



## PROYECTO INTERNO PII-DFIS-03-2017

***"Efectos de acoplamiento intramoleculares y consideraciones estocásticas del baño térmico en el estudio y caracterización de sistemas moleculares a través de espectroscopía de mezcla de cuatro ondas"***

En la ciudad de Quito D.M., a los veintiún días del mes de enero del año dos mil diecinueve, comparecen a la celebración de la presente Acta de Finalización del Proyecto Interno **PII-DFIS-03-2017** ***"Efectos de acoplamiento intramoleculares y consideraciones estocásticas del baño térmico en el estudio y caracterización de sistemas moleculares a través de espectroscopía de mezcla de cuatro ondas"***, por una parte la **Dra. Alexandra Patricia Alvarado Cevallos** en calidad de **Vicerrectora de Investigación y Proyección Social** de la Escuela Politécnica Nacional, y por otra el **Dr. César Augusto Costa Vera** en calidad de **Director del Proyecto Interno**, al tenor de lo siguiente:

### 1. ANTECEDENTES:

- Mediante Memorando Nro. EPN-DFIS-2017-0339-M del 1 de septiembre del 2017, el Jefe del Departamento de Física (DFIS) solicita a la Dirección de Investigación y Proyección Social (DIPS), que se asigne código y registro al proyecto ***"Efectos de acoplamiento intramoleculares y consideraciones estocásticas del baño térmico en el estudio y caracterización de sistemas moleculares a través de espectroscopía de mezcla de cuatro ondas"*** propuesto por el Dr. César Augusto Costa Vera.
- Mediante Memorando Nro. EPN-DIPS-2017-0200-M del 15 de septiembre del 2017, el VIPS notifica al Jefe del DFIS que el proyecto de Investigación Interno del Dr. César Costa ha sido registrado con el código PII-DFIS-03-2017.

### 2. DATOS GENERALES DEL PROYECTO:

<b>Código de Proyecto</b>	<i>PII-DFIS-03-2017</i>
<b>Nombre del Proyecto</b>	<i>Efectos de acoplamiento intramoleculares y consideraciones estocásticas del baño térmico en el estudio y caracterización de sistemas moleculares a través de espectroscopía de mezcla de cuatro ondas</i>
<b>Director del Proyecto</b>	<i>Dr. César Augusto Costa Vera</i>
<b>Colaboradores del Proyecto</b>	<i>Dr. José Luis Paz Rojas Dr. Luis Rodrigo Lascano Lascano</i>



<b>Departamento</b>	<i>Física (DFIS)</i>
<b>Líneas de Investigación</b>	<i>Métodos Espectroscópicos</i>
<b>Objetivo</b>	<i>Estudiar los efectos del acoplamiento intramolecular y de la estructura de bandas en las propiedades espectroscópicas y ópticas no lineales de sistemas moleculares complejos, tomando en cuenta procesos estocásticos por la interacción con el reservorio térmico, para establecer posibles correlaciones entre la estructura molecular y las respuestas ópticas.</i>
<b>Duración del Proyecto</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Inicio: 16 de octubre del 2017</li><li>• Fin: 15 de octubre del 2018</li><li>• Duración total: 12 meses.</li></ul>
<b>Entrega del Informe Final</b>	<i>9 de enero de 2019</i>

### 3. INFORME FINAL:

Mediante Memorando Nro. EPN-DFIS-2019-0007-M entregado el 9 de enero de 2019, suscrito por el Dr. César Costa, Director del Proyecto Interno PII-DFIS-03-2017, presenta el Informe Final del proyecto; mismo que es revisado por la Dirección de Investigación y Proyección Social, y se anexa a la presente acta y forma parte integrante de la misma, cuyas conclusiones, recomendaciones y productos generados son:

### CONCLUSIONES:

Nuestros resultados corroboran la hipótesis formulada acerca de los efectos y relación entre la estructura molecular y las propiedades ópticas. Demostramos que estas últimas no sólo dependen fuertemente de los campos electromagnéticos intensos y la interacción con el sistema activo, sino de los detalles de la estructura interna (vibro-rotacional) molecular. La modelización de interacción radiación-materia en el esquema de mezcla de cuatro ondas, permitió precisar las simetrías de las propiedades ópticas absorptivas con las desintonizaciones de los campos electromagnéticos en el espacio de frecuencias. Propusimos una metodología para la determinación de los tiempos de relajación (longitudinal y transversal) a partir de la representación del coeficiente de absorción en el espacio de frecuencias previas transformaciones unitarias a formas elípticas. Estudiamos la propagación de los campos electromagnéticos conforme longitudes ópticas definidas, precisando distintos niveles de aproximación conforme la saturación del campo de bombeo. Encontramos expresiones analíticas para la intensidad del campo de señal de mezcla de cuatro ondas propagándose a lo largo del camino óptico válidas en una gran cantidad de situaciones similares a las experimentales (tanto para intensidad y frecuencias de los haces incidentes como para concentraciones químicas). Estudiamos distintos procesos multifotónicos emergentes por el tratamiento a segundo orden dado al haz de débil intensidad (prueba). Establecimos comparaciones



de nuestros tratamientos a lo largo del camino óptico, con los ya existentes de tipo cinético para una reactividad química en regímenes de equilibrio. Resolvimos de forma analítica y cerrada el problema de acoplamiento intramolecular, el cual nos permitió reformular nuestras ecuaciones ópticas en una base acoplada de estados armónicos. De esta última es posible interpretar procesos de dos fotones incorporando momentos dipolares permanentes en la aproximación diabática, sin la necesidad de estar fuera de la aproximación de onda rotante. Finalmente, estudiamos sistemas de dos y tres estados cuánticos bajo los efectos de difusión espectral, pudiendo definir elementos que rigen el comportamiento de switches ópticos o depresiones en el máximo de absorción, en regiones de resonancia para el haz de bombeo.

