengths, electronic dipoles, spin-orbit couplings, among others. Those are necessary to calculate the properties here we propose. The methodology to obtain precise potentials and dipole transfer moments was acquired in previous works. In general in this project several analytic and numerical methods are combined to study the dynamics of the molecule, which enriches the analyzing.

The expectations from this project are concentrated in two points: formation of the students and publication of the papers in which the main conclusions are shown.

Descripción 4 de 15

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Problem.

Nowadays, the cold molecules field is a hot topic. Continuous experimental successful go in hand a big theoretical effort to analyze, to propose scenarios, to use this system to achieve dreams of scientists: to control the evolution of a quantum system at the ultimate limit. Control over evolution of every internal and external degrees of freedom of a quantum system is a possible situation in cold matter.

In this project the studied points are: (I) photoassociation of cold alkali atoms to create molecules, (II) the control of molecular internal states, (III) the study of collective processes of a molecular gas loaded on optical lattices.

In the case of cold molecules formation (I) a direct, one-step mechanism for the production of cold diatomic molecules is proposed, entailing the stimulated photoassociation of cold ground-state atoms, initially trapped in orbiting resonances, into translationally cold molecules in their ground electronic states. Moreover, we will attempt to control the population transfer during the process by means of chirped laser pulses. The whole scheme will be implemented computationally employing numerical time-dependent methods.

Using the previous technique or any other that allows us to obtain molecules in the absolute ground state [14-17], specific rovibrational states (v , J , M) or linear combinations of the M -states [17], kipping in mind the objective to be closer to the coherent control of chemical reactions. Theoretical study of the process to prepare KRb molecules in specific rovibrational states is studied. (II) The well-established experimental STIRAP and SARP [15-17] methodologies are analyzed.

Once the molecules are stabilized in the rovibrational ground state, this strongly interacting many-body molecular gas is loaded on a one-dimensional optical lattice (III), The aim is to analyze the coherent direct-transfer population between the singlet and triplet lowest states of the molecules.

The specific problem here is how can we find new routes or improve the existing techniques to create molecules, getting to desired target states and controlling the internal and collective processes in the molecular dynamics?

Descripción 5 de 15

JUSTIFICACIÓN

Justification.

The cold molecules field represents attractive structures to achieve the control of the evolution of a quantum system. Since its origin two decades ago, the field has been quickly developed because of the many applications which motivated the world wide community such as controlled molecular dynamics, cold chemistry, high resolution spectroscopic, test of fundamental laws, quantum information, quantum simulators and coherent control. The rapid advance of electromagnetic sources and nanoscale technologies allow trapping and creating molecules in well-defined internal states. Such progress clearly benefited from a continuous exchange between theory and experiment, either for predictions or for interpretations of observed results.

Cold molecules are a new and very promising area because the huge scientific and technological impact; this combined with expertise of the theoretical research proponents motivates the current proposal, making of this project a good opportunity to create interdisciplinary areas in Colombia in front-wave science. The country science is measurable by the contributions made by their researchers and the researches of the present project are working on important topics for the international community, which allow us to be quickly spotted.

The group working on the current project proposal has vast experience on theoretical aspects, which allow us to contribute in the prediction and interpretation of topics related with cold molecules, specifically in the three points mentioned in Problem section. In our knowledge for the first time in Colombia a research on Cold Molecules is led.

Every expectation above mentioned is relevant to the current Science, Technology and Innovation law in Colombia. Projects in theoretical basic science are promoting the achievement of objectives in article 3 of 1286 law, 2009, specially 1, 5, 6 and 7 which are related to the increasing and strengthening of the scientific ability, the promotion of education and the use of human capacity. Moreover the objectives of this project are relevant for the priorities as: less poverty, more jobs, international connection and innovation that established the Strategic Plan 2011-2014 of COLCIENCIAS by the creation of skills in science, technology and innovation of the community. The coordinated and articulated science, technology and innovation guidelines for regional, national and international implementation, consolidation of scientific, technological and innovation community through a set of tools, strategies and strengthening of the human capital. Strengthen of master, doctoral degrees in Colombia; promote the post-doctoral research and national and international mobility.

Descripción 6 de 15**MARCO CONCEPTUAL****Theoretical framework.**

The new area of cold quantum matter involving ultracold and quantum degenerate molecular gases is currently on the focus of interest within the atomic physics, molecular physics and physical chemistry communities. Researches on cold molecules started mainly with the formation of alkali dimers, as alkali atoms are the most widely used species for laser cooling. A detailed knowledge of their structure is necessary for appropriate manipulation of these species in the course of their formation and control process.

The laser cooling techniques that have been developed for atoms [18] do not work for molecules, due to the presence of rovibrational degrees of freedom and the cluttering of quantum states. After indirect methods like photoassociation, the translational cooling of atoms is keeping then the molecular internal degrees of freedom can be cooled [18-21]. In the photoassociation of pre-cooled atoms, the motion of the center of mass is essentially unaffected, thereby preserving the translational temperature of the recombining atoms [19]. The photoassociation process employed in Julienne's laboratory [20] entails an initial free-bound excitation into a weakly-bound vibrational level of an excited electronic state, followed by a bound-bound spontaneous emission into the ground electronic state. This scheme has the disadvantages that the final vibrational state may be an incoherent mixture of vibrational levels, and, moreover, weakly bound, in which case the molecule may dissociate into atoms which leave the trap. To channel the populations into robust final molecular states, adiabatic passage and pump-dump schemes that involve stimulated emission from the intermediate excited electronic state have been proposed by various groups [21]. STIRAP and SARP [15-17] process have caught the molecule in a specific rovibrational state. Again these processes conserve the translational cooling while the molecule has been driven to the lowest rovibrational state.

