

## Anexo 3

**Título:** “Desarrollos matemáticos y numéricos en el estudio de la dinámica disipativa de sistemas moleculares”

**Unidad Ejecutora Principal del Resultado:** Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas.

**Autores principales:** Helen Clara Peñate Rodríguez, Germán Alfredo Rojas Lorenzo.

**Otros autores:** -

**Colaboradores científicos:** 7

**Afiliaciones:** Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas.

El presente trabajo se orientó al estudio de diferentes sistemas y procesos disipativos, como son la evolución de un sistema de dos estados disipativos [1-3] y acoplados con un baño térmico [4,5], la difusión de partículas adsorvidas en una superficie bajo la acción de los efectos Zeno y anti Zeno [6] y la evolución de la dinámica disipativa de diferentes sistemas descritos con un Hamiltoniano de Caldirola–Kanai [7].

Como ejemplo de sistema de dos estados utilizamos los sistemas quirales. Relacionado con estos sistemas hay uno de los retos actuales de la Física: la medición de la diferencia de energía entre los enantiómeros de una molécula quiral. Se estima que esta diferencia está ocasionada por la presencia de interacciones electrodébiles que se establecen entre los núcleos y electrones de la molécula. Sin embargo, las deducciones teóricas fijan los valores de la diferencia de energía entre los enantiómeros en el rango de  $10^{-23} - 10^{-13}$  eV.

Los sistemas quirales se pueden describir fenomenológicamente a través de un potencial de doble pozo. Nos interesa el caso asimétrico donde existe una diferencia de energía entre los mínimos de ambos pozos (diferencia de energía entre los enantiómeros). En el proceso también compite la transferencia de población por efecto túnel entre ambos pozos (estados del sistema) y el mismo está relacionado con la altura de la barrera entre los mismos.

Para el estudio de la dinámica de los sistemas quirales utilizamos una formulación canónica que describe al sistema aislado, e incorporamos la interacción con un baño térmico a través de un Hamiltoniano de Caldeira–Leggett. En el régimen disipativo, no estocástico se describen las estructuras geométricas que soportan las formulaciones tanto clásica como cuántica para sistemas quirales vistos como sistemas de dos estados. Una vez introducidas las estructuras geométricas, se pasa al análisis de la estabilidad de los sistemas quirales, determinando el rango de valores de los parámetros que conducen a un comportamiento estable de las soluciones, tanto para el caso de sistemas cerrados como disipativos. Se calculó, además, la fase geométrica del sistema y se estimó que una medición directa de esta magnitud es una clara evidencia de la existencia de una diferencia de energía entre los dos enantiómeros [2]. Dentro del régimen puro disipativo se analizaron diferentes funciones de acoplamiento con el baño térmico, sin considerar el ruido [3]. Para el régimen estocástico se incorporó un ruido blanco gaussiano y las múltiples pruebas realizadas avalaron su correcta implementación. Todas las simulaciones se realizaron comenzando la dinámica del sistema fuera del equilibrio termodinámico (sistema perturbado). En la evolución del sistema quiral se observaron dos vías por las cuales el mismo alcanza el equilibrio termodinámico, en función de la temperatura. Para altas temperaturas el sistema tiende al equilibrio sin manifestar oscilaciones (régimen incoherente) y a bajas temperaturas se aprecia un régimen coherente en la evolución del mismo [4]. Se encontró un acuerdo muy bueno entre nuestros resultados numéricos y las soluciones analíticas propuestas al aplicar integrales de camino, para las diferentes magnitudes de interés (diferencia de población, energía, calor específico, etc) en función de la temperatura. Esto indica que las variables canónicas utilizadas (diferencia de población y diferencia de fases entre los dos estados) contienen toda la información física del sistema [4,5].

El problema de la difusión de adsorvatos en una superficie fue descrito por medio de una dinámica disipativa-estocástica en los marcos de la aproximación de un solo adsorvato. En este problema fue analizado la acción de los efectos Zeno y anti Zeno en el modo Q de la función de dispersión. La manifestación del efecto anti Zeno se asoció al ensanchamiento del pico Q de la función de dispersión [6].

La dinámica disipativa de diferentes sistemas fue analizada en el marco de un Hamiltoniano de Caldirola–Kanai (partícula libre en medio viscoso, movimiento de una partícula bajo la acción de un potencial lineal en

### Anexo 3

un medio viscoso, movimiento de un partícula en el potencial de un oscilador armónico amortiguado). Los resultados condujeron a la conclusión de que en el marco de este Hamiltoniano se violan las relaciones de indeterminación [7].

#### Referencias:

- 1- P. Bargueño, H. C. Peñate Rodríguez, I. Gonzalo, F. Sols, S. Miret-Artés. "Friction-induced enhancement in the optical activity of interacting chiral molecules" *Chemical Physics Letters* **516**, 29 (2011).
- 2- H. C. Peñate Rodríguez, P. Bargueño, S. Miret-Artés. "Geometric phase and parity-violating energy difference locking of chiral molecules" *Chemical Physics Letters* **523**, 49 (2012).
- 3- A. Dorta-Urra, H. C. Peñate-Rodríguez, P. Bargueño, G. Rojas-Lorenzo, and S. Miret-Artés. "Dissipative geometric phase and decoherence in parity-violating chiral molecules" *Journal of Chemical Physics* **136**, 174505 (2012).
- 4- H. C. Peñate-Rodríguez, A. Dorta-Urra, P. Bargueño, G. Rojas-Lorenzo, Salvador Miret-Artés. "A Langevin Canonical Approach to the Dynamics of Chiral Systems: Populations and Coherences" *Chirality* **25**, 514 (2013).
- 5- H. C. Peñate-Rodríguez, A. Dorta-Urra, P. Bargueño, G. Rojas-Lorenzo, Salvador Miret-Artés. "A Langevin Canonical Approach to the Dynamics of Chiral Systems: Thermal Averages and Heat Capacity" *Chirality* **26**, 319 (2014).
- 6- H. C. Peñate Rodríguez, R. Martínez-Casado, G. Rojas-Lorenzo, A. S. Sanz, S. Miret-Artés. "Quantum Zeno and anti-Zeno effects in surface diffusion of interacting adsorbates" *Journal of Physics: Condensed Matter* **24**, 104013 (2012).
- 7- A.S. Sanz, R. Martínez-Casado, H. C. Peñate-Rodríguez, G. Rojas-Lorenzo, S. Miret-Artés. "Dissipative Bohmian mechanics within the Caldirola-Kanai framework: A trajectory analysis of wave-packet dynamics in viscid media" *Annals of Physics* **347**, 1 (2014).
- 8- H.C. Peñate Rodríguez. "Métodos matemáticos en sistemas de dos estados". Tesis de doctorado. Facultad de Matemática. Universidad de La Habana. (julio, 2015)