

PROYECTO INTERNO SIN FINANCIAMIENTO PII-DFIS-2019-02

"Efectos del reservorio térmico y consideraciones diabáticas en el estudio de las susceptibilidades ópticas en colorantes orgánicos: Comparaciones derivadas con el uso del teorema de Novikov"

En la ciudad de Quito D.M., a los dos días del mes de agosto del año dos mil veinte y uno, comparecen a la celebración de la presente Acta de Finalización del Proyecto Interno Sin financiamiento **PII-DFIS-2019-02: "Efectos del reservorio térmico y consideraciones diabáticas en el estudio de las susceptibilidades ópticas en colorantes orgánicos: Comparaciones derivadas con el uso del teorema de Novikov"**, por una parte, la **Dra. Alexandra Patricia Alvarado Cevallos** en calidad de **Vicerrectora de Investigación, Innovación y Vinculación** de la Escuela Politécnica Nacional, y por otra el **Dr. César Costa Vera** en calidad de **Director del Proyecto Interno sin financiamiento PII-DFIS-2019-02**, al tenor de lo siguiente:

1. ANTECEDENTES:

- Mediante Memorando EPN-DFIS-2019-0031-M del 31 de enero de 2019, la Jefatura del Departamento de Física solicita la designación de código para ejecución del proyecto interno sin financiamiento "Efectos del reservorio térmico y consideraciones diabáticas en el estudio de las susceptibilidades ópticas en colorantes orgánicos: Comparaciones derivadas con el uso del teorema de Novikov" presentado por el Dr. César Costa.
- Mediante Memorando EPN-DIPS-2019-0082-M del 7 de febrero de 2019, la Dirección de Investigación y Proyección Social, notifica a la Jefatura del Departamento de Física la asignación de código y registro del proyecto **PII-DFIS-2019-02: "Efectos del reservorio térmico y consideraciones diabáticas en el estudio de las susceptibilidades ópticas en colorantes orgánicos: Comparaciones derivadas con el uso del teorema de Novikov"** presentado por el Dr. César Costa.
- Mediante memorando EPN-DFIS-2020-0070-M, el Dr. Leonardo Basile, Jefe del Departamento de Física remite al Vicerrectorado de Investigación, Innovación y Vinculación el aval para solicitar la prórroga del proyecto de investigación interno PII-DFIS-2019-02.
- Mediante memorando EPN-DI-2020-0118-M, la Dirección de Investigación notifica a la Jefatura del Departamento de Física la prórroga del proyecto de investigación interno PII-DFIS-2019-02 que dirige el Dr. César Costa hasta el 5 de agosto del 2020.

2. DATOS GENERALES DEL PROYECTO:

Código de Proyecto	PII-DFIS-2019-02
Nombre del Proyecto	Efectos del reservorio térmico y consideraciones diabáticas en el estudio de las susceptibilidades ópticas en colorantes orgánicos: Comparaciones derivadas con el uso del teorema de Novikov
Director del Proyecto	Dr. César Costa-Vera
Colaboradores del Proyecto	Dr. José Luis Paz Dr. Luis Lascano
Departamento	Física
Líneas de Investigación	Métodos Espectroscópicos

Recibido
César Costa Vera
1506/05-10-21
Ca



Objetivo	<i>Evaluar los efectos del solvente en susceptibilidades ópticas en un modelo simple de acoplamiento de dos estados electrónicos cuyas curvas de energía potencial son descritas como potenciales armónicos desplazados, sujeto a la interacción con campos electromagnéticos. La resolución de los elementos de matriz densidad en el dominio del tiempo bajo estas consideraciones, serán comparados con los deducidos a través del teorema de Novikov en las mismas condiciones de cruce de curvas.</i>
Duración del Proyecto	<ul style="list-style-type: none"> • Inicio: 6 de febrero de 2019 • Fecha de fin planeada: 5 de febrero de 2020 • Fecha de fin prórroga ordinaria: 5 de agosto 2020 • Fecha de fin real: 05 de agosto de 2020 • Duración total: 18 meses
Entrega del Informe Final	02 de octubre de 2020

3. INFORME FINAL:

Mediante Memorando EPN-DFIS-2020-0502-M del 02 de octubre de 2020, el Dr. César Costa, director del proyecto, envía el Informe Final del proyecto PII-DFIS-2019-02, el cual es revisado por la Dirección de Investigación y forma parte integrante de la presente Acta de Finalización, cuyas conclusiones y productos generados son:

CONCLUSIONES:

- El proyecto planteado representó un gran reto tanto por su conceptualidad como en su desarrollo algebraico. Finalmente se logró cumplir con el 100% de los tres objetivos específicos. Se pudo estudiar con detalles los perfiles ópticos de sistemas complejos en presencia de acoplamientos vibrónicos y bajo consideraciones estocásticas del reservorio térmico. En el primer año se presentaron alguna limitación, pero referida al tiempo. Al principio se pensó que el desarrollo del tercer objetivo relacionado con el uso del teorema de Novikov sería sencillo, pero su implementación resultó muy laboriosa y complicada, sobre todo en el caso de los procesos de tipo Ornstein-Uhlenbeck. Sin embargo, superada toda esta complejidad, los resultados obtenidos hasta hace muy pocos días fueron extraordinarios. Los objetivos no sólo fueron alcanzados, sino que se pudo demostrar en ciertos casos límites, la reproducibilidad de resultados ya publicados por otros autores, al evitar el acoplamiento intramolecular y sin considerar el corrimiento de la frecuencia de Bohr por el efecto de solvente. Esto último no referido al uso del teorema que es un resultado totalmente inédito. En la literatura no existen estudios usando el teorema de Novikov en problemas químicos y mucho menos en espectroscopia. Menos aún, juntando este tipo de análisis con sistemas que presentan acoplamientos intramoleculares bajo consideraciones estocásticas del reservorio térmico. Todas nuestras propuestas e hipótesis fueron corroboradas con los hallazgos logrados. Del estudio realizado, podemos ahora hacer otras generalizaciones igualmente inéditas, pero en sistemas bipolares tipo Push-Pull, que pudieran ser de amplio uso en transferencia electrónica tanto en polímeros como en sistemas conjugados de cadena lineal. Estudios de polarones en electroquímica, pudieran ser de interés.
- Finalmente, nuestros estudios demuestran que si consideramos el tiempo de relajación transversal efectivo, la dinámica del sistema queda establecida exclusivamente por las ecuaciones de Bloch ópticas convencionales, donde ya está tomado en cuenta tanto el acoplamiento vibrónico como los efectos del solvente. Esta aseveración es válida sólo en ruidos delta-correlacionados.

PRODUCTOS:

- Artículo publicado: *Nonlinear Optical properties in Four-Wave Mixing signal: Stochastic considerations of the solvent and Spectral Diffusion*; José Luis Paz, Luis Lascano y César Costa-Vera.; REVISTA POLITÉCNICA LATINDEX ; Publicado Vol.43, No. 2; Julio 2019
- Artículo publicado: *Efectos del acoplamiento intramolecular en las respuestas ópticas de sistemas de dos niveles*; José Luis Paz, Luis Lascano y César Costa-Vera.; INFOANALITICA LATINDEX ; Publicado Vol. 8, No.1 ISSN: 2602-8344; 27 de abril 2020
- Presentación: *"Respuesta ópticas no lineales de Sistemas Moleculares: Consideraciones estocásticas y adiabáticas"*; José Luis Paz; 24 de Julio 2020; Comunidad de la facultad de Química e Ingeniería Química de la Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima-Perú.
- Presentación a la comunidad politécnica: *"Efectos del acoplamiento intramolecular en el estudio de las respuestas ópticas no lineales en la señal de mezcla de cuatro ondas"*; Eleana Ruiz-Hinojosa (delegada del grupo para presentar); Jueves 28 de Noviembre de 2019; Quito.
- Proyecto de titulación: *"Efectos del acoplamiento intramolecular en el estudio de las respuestas ópticas no lineales en colorantes orgánicos en la señal de mezcla de cuatro ondas"*; José Luis Paz (Director de tesis y Colaborador del proyecto), César Costa Vera (Co-Director de la tesis y Director del Proyecto); Estudiante: Eleana Ruiz-Hinojosa.

4. LIQUIDACIÓN ECONÓMICA:

El proyecto Interno PII-DFIS-2019-02 no conto con asignación presupuestaria.

5. FINALIZACIÓN:

Con la presente Acta se declara finalizado y cerrado el Proyecto Interno sin financiamiento o autogestionado PII-DFIS-2019-02: *"Efectos del reservorio térmico y consideraciones diabáticas en el estudio de las susceptibilidades ópticas en colorantes orgánicos: Comparaciones derivadas con el uso del teorema de Novikov"*.

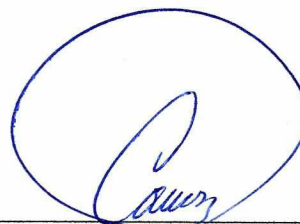
Para constancia de lo ejecutado y por estar de acuerdo con el contenido de la presente Acta, las partes libre y voluntariamente suscriben la misma, en tres ejemplares de igual contenido, tenor y valor legal.

Dado en la ciudad de Quito, D.M. a los dos días del mes de agosto del año dos mil veinte y uno.



Dra. Alexandra Alvarado
Vicerrectora de Investigación,
Innovación y Vinculación

cc/np



Dr. César Costa
Director del Proyecto
PII-DFIS-2019-02