### RECOMENDACIONES:

La investigación fue realizada empleando ecuaciones de Bloch ópticas tanto convencionales como estocásticas como punto de partida, mismas que fueron resueltas en el espacio de frecuencias suponiendo estados estacionarios. Sin embargo, existe un conjunto de experimentos en óptica no lineal para los cuales sería importante el estudio de la dinámica temporal de la matriz densidad. Para ello, sería importante estudiar el cruce de curva en la aproximación diabática. Inducir nuevos estados resueltos a través de ecuaciones seculares y con ellos la frecuencia de Bohr. Con esta nueva frecuencia permitir su corrimiento con la presencia del solvente a una frecuencia dependiente del tiempo. Resolver el problema temporal en la base acoplada empleando expansiones de cumulantes en procesos gaussianos en mezcla de ondas tipo Rayleigh y comparar el resultado con lo derivado a través del teorema de Novikov. Este último permite primero, la promediación en el conjunto estadístico sobre todas las realizaciones de la variable aleatoria y luego resolver las ecuaciones diferenciales en el dominio del tiempo. Con este enfoque, estaríamos desarrollando una posible metodología que nos permita incorporar funciones de correlación de ruido coloreado asociados a procesos del tipo Ornstein-Uhlenbeck.

### PRODUCTOS:

1. Artículo: "Relaxation times and symmetries in the nonlinear optical properties of a two-level system"; Paz J., León J., Lascano L., Costa C.; Optics Communications (Q2); ISSN: 00304018; DOI: 10.1016/j.optcom.2017.08.018; diciembre 2017.
2. Artículo: "Three levels of propagation of the Four-wave mixing signal"; Paz J., Alvarado Y., Lascano L., Costa C.; Results in Physics (Q3); ISSN: 22113797; DOI: 10.1016/j.rinp.2018.09.041; diciembre 2018.
3. Artículo: "Effects of spectral diffusion on the nonlinear optical properties in two- and three-state quantum systems in a four-wave mixing signal"; Moncada F.;



- Paz J., Lascano L., Costa C.; Journal of Nonlinear Optical Physics and Materials (Q2); ISSN: 02188635; DOI: 10.1142/S0218863518500388; enero 2019.
4. Conferencia: "Efectos del solvente, acoplamientos vibrónicos y difusión espectral en el estudio de propiedades ópticas no lineales de sistemas moleculares complejos"; Paz J.; V Ciclo de Conferencias Científicas Divulgativas, Pontificia Universidad Católica del Ecuador; mayo 2018.
  5. Conferencia: "Efectos del solvente, acoplamientos vibrónicos y difusión espectral en el estudio de propiedades ópticas no lineales de sistemas moleculares complejos"; Paz J.; Primer Congreso Internacional de Química, Riobamba, Ecuador; agosto 2018.
  6. Conferencia: "Patrimonial, Forensic and Biosensing Applications of Homemade Multispectral Scanner"; Costa C.; Latin American Optics & Photonics Conference, Lima, Perú; noviembre 2018.
  7. Difusión a la comunidad politécnica: "Óptica No-Lineal: Consideraciones generales y desarrollos recientes"; Paz J.; Encuentro de investigación y políticas científicas, Facultad de Ciencias, EPN; abril 2018.
  8. Proyecto de Titulación de Físico: "Efectos de la difusión espectral en las propiedades ópticas no lineales de sistemas cuánticos de dos y tres estados en presencia de una señal de mezcla de cuatro ondas"; Moncada Gutiérrez Fernando Gonzalo; <https://biblioteca.epn.edu.ec/cgi-bin/koha/opac-detail.pl?biblionumber=71294>; diciembre 2018.
  9. Plan de Proyecto de Titulación aprobado: "Efectos del acoplamiento intramolecular en el estudio de las respuestas ópticas no lineales en colorantes orgánicos en la señal de mezcla de cuatro ondas"; Ruiz Hinojosa Eleana de los Ángeles.

#### 4. LIQUIDACIÓN ECONÓMICA:

El Proyecto Interno PII-DFIS-03-2017 no contó con asignación presupuestaria del Vicerrectorado de Investigación y Proyección Social (VIPS).

#### 5. FINALIZACIÓN:

Con la presente Acta se declara finalizado y cerrado el Proyecto Interno *PII-DFIS-03-2017 "Efectos de acoplamientos intramoleculares y consideraciones estocásticas del baño térmico en el estudio y caracterización de sistemas moleculares a través de espectroscopía de mezcla de cuatro ondas"*.



**ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL**  
**VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL**  
**ACTA DE FINALIZACIÓN DE PROYECTO DE INVESTIGACIÓN**



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 veintiún días del mes de enero del año dos mil diecinueve.

  
  
**Dra. Alexandra Alvarado**  
**Vicerrectora de Investigación**  
**y Proyección Social**

**ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL**  
**VICERRECTORADO DE INVESTIGACIÓN**  
**Y PROYECCIÓN SOCIAL**



**Dr. César Costa**  
**Director del Proyecto**  
**PII-DFIS-03-2017**

sp/cc

*Recibido  
23/01/2019*