A recently intense scientific interest come from polar molecules because they can be situate inside lattices to study many-body dynamics, which provide highly controllable, long-lived and strongly interacting dipolar systems, a first experimental observation is reported in [22]. Hence, it is possible to explore a way to transfer in a coherent and direct way the molecular population between the singlet and triplet sublevels of the rovibrational Mott-Insulator ground molecular state [26] as a function of the Coulomb on-site and nearest-neighbor interactions.

In a general way the main theoretical aspects to perform these problems come from atomic and molecular physics, dynamical studies of the molecular internal degree of freedom in the presence of radiation and evolution of many-body strongly correlated systems

Descripción 7 de 15**ESTADO DEL ARTE**

State of knowledge in the problem area.

The revolution in cold matter begun with cooling of atoms by laser - The Nobel Prize in Physics 1997 S. Chu, C. Cohen-Tannoudji and W. D. Phillips - and the first successful was Bose-Einstein Condensate (BEC) of Rb and Na atoms - The Nobel Prize in Physics 2001 E. A. Cornell, W. Ketterle, y C. E. Wieman. The BEC temperature is of the order of nano Kelvin, and the cloud is trapped by magneto-optical fields in almost perfect vacuum (10^{-14} bar).

Laser cooling of atoms relies on a closed-level radiative transition scheme which allows the atoms to undergo many absorption-spontaneous emission cycles until they are stopped in the laboratory frame. Such closed-level schemes are not expected to be easily found in molecules because they have many internal degrees of freedom: vibrations, rotations and hyperfine structure.

Production of ultra-cold molecules either by cooling thermal gases (direct methods) or by linking ultra-cold atoms (indirect methods) is still in continuous improving. The successful association of two pre-cooled atoms to form molecules has been achieved using photoassociation and magnetoassociation. These process are the most known indirect methods at the current time and they take advantage from Feshbach resonance to control the interaction between atoms, this allowed to get the molecular BEC in 2003 [23].

Cold molecules have attracted growing interest in last times, due to their potential utility in several areas: cold chemistry, quantum dipolar system, quantum information. In many of these applications completed evolve the molecular system in a robust target quantum state is desirable; hence the control in all degrees of freedom (electronic, vibrational, rotational, hyperfine and external motion) is required [24].

Due to the atom-atom association mechanism the triplet-rovibrational excited state has higher probability to be populated [2, 17] and further technique as STIRAP must be implemented to undergo the singlet-rovibrational ground state. Although this technique is experimentally complex, it is highly efficient and state-selective [16]. Nevertheless, it can only be applied once per experimental realization, limiting the ultimate number of ground state molecules. An alternative to the use of STIRAP step is to ramp up an optical lattice, this step provides no further heating [25-26] and once the loading of the ultracold molecules is performed, the system becomes deeply bound [27] and strongly correlated and finally can be used as a quantum simulator.

Descripción 8 de 15**OBJETIVO GENERAL**

General objective.

To propose and implement computationally new mechanisms for the formation of cold alkali molecules, involving the laser control of collisions between cold atoms, the subsequent dynamics of the internal molecular degrees of freedom and ultracold lattice molecules.

Descripción 9 de 15**OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

Specific objectives:

1. To calibrate the ab-initio potential energy curves for alkali molecules reported in the literature, in order to obtain a good agreement between theory and experiment of spectroscopic properties and scattering lengths.
2. To determine the energies and lifetimes of the orbiting resonances arising in the ground electronic state of the target diatomic alkali molecule at high J.
3. To calculate the cross-sections for stimulated photoassociation of two colliding ground-state atoms into the vibrational states of the electronic ground state of the target diatomic molecule, taking as initial states the orbiting resonances determined in specific objective 2.
4. To simulate the coherent quantum dynamics, and possible control, of the stimulated photoassociation processes described in objective 3, employing chirped laser pulses.
5. To propose a theoretical scheme using multiple laser pulses to produce alkali diatomic molecules in specific rovibrational

states.

6. To determine the role of different intermediate states to efficiently obtain KRb molecules by STIRAP in the ground vibrational state from Feshbach molecules.

7. To design SARP laser pulses to generate KRb molecules on specific rovibrational states (v , J , M) or superposition of sublevels M .

8. To establish the effective Hamiltonian that exhibits the relevant low-energy physical phenomena of the tightly bound ultracold lattice molecules in the triplet- and singlet-rovibrational ground-state in the Mott-insulator regime.

9. To identify the relevant and necessary local- and non-local-observables, critical exponents and correlations to be measured from the lattice molecules obtained in objective 8 and perform the respective numerical implementations.

10. To find how to stabilize a coherent transfer population between the singlet and triplet sublevels of the rovibrational Mott-Insulator molecular ground-state as a function of the Coulomb on-site and nearest-neighbor interactions, using the obtained information from objective 9.

