

**PROYECTO INTERNO SIN FINANCIAMIENTO PII-DFIS-2021-02**

***"Determinación de variables dinámicas de los iones de la disociación con pulsos ultracortos de adsorbatos en la superficie de nanopartículas plasmónicas mediante la modelización de sus espectros de masa de tiempo de vuelo"***

En la ciudad de Quito D.M., a los veintitrés días del mes de junio de dos mil veintidós, comparecen a la celebración de la presente Acta de Finalización del Proyecto de Investigación Interno sin Financiamiento PII-DFIS-2021-02 ***"Determinación de variables dinámicas de los iones de la disociación con pulsos ultracortos de adsorbatos en la superficie de nanopartículas plasmónicas mediante la modelización de sus espectros de masa de tiempo de vuelo"***, 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 Augusto Costa Vera** en calidad de **Director del Proyecto de Investigación Interno sin Financiamiento PII-DFIS-2021-02**, al tenor de lo siguiente:

**1. ANTECEDENTES**

- a) Mediante Memorando Nro. EPN-DFIS-2020-0547-M del 19 de octubre del 2020, la Jefatura del Departamento de Física, informa al Vicerrectorado de Investigación, Innovación y Vinculación, que se ha avalado la propuesta del Proyecto de Investigación Interno sin Financiamiento titulada ***"Determinación de variables dinámicas de los iones de la disociación con pulsos ultracortos de adsorbatos en la superficie de nanopartículas plasmónicas mediante la modelización de sus espectros de masa de tiempo de vuelo"*** presentada por el Dr. César Costa.
- b) Mediante Resolución Nro. RCIV-263-2020 de Consejo de Investigación, Innovación y Vinculación del 15 de diciembre de 2020, se aprobó la propuesta de Proyecto de Investigación Interno sin Financiamiento ***"Determinación de variables dinámicas de los iones de la disociación con pulsos ultracortos de adsorbatos en la superficie de nanopartículas plasmónicas mediante la modelización de sus espectros de masa de tiempo de vuelo"*** presentada por el Dr. César Costa.
- c) Con Memorando Nro. EPN-DI-2020-0911-M del 21 de diciembre de 2020, la Dirección de Investigación, notifica al Jefe del Departamento de Física, que el proyecto de Investigación Interno sin Financiamiento presentado por el Dr. César Costa ha sido aprobado y que se le ha asignado el código PII-DFIS-2021-02, con fecha de inicio el 4 de enero de 2021 y fecha de fin el 3 de enero de 2022.

**2. DATOS GENERALES DEL PROYECTO**

<b>Código de Proyecto</b>	PII-DFIS-2021-02
<b>Nombre del Proyecto</b>	Determinación de variables dinámicas de los iones de la disociación con pulsos ultracortos de adsorbatos en la superficie de nanopartículas plasmónicas mediante la modelización de sus espectros de masa de tiempo de vuelo
<b>Director del Proyecto</b>	CESAR AUGUSTO COSTA VERA
<b>Colaborador del Proyecto</b>	JOSE LUIS PAZ ROJAS
<b>Unidad Ejecutora</b>	Departamento de Física (DFIS)
<b>Líneas de Investigación</b>	Nanoestructuras Métodos espectroscópicos
<b>Objetivo</b>	Determinar los parámetros físicos iniciales (velocidades, posiciones, energías) subyacentes a procesos de disociación molecular generados experimentalmente por pulsos láser ultracortos y ultrarápidos (en dos longitudes de onda) a partir de adsorbatos moleculares en la superficie de diferentes tipos de nanopartículas plasmónicas a través de la simulación de los espectros de masas TOF correspondientes
<b>Duración del Proyecto</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fecha de Inicio: 4 de enero de 2021</li> <li>• Fecha de fin: 3 de enero de 2022</li> <li>• Duración total: 12 meses</li> </ul>
<b>Entrega del Informe Final</b>	8 de marzo de 2022

### 3. INFORME FINAL:

Mediante Memorando Nro. EPN-DFIS-2022-0127-M del 8 de marzo de 2022, el Dr. César Costa, Director del Proyecto PII-DFIS-2021-02, entrega el Informe Final del proyecto que dirige. El Informe Final es revisado por la Dirección de Investigación, se anexa y forma parte integrante del Acta de Finalización, cuyas conclusiones y productos generados son:

#### CONCLUSIONES:

- El proyecto se cumplió con relativa normalidad dentro del plazo previsto. Las simulaciones y los análisis comparativos pertinentes para los casos investigados resultaron ser satisfactorios y según lo esperado. Los resultados han permitido identificar la estadística adecuada para la evaluación de las condiciones iniciales de formación de los iones investigados. Este estudio abre las puertas para continuar la aplicación de la metodología a otros resultados experimentales que se tienen actualmente a disposición, lo que permitirá completar los planes a mediano plazo relativos a este subproyecto, en el marco del proyecto colaborativo internacional.
- El modelo construido para el transporte de iones en el espectrómetro de masas es robusto y preciso. El modelo hace uso de relaciones matemáticas bien conocidas que describen la trayectoria de un ion de masa  $m$  y carga  $q$  en el campo electrostático de espectrómetro de masas. Gracias a la calibración obtenida experimentalmente con tres compuestos conocidos y algunos de sus fragmentos, fue posible predecir el tiempo de vuelo de un ion cualquiera en el espectrómetro con una precisión mayor a  $10^{-4}$ .
- La identificación de las señales espectrales y su asignación es uno de los problemas más importantes en este trabajo. Esto debido a la forma extraordinariamente difusa en la que se presentan los picos respectivos. Solamente la simulación estadística adecuada permite conocer de manera correