

Anexo 7

INSTITUTO SUPERIOR DE TECNOLOGÍAS Y CIENCIAS APLICADAS DICTAMEN DEL CONSEJO CIENTÍFICO FACULTAD DE CIENCIAS Y TECNOLOGÍA NUCLEARES

1- Denominación del resultado: “Desarrollos matemáticos y numéricos en el estudio de la dinámica disipativa de sistemas moleculares”

2- Relación de autores del resultado y valoración de la participación del interesado en su obtención:

Autores principales:

- Helen Clara Peñate Rodríguez (Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Asistente). Elaboró parte importante de los programas correspondientes a la propagación de los paquetes de ondas en sistemas descritos con el Hamiltoniano de Caldirola Kanai. Realizó todo el análisis de estabilidad en las soluciones de la dinámica disipativa de sistemas quirales. Realizó una importante revisión bibliográfica, participó en la discusión de los resultados, en la escritura de los 7 artículos y en la escritura y defensa de su tesis de doctorado en ciencias matemáticas. Su aporte está en la formulación matemática que sostiene a los desarrollos analíticos relacionados con la dinámica disipativa de los sistemas quirales, en la implementación numérica que permitió realizar un análisis sobre considerar los efectos Zeno y anti Zeno en la difusión de adsorbatos sobre una superficie, y el desarrollo analítico y numérico que se utilizó en el estudio de la evolución de paquetes de ondas en los sistemas descritos con el Hamiltoniano de Caldirola–Kanai.
- Germán Rojas Lorenzo (Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Profesor Titular). Elaboró parte importante de los programas correspondientes a la dinámica estocástica y disipativa de los sistemas quirales. Realizó una importante revisión bibliográfica y participó en la discusión de resultados, así como en la escritura de 5 artículos. Su aporte está en las simulaciones numéricas de la dinámica estocástica de los sistemas quirales, en la implementación numérica necesaria para considerar los efectos Zeno y anti Zeno en la difusión de adsorbatos sobre una superficie, así como en la propagación de los paquetes de ondas asociados a sistemas que se describen por el Hamiltoniano de Caldirola–Kanai.

Autor para la correspondencia:

Germán Rojas Lorenzo

Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas.

Ave. Salvador Allende y Luaces, Quinta de los Molinos.

Habana 10600. A.P. 6163. Ciudad Habana, Cuba.

Tel: 78789858

E-mail: german@instec.cu

3- Entidades que obtuvieron el resultado: Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas.

4- Entidades introductoras del resultado: Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas.

5- Año que se introdujo a la práctica social: 2011.

6- Aporte científico, económico, o social: Aporte científico.

Anexo 7

El aporte fundamental del presente resultado es de tipo científico y puede quedar resumido en los siguientes aspectos:

- (a) Se ha desarrollado la estructura matemática para el estudio de la quiralidad molecular a partir de un sistema de dos estados. Se identifican de las condiciones de estabilidad en las soluciones para el sistema quiral aislado y para el sistema de dos estados disipativo.
- (b) Se realiza una dinámica cuántica de propagación de paquetes de ondas centrados en adsorbatos que se difunden sobre una superficie. Se propone una expresión para la función cuántica de dispersión intermedia, se analizan diferentes situaciones en función de la temperatura y se recoge una discusión exhaustiva sobre las manifestaciones de los efectos Zeno y anti Zeno, todo lo que constituye un significativo aporte y novedad de este trabajo.
- (c) Se presenta un análisis, utilizando las trayectorias Bohmianas, de la dinámica de paquetes de ondas en presencia de fricción, para entender como un medio cuántico viscoso hipotético actúa sobre el paquete desde un punto de vista cuántico. Con este objetivo se selecciona una serie de sistemas modelos como la partícula libre, la partícula que se mueve en un potencial lineal, la partícula que se mueve en un potencial armónico amortiguado y la superposición de dos paquetes de ondas coherentes. Estos modelos ilustran comportamientos emergentes muy interesantes como la localización por “quantum freezing” lo cual le concede al trabajo un aporte científico relevante.
- (d) Se propone una dirección de trabajo para la determinación de la diferencia de energía entre los enantiómeros de una molécula quiral midiendo la fase geométrica. Este aspecto muestra novedad y relevancia al trabajo científico.
- (e) Se realiza un estudio dinámico de un sistema quiral acoplado con un baño térmico utilizando una formulación canónica. Este constituye otro aporte relevante.

Los resultados del trabajo presentado están publicados en los artículos de varias revistas de elevado impacto como Journal of Chemical Physics, Chemical Physics Letters, Journal of Physics: Condensed Matter, Annals of Physics, y Chirality. De igual modo, los resultados de estos trabajos se han presentados en varios eventos de carácter internacional. Lo anteriormente señalado, avala el reconocimiento de la comunidad científica a los resultados obtenidos.

Las novedades científicas principales del trabajo son:

Se ha desarrollado una estructura matemática rigurosa que permite una correcta descripción de las formulaciones clásica y cuántica de estos sistemas, así como la correspondencia entre estas. A partir de ello, los trabajos que se presentan estudian las propiedades de sistemas de quirales sobre la base de considerar a los mismos como sistemas de dos estados. De la mano con la formulación matemática presentada, los cálculos numéricos muestran una buena concordancia con resultados analíticos obtenidos con otras formulaciones. Se estudió por primera vez la implicación de los efectos Zeno y anti Zeno en la difusión de adsorbatos por una superficie. Se ha asociado por primera vez un comportamiento del pico Q de la función de dispersión con la manifestación del efecto anti Zeno. Se ha realizado una dinámica cuántica de propagación de paquetes de ondas en el marco del Hamiltoniano de Caldirola–Kanai. Se ha propuesto una dirección de trabajo par la determinación de la diferencia de energía entre los enantiómeros de moléculas quirales. Se ha implementado correctamente el término estocástico en la dinámica disipativa de sistemas

Anexo 7

quirales para considerar las interacciones del mismo con el entorno. Se han observado los regímenes coherente e incoherente en la evolución de los sistemas quirales en función de la temperatura, alcanzando el sistema el equilibrio termodinámico en muy buena correspondencia con los métodos de integrales de camino.

Durante el trabajo se consolidaron los estrechos vínculos de colaboración con los grupos científicos del IFF, CSIC, Madrid, España, y la Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia.

Publicaciones relacionadas con el resultado:

- 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)

Presentación en eventos:

- 1- Workshop on Atomic and Molecular Physics, Varadero, 2012. Germán Rojas con presentación oral y Helen Peñate con un póster.
- 2- Simposio de la Sociedad Cubana de Física. La Habana, 2014. Ambos autores con un póster .
- 3- Photodynamics Conference. Oaxaca. Mexico, 2014. Germán Rojas con presentación oral.
- 4- Workshop on Atomic and Molecular Physics, Varadero, 2015. Ambos autores con presentaciones orales.

Premios obtenidos y otros resultados:

Uno de los autores, Helen Clara Peñate Rodríguez defendió exitosamente su tesis de doctorado en julio 2015.
Uno de los autores, Germán Alfredo Rojas Lorenzo, obtuvo la orden Carlos J. Finlay en enero de 2015.

7- Fecha de la presente certificación: de agosto de 2015.

Prof. Jesús Rubayo Soneira
Presidente del Consejo Científico FCTN.
(firma y cuño de la entidad)