Descripción 10 de 15

METODOLOGÍA

Methodology for achieving each objective.

The general objective in this project involves time-dependent calculations to analyze the dynamic of molecules.

To achieve 1-4 objectives we propose an alternative scheme based on the following physical picture: Since the majority of the atomic collisions that occur in the dilute, cold gas are binary and involve high impact parameters, i.e. high rotational quantum numbers J , a sizable fraction of them occur with energies that coincide with the energies of orbiting resonances in the center-of-mass frame. As these resonances are rovibrational quasibound states located just above the dissociation threshold, the cross-sections for optical transitions from them into bound vibrational levels are much higher than those from free scattering states [9]. Hence, by tuning the laser field to these quasibound to bound transitions, we can stimulate the formation of the diatomic molecule. This scheme has the advantage that it entails a direct one-step process, in which the laser can be finely tuned to any desired final vibrational state, within the J values allowed by the rotational selection rule. Moreover, we intend to control the population transfers during such transitions employing chirped laser pulses. The resonances and cross-sections will be computed by means of the optical-potential real-time wavepacket propagation method [9-11]. The coherent, unitary quantum dynamics of the photoassociation processes will be simulated by numerical integration of the time-dependent Schrödinger equation [1-4, 12], taking as initial conditions incoming wavepackets with a range of energies and widths consistent with the low temperatures of the phenomenon. The prototype systems will be alkali molecules, for which the potential-energy curves and dipole transition moments are well known [1, 2].

(5-7 objectives) To determine the molecular structure (vibrational energy levels, and oscillator strengths between vibrational levels), the numerical method used to solve the time independent Schrödinger equation is called "Mapped Fourier Grid Hamiltonian Representation Method" (MFGHR) [2]. Using this numerical method we can obtain for each vibrational state of a chosen electronic state the transition probabilities toward lower vibrational levels and the respective values of the lifetimes. The respective potentials and molecular electronic dipole are calculated in the Laboratory Aimé Cotton in Orsay, France, and constitute our raw material for the construction of respective tables with numerical values of transition probabilities and lifetimes. From these available numerical tables, we proceed to make graphs that allow us to analyze information, draw conclusions for each dimer and to compare results for different molecules.

To determine the dynamics induced in the molecule in the presence of a laser pulse, two different approaches are used to solve the time dependent Schrödinger equation. By using the 'wave-packet method', we calculate globally the evolution of the vibrational wave-packets created on the electronic states coupled by the laser pulses. The time-dependent Schrödinger equation is solved by polynomial expansion in Chebychev basis. By using the "level by level method", we determine the instantaneous amplitudes of population of a restricted number of vibrational levels explicitly supposed to be involved in the excitation process. [1].

(8-10 objectives) The description of the ultracold strongly correlated molecules loaded on one-dimensional optical lattices is performed by means of two methods depending on the length of the lattice. Focusing on few-sites quantum-state systems (around 10 sites) we are going to use Exact Diagonalization (ED) like the Lanczos algorithm [28]. To analyze longer systems (more than 20 sites) we are going to use the Matrix Product State (MPS) technique [29]. The latter has been chosen because the MPS representation efficiently approximates the ground state of 1D local Hamiltonians. The formalism is highly recommended when the amount of entanglement in the system is limited reducing the calculation complexity from an original exponential to an algebraic growing of the Hilbert space. This method allows us to study the molecular quantum ground-state properties via the calculations of local and non-local operators, correlations and critical exponents.

Descripción 11 de 15**RESULTADOS ESPERADOS DE LA INVESTIGACIÓN**

Expected results (knowledge).

The development of this project allows knowledge about spectroscopic properties of alkali molecules as KRb. This is important to get full control over system and the implemented control mechanics allow us understanding on control protocols over cold di-alkali molecules.

Expected results (products).

- Products related to achievement of new knowledge:

5 - Research papers (review A1).

- Products related to profit of social knowledge:

5 - Internal seminars. Departamento de Física y química -Univalle - ICESI.

1 - International meeting, 2 - National meeting.

- Products related to the formation and skill achievement of persons:

2 - Research work (Master student).

Descripción 12 de 15**TRAYECTORIA DEL EQUIPO DE INVESTIGACIÓN**

Trajectory of the researchers.

The researchers of this project have vast experience on theoretical studies about collisions between atoms, formation of molecules, used of laser to control chemical reactions, molecular dynamics, atom-diatom collisions and dynamical of many particles. The project gathers researchers from different groups and areas: physics and chemistry hence the vision from different areas and expertise of the researchers are an advantage to get successful results.

For first time this working team perform a research proposal with the expectation to create and lead a new line of research in Colombia on Cold Molecules.

Descripción 13 de 15**POSIBLES EVALUADORES**

Suggested evaluators.

1. Jordi Mur Petit - jordi.murino@gmail.com - google-sites: <https://sites.google.com/site/jordimurpetit/> - Instituto de Estructura de la Materia Serrano, 123 Room 138 Madrid 28006 (Spain).

2. Rosario González Férez - rogonzal@ugr.es - web-page: <http://www.ugr.es/~rogonzal/> - Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear . Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional. Universidad de Granada - Facultad de Ciencias Avenida de Fuentenueva, S/N 18071 Granada (Spain).

Descripción 14 de 15**IMPACTO AMBIENTAL DEL PROYECTO**

Environmental impact .

This research is purely theoretical and on basic science hence there is not directly and measurable environmental impact which is produced during its development. Analytic and numerical calculations are our main activity. Thus at present time and near future the expected impact of this project is the same to daily human activity like: to use the car or the electric spending. The current possibility to reduce this impact comes from the individual consciousness.

In the future, the possible impact of industrial production which can derivate from results on this research is more speculative

hence it is not relevant do now.

Descripción 15 de 15

BIBLIOGRAFÍA

References.

- [1] B. E. Londono, A. Derevianko, J. E. Mahecha, A. Crubellier and E. Luc-Koenig. Femtosecond pulses and dynamics of molecular photoexcitation: RbCs example. *Phys. Rev. A*. 85, 033419 (2012).
- [2] B. Londoño, J. E. Mahecha, E. Luc-Koenig, and A. Crubellier, Lifetime of vibrational levels from Fourier grid calculations: RbCs example. DOI: 10.1039/C1CP21167F. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 13, 18738 (2011). B. Londoño, J. E. Mahecha, E. Luc-Koenig, and A. Crubellier, Resonant coupling effects on the photoassociation of ultracold Rb and Cs atoms. *Phys. Rev. A* 80, 032511 (2009).
- [3] Arango, C., Shapiro, M., Brumer, P. Coherent control of collision process: Penning versus associative ionization. *The Journal of Chemical Physics* 125, 094315 (2006).
- [4] Arango, C., Shapiro, M., Brumer, P. Cold Atomic Collisions: Coherent Control of Penning and Associative Ionization. *Physical Review Letters* 97, 193202 (2006)
- [5] K. Rodríguez, S. R. Manmana, M. Rigol, R. M. Noack, and A. Muramatsu, "Coherent matter waves emerging from Mott-insulators", Invited paper to a special issue on Cold Atoms in Optical Lattices, *New J. Phys.* 8, 169 (2006).
- [6] K. Rodríguez, A. Argüelles and L. Santos, "Correlation dynamics of strongly-correlated bosons in time-dependent optical lattices", *ArXiv:0905.3312 [cond-mat.quantgas]* (2009).
- [7] K. Rodríguez, A. Argüelles, M. Colomé-Tatché, T. Vekua and L. Santos, "Mott-Insulator Phases of Spin-3/2 Fermions in the Presence of Quadratic Zeeman Coupling", *Phys. Rev. Lett.* 105, 050402 (2010).
- [8] K. Rodríguez, A. Argüelles, A. K. Kolezhuk, L. Santos and T. Vekua, "Field-induced phase transitions of repulsive spin-1 bosons in optical lattices", *Phys. Rev. Lett.* 106, 105302 (2011).
- [9] J.C. Arce. Real-time wavepacket propagation method for the spectroscopy of simple systems: pure quadrupole vibration-rotation spectra of molecular hydrogen. *Rev. Col. Fís.* 31, 65 (2000).
- [10] D.F. Montaña, J.C. Arce and N. Porrás-Montenegro, Quantum states and interband optical spectra in spherical GaAs-(Ga,Al)As quantum dots doped with on-centre shallow donor impurities: a real-time wavepacket propagation method. *J. Phys. Condens. Matter* 12, 9917 (2000).
- [11] P.W. Langhoff, J.C. Arce, and J.A. Sheehy. Dynamical theory of molecular photoionization: electron ejection kinematics and angular distributions from molecules fixed in space. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 123, 117 (2002).
- [12] M.L. Zambrano and J.C. Arce, Stark-resonance densities of states, eigenfunctions, and lifetimes for electrons in GaAs/(Al,Ga)As quantum wells under strong electric fields: An optical-potential wave-packet propagation method. *Phys. Rev. B* 66, 155340 (2002).
- [13] J. G. López and A. B. McCoy. Classical treatments of quantum mechanical effects in collisions of weakly bound complexes. *Chem. Phys.* 308, 267 (2005)
- [14] C D Bruzewicz, M. Gustavsson, T. Shimasaki and D DeMille. Continuous formation of vibronic ground state RbCs molecules via photoassociation. *New Journal of Physics* 16, 023018 (2014).
- [15] Debatin, M., Creation of Ultracold RbCs Ground-State Molecules, D. Sc. Dissertation, Faculty of Mathematics, Computer Science and Physics, University of Innsbruck, Innsbruck July 2013.
- [16] Mukherjee, N., Dong, W., Zare, R., Coherent superposition of M-states in a single rovibrational level of H₂ by Stark-induced adiabatic Raman passage, *The Journal of Chemical Physics* 140, 074201 (2014).
- [17] Gaubatz, U., Rudecki, P., Becker, M., Schiemann, S., Külz, M., Bergmann, K., Population switching between vibrational levels in molecular beams, *Chem. Phys. Lett.* 149, 463 (1988).
- [18] W. D. Phillips, Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms. *Rev. Mod. Phys.* 70, 721 (1998).
- [19] M. Viteau, A. Chotia, M. Allegrini, N. Bouloufa, O. Dulieu, D. Comparat, P. Pillet. Optical Pumping and Vibrational Cooling of Molecules. *Science* 321, 232 (2008).
- [20] K. M. Jones, E. Tiesinga, P. D. Lett, P.S. Julienne. Publisher's Note: Ultracold photoassociation spectroscopy: Long-range molecules and atomic scattering. *Rev. Mod. Phys.* 78, 483 (2006).
- [21] C. P. Koch and M. Shapiro, Coherent Control of Ultracold Photoassociation. *Chem. Rev.* 112, 4928 (2012).
- [22] Bo Yan, S. A. Moses, B. Gadway, J. P. Covey, K. R. A. Hazzard, A. M. Rey, D. S. Jin & Jun Ye. Observation of dipolar spin-exchange interactions with lattice-confined polar molecules. *Nature* 501, 521 (2013)
- [23] S. Jochim, et al., Bose-Einstein condensation of molecules, *Science* 302, 2101 (2003); M. Greiner, C. A. Regal and D. S. Jin, Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas, *Nature* 426, 537 (2003); M. W. Zwierlein, et al., Observation of Bose-Einstein condensation of molecules, *Phys. Rev. Lett.* 91, 250401 (2003).
- [24] N. Balakrishnan and A. Dalgarno, Chemistry at ultracold temperatures. *Chem. Phys. Lett.* 341, 652 (2001); R. V. Krems, Viewpoint: Ultracold controlled chemistry, *Physics* 3, 10 (2010).
- [25] T. Rom, T. Best, O. Mandel, A. Widera, M. Greiner, T. W. Hänsch, and I. Bloch. State Selective Production of Molecules in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 93, 073002 (2004).

[26] T. Volz, N. Syassen, D. M. Bauer, E. Hansis, S. Dürr, and G. Rempe, Preparation of a quantum state with one molecule at each site of an optical lattice, *Nature Phys.* 2, 692 (2006).

[27] Johann G Danzl, Manfred J Mark, Elmar Haller, Mattias Gustavsson, Russell Hart, Andreas Liem, Holger Zellmer and Hanns-Christoph Näger, Deeply bound ultracold molecules in an optical lattice. *New J. Phys.* 11, 055036 (2009).

[28] Golub, G. H., Van Loan, C. F. (1989), *Matrix computations*. Johns Hopkins University Press, 2nd edition.

[29] F. Verstraete, J. J. García-Ripoll and J. I. Cirac. Matrix Product Density Operators: Simulation of Finite-Temperature and Dissipative Systems. *Phys. Rev. Lett.* 93, 207204 (2004); G. Vidal. Efficient Simulation of One-Dimensional Quantum Many-Body Systems. *Phys. Rev. Lett.* 93 040502 (2004).

PALABRAS CLAVE (Total: 6)[Ir al menú](#)

- quantum control
- resonances
- optical lattice
- photoassociation
- Cold molecules
- strongly correlated system

CRONOGRAMA (Total: 22)[Ir al menú](#)

Número	Actividad	Desde	Hasta	Tiempo
01	Calibration of electronic potentials of KRb molecule (objective 1)	1	2	Meses
02	Calculation of vibrational energies, lifetime, cross-section, dipole transition moments (objectives 2,3,6,7,8)	2	6	Meses
03	Characterization of orbiting resonances on KRb molecule (objective 3)	4	9	Meses
04	Preparation of paper (objectives 1,2)	10	12	Meses
05	Implementation of a chirped pulse to control the orbiting resonances on KRb molecule (objetives 3,4)	13	17	Meses
06	Study and analyzed of mechanics to vibrational cooling (objectives 3,4)	17	20	Meses
07	Implementation of process to create cold KRb molecule from orbiting resonances in the cold collision of K and Rb atoms (objective 4)	21	28	Meses
08	Preparation of paper (objectives 3,4)	28	31	Meses
09	Determination of the interesting rovibrational states to implement the STIRAP and SARP and comparison with experimental reports to date (objectives 5,6,7)	7	14	Meses
10	Analysis of the rovibrational dynamic in wavepacket created by pulse (objectives 6,7)	14	23	Meses
11	Preparation of paper (objectives 6,7)	24	26	Meses
12	Implementation of optimal pulse to control STIRAP process (objective 6)	26	31	Meses
13	Implementation of optimal pulse to control SARP process (objective 7)	29	34	Meses
14	Implementation of a scheme to obtain the KRb molecule in a specific rovibrational state (objective 5)	28	34	Meses
15	Preparation of paper (objective 5)	31	34	Meses

16	Determination of effective Hamiltonian of lattice KRb polar molecule (objectives 8,9,10)	6	9	Meses
17	Determination of the observables, correlations, critical exponents of the determined Hamiltonian for lattice molecule (objective 9)	9	16	Meses
18	Numerical implementation to solve the dynamics of determined Hamiltonian for lattice molecule (objectives 9,10)	17	26	Meses
19	Analysis a mechanics to obtain coherent transfer population between the singlet and triplet rovibrational sublevels in KRb molecule (objectives 10)	21	30	Meses
20	Preparation of paper (objectives 8,9,10)	29	33	Meses
21	Preparation of reports (objectives 1-10)	34	36	Meses
22	Discussions between researchers and/or international partners. (Continuous activity during the development of the project) (objectives 1-10)	1	36	Meses

RESULTADOS FORMACIÓN (Total: 1)[Ir al menú](#)

Formación	Descripción	Personas	Beneficiario
MAESTRIA	Research work of Master students	2	students, university and country

RESULTADOS PUBLICACIONES (Total: 1)[Ir al menú](#)

Publicación	Descripción	Cantidad	Beneficiario
PONENCIAS	1 - International meeting 2 - National meeting	3	community

OTROS RESULTADOS (Total: 1)[Ir al menú](#)

Resultado	Descripción	Cantidad	Beneficiario
ARTICULO EN REVISTA A1, A2, B, C Y D	5	7	university, country, cientific intrenational community

COBERTURA(1)[Ir al menú](#)

Nombre	Porcentaje de cobertura
VALLE	100

TIPO PERSONAL (Total: 3)[Ir al menú](#)

Rol en el Proyecto	Cantidad
ESTUDIANTE MAESTRIA	2
INVESTIGADOR	4
INVESTIGADOR PRINCIPAL	1

PERSONAS (Total: 7)[Ir al menú](#)**Persona 1 de 7**

Entidad	Universidad Icesi
Rol en el proyecto	INVESTIGADOR
Primer apellido	Arango
Segundo apellido	Mambuscay
Nombres	Carlos Alberto
Género	Masculino
Fecha de nacimiento	06/09/1973
País	COLOMBIA
Correo electrónico	caarango@icesi.edu.co
Tipo de identificación	CEDULA DE CIUDADANIA
Número	94398430
Responsabilidades	Desarrollo de objetivos 5-7
Dedicación horas semanales	4
Número de meses	36

Persona 2 de 7

Entidad	Universidad del Valle
Rol en el proyecto	INVESTIGADOR
Primer apellido	Rodríguez
Segundo apellido	Ramírez
Nombres	Karem Cecilia
Género	Femenino
Fecha de nacimiento	01/11/1980
País	COLOMBIA
Correo electrónico	karem.c.rodriguez@correounivalle.edu.co
Tipo de identificación	CEDULA DE CIUDADANIA
Número	52517246
Responsabilidades	Desarrollo de objetivos 8-10
Dedicación horas semanales	5
Número de meses	36

Persona 3 de 7

Entidad	Universidad del Valle
Rol en el proyecto	INVESTIGADOR
Primer apellido	Arce
Segundo apellido	Clavijo
Nombres	Julio Arce
Género	Masculino
Fecha de nacimiento	03/04/1963

País	COLOMBIA
Correo electrónico	julio.arce@correounivalle.edu.co
Tipo de identificación	CEDULA DE CIUDADANIA
Número	16270325
Responsabilidades	Desarrollo de objetivos 1-4
Dedicación horas semanales	8
Número de meses	36

Persona 4 de 7

Entidad	Universidad del Valle
Rol en el proyecto	INVESTIGADOR
Primer apellido	López
Segundo apellido	Sotelo
Nombres	José Guillermo
Género	Masculino
Fecha de nacimiento	03/05/1973
País	COLOMBIA
Correo electrónico	jose.g.lopez@correounivalle.edu.co
Tipo de identificación	CEDULA DE CIUDADANIA
Número	94382084
Responsabilidades	Desarrollo de objetivos 1-4
Dedicación horas semanales	5
Número de meses	36

Persona 5 de 7

Entidad	Universidad del Valle
Rol en el proyecto	INVESTIGADOR PRINCIPAL
Primer apellido	Londoño
Segundo apellido	Flórez
Nombres	Beatriz Elena
Género	Femenino
Fecha de nacimiento	09/09/1979
País	COLOMBIA
Correo electrónico	beatriz.e.londono.f@correounivalle.edu.co
Tipo de identificación	CEDULA DE CIUDADANIA
Número	32108113
Responsabilidades	Desarrollo de objetivos 5-7
Dedicación horas semanales	10
Número de meses	36

Persona 6 de 7

Entidad	Universidad del Valle
---------	---------------------------------------

Rol en el proyecto	ESTUDIANTE MAESTRIA
Primer apellido	NN
Segundo apellido	NN
Nombres	NN
País	COLOMBIA
Responsabilidades	Desarrollo de objetivos 1-7
Dedicación horas semanales	40
Número de meses	24

Persona 7 de 7

Entidad	Universidad del Valle
Rol en el proyecto	ESTUDIANTE MAESTRIA
Primer apellido	NN
Segundo apellido	NN
Nombres	NN
País	COLOMBIA
Responsabilidades	Desarrollo de objetivos 8-10
Dedicación horas semanales	40
Número de meses	24

PRESUPUESTO GLOBAL(Total: 5)[Ir al menú](#)

Rubros	Financiado	Contrapartida		Total
		Ejecutora(s)	Otras	
EQUIPOS	15,000,000	13,000,000	2,000,000	30,000,000
GASTOS DE OPERACIÓN	17,652,251	0	0	17,652,251
PERSONAL CIENTÍFICO	120,000,000	115,926,617	26,788,320	262,714,937
SEGUIMIENTO Y EVALUACION	5,825,243	0	0	5,825,243
VIAJES	41,522,506	0	0	41,522,506
Totales	200,000,000	128926617	28788320	357,714,937

RESUMEN POR RUBROS (Total: 5)[Ir al menú](#)

Rubros	Financiado	%	Especie	%	Efectivo	%	Total
EQUIPOS	15000000	50%	15,000,000	50%	0	0%	30,000,000
GASTOS DE OPERACIÓN	17652251	100%	0	0%	0	0%	17,652,251
PERSONAL CIENTÍFICO	120000000	45,68%	142,714,937	54,32%	0	0%	262,714,937
SEGUIMIENTO Y EVALUACION	5825243	100%	0	0%	0	0%	5,825,243
Totales	200,000,000	55.91	157,714,937	44.09	0	0.00	357,714,937

Rubros	Financiado	%	Especie	%	Efectivo	%	Total
VIAJES	41522506	100%	0	0%	0	0%	41,522,506
Totales	200,000,000	55.91	157,714,937	44.09	0	0.00	357,714,937

PRESUPUESTO POR ENTIDAD (Total: 2)[Ir al menú](#)**Entidad 1 de 2 Universidad Icesi**

Rubro	Descripción	Entidad financiadora	Financiado	%	Contrapartida				Total
					Especie - %		Dinero - %		
EQUIPOS	Estaciones de trabajo y una impresora	COLCIENCIAS	0	0	2,000,000	100,00	0	0	2,000,000
PERSONAL CIENTÍFICO	Carlos Alberto	COLCIENCIAS	0	0	26,788,320	100,00	0	0	26,788,320
Totales			0	0.0	28,788,320	100.0	0	0.0	28,788,320

Entidad 2 de 2 Universidad del Valle

Rubro	Descripción	Entidad financiadora	Financiado	%	Contrapartida				Total
					Especie - %		Dinero - %		
EQUIPOS	Estaciones de trabajo y una impresora	COLCIENCIAS	0	0	0	0	0	0	0
EQUIPOS	Estaciones de trabajo y una impresora	COLCIENCIAS	15,000,000	53,57	13,000,000	46,43	0	0	28,000,000
GASTOS DE OPERACIÓN	gastos Universidad	COLCIENCIAS	17,652,251	100,00	0	0	0	0	17,652,251
PERSONAL CIENTÍFICO	NN	COLCIENCIAS	60,000,000	100,00	0	0	0	0	60,000,000
PERSONAL CIENTÍFICO	NN	COLCIENCIAS	60,000,000	100,00	0	0	0	0	60,000,000
PERSONAL CIENTÍFICO	José Guillermo	COLCIENCIAS	0	0	15,145,000	100,00	0	0	15,145,000
PERSONAL CIENTÍFICO	Beatriz Elena	COLCIENCIAS	0	0	38,682,000	100,00	0	0	38,682,000
PERSONAL CIENTÍFICO	Karem Cecilia	COLCIENCIAS	0	0	19,667,617	100,00	0	0	19,667,617
PERSONAL CIENTÍFICO	Julio Arce	COLCIENCIAS	0	0	42,432,000	100,00	0	0	42,432,000
SEGUIMIENTO Y EVALUACION	seguimiento COLCIENCIAS	COLCIENCIAS	5,825,243	100,00	0	0	0	0	5,825,243
VIAJES	Cali	COLCIENCIAS	13,000,000	100,00	0	0	0	0	13,000,000
VIAJES	Nacional y/o internacional	COLCIENCIAS	28,522,506	100,00	0	0	0	0	28,522,506
Totales			200,000,000	60.8	128,926,617	39.2	0	0.0	328,926,617

PRESUPUESTO DETALLADO (Total: 5)[Ir al menú](#)**Cuadro 1 de 5 EQUIPOS**

Descripción	Justificación	Cantidad	Valor unitario	Entidad	Financiado	Contrapartida		Total
						Especie	Dinero	
Estaciones de trabajo y una impresora	Cálculos numéricos, impresión de material bibliográfico y documentos.			Universidad Icesi	0	2,000,000	0	2,000,000
Estaciones de trabajo y una impresora	Cálculos numéricos, impresión de material bibliográfico y documentos.			Universidad del Valle	0	0	0	0
Estaciones de trabajo y una impresora	Cálculos numéricos, impresión de material bibliográfico y documentos.			Universidad del Valle	15,000,000	13,000,000	0	28,000,000
Totales					15,000,000	15,000,000	0	30,000,000

Cuadro 2 de 5 PERSONAL CIENTÍFICO

Nombre	Función en el proyecto	Tipo de vinculación	Dedicación Hora/Semana	Entidad	Financiado	Contrapartida		Total
						Especie	Dinero	
Carlos Alberto Arango	Desarrollo de objetivos 5-7	EN PLANTA	4	Universidad Icesi	0	26,788,320	0	26,788,320
NN NN	Desarrollo de objetivos 1-7	POR CONTRATO	40	Universidad del Valle	60,000,000	0	0	60,000,000
NN NN	Desarrollo de objetivos 1-7	POR CONTRATO	40	Universidad del Valle	60,000,000	0	0	60,000,000
José Guillermo López	Desarrollo de objetivos 1-4	EN PLANTA	5	Universidad del Valle	0	15,145,000	0	15,145,000
Totales					120,000,000	142,714,937	0	262,714,937

Nombre	Función en el proyecto	Tipo de vinculación	Dedicación Hora/Semana	Entidad	Financiado	Contrapartida		Total
						Especie	Dinero	
Beatriz Elena Londoño	Desarrollo de objetivos 5-7	EN PLANTA	10	Universidad del Valle	0	38,682,000	0	38,682,000
Karem Cecilia Rodríguez	Desarrollo de objetivos 8-10	EN PLANTA	5	Universidad del Valle	0	19,667,617	0	19,667,617
Julio Arce Arce	Desarrollo de objetivos 1-4	EN PLANTA	8	Universidad del Valle	0	42,432,000	0	42,432,000
Totales					120,000,000	142,714,937	0	262,714,937

Cuadro 3 de 5 GASTOS DE OPERACIÓN

Descripción	Justificación	Entidad	Financiado	Contrapartida		Total
				Especie	Dinero	
gastos Universidad	procesos internos universidad Operación	Universidad del Valle	17,652,251	0	0	17,652,251
Totales			17,652,251	0	0	17,652,251

Cuadro 4 de 5 VIAJES

Lugar / Justificación	Nº días / Nº personas	Pasaje por persona	Estadía por persona	Entidad	Financiado	Contrapartida		Total
						Especie	Dinero	
Cali / Visitas de experto a Cali durante 2 semanas/Fortalecimiento del intercambio y la formación científicos	20 / 2	2,500,000	200,000	Universidad del Valle	13,000,000	0	0	13,000,000
Nacional y/o internacional / Pasantías de los investigadores y/o los estudiantes del proyecto a laboratorios internacionales /Fortalecimiento del intercambio y la formación científicos y/o Participación en eventos nacionales y/o internacionales de los investigadores y los estudiantes/ Divulgación de los avances científicos	5 / 4	3,000,000	826,125	Universidad del Valle	28,522,506	0	0	28,522,506
Totales					41,522,506	0	0	41,522,506

Cuadro 5 de 5 SEGUIMIENTO Y EVALUACION

Descripción	Justificación	Entidad	Financiado	Contrapartida		Total
				Especie	Dinero	
seguimiento COLCIENCIAS	COLCIENCIAS	Universidad del Valle	5,825,243	0	0	5,825,243
Totales			5,825,243	0	0	5,825,243

PRESUPUESTO GLOBAL TOTAL (Total: 2 entidades)[Ir al menú](#)

Entidad	Financiado	Contrapartida Especie	Contrapartida Dinero	Total
Universidad Icesi	0	28,788,320	0	28,788,320
Universidad del Valle	200,000,000	128,926,617	0	328,926,617
Totales	200,000,000	157,714,937	0	357,714,937

PRESUPUESTO GLOBAL POR AÑO (Total: 5 rubros)[Ir al menú](#)

Rubro	Financiado	Año 1	Año 2	Año 3	Total
EQUIPOS	30,000,000	30,000,000	0	0	30,000,000
GASTOS DE OPERACIÓN	17,652,251	17,652,251	0	0	17,652,251
PERSONAL CIENTÍFICO	262,714,937	87,571,646	87,571,646	87,571,645	262,714,937
SEGUIMIENTO Y EVALUACION	5,825,243	5,825,243	0	0	5,825,243
VIAJES	41,522,506	6,522,506	20,000,000	15,000,000	41,522,506
Totales	357,714,937	147,571,646	107,571,646	102,571,645	357,714,937



CERTIFICADO DE REQUISITOS

CÓDIGO DEL PROYECTO: 42793

TÍTULO: Formation and control of cold molecules

ENTIDAD: Universidad del Valle

CONVOCATORIA: 658-2014 CONVOCATORIA PARA PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS

PROGRAMA: PROGRAMA NACIONAL DE CIENCIAS BÁSICAS

RELACIÓN DE REQUISITOS Y DOCUMENTOS ADJUNTOS

Nº	Definición del requisito	Nombre del archivo adjunto	Tamaño
1	Autorización de uso de datos personales- Anexo 5	06-USODATOS.pdf	1442715 Bytes
2	Carta de aceptación términos de referencia- Anexo 7	10-IP-BL_anexo7.pdf	568849 Bytes
3	Carta de aprobación comité de ética con acto administrativo	07-COMITE_ETICA.pdf	1876114 Bytes
4	Carta de presentación, aval y aceptación de compromisos; relacionando que este proyecto no está siendo presentado por otra convocatoria y no está siendo financiado, -Anexo 2.	02-AVAL.pdf	546301 Bytes
5	Carta para certificación de la contrapartida aportada por entidad. -Anexo 4	05-CONTRAPARTIDA.pdf	181017 Bytes
6	Modelo de intención de Acuerdo de propiedad intelectual-Anexo 6	09-ACUERDO_PI-ICESI_Univalle.pdf	251362 Bytes
7	Relaciona los proyectos financiados por COLCIENCIAS en los últimos cinco años.- Anexo 3.	03-PROYECTOSColciencias.pdf	28454 Bytes
8	Otros adjuntos	Otros-FullProject-Control-Molecules.pdf	146978 Bytes

TOTAL: 8 ARCHIVOS ADJUNTOS

Certificado generado a los 18 días del mes de June de 2014 por el Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e innovación - COLCIENCIAS

Contraseña:3413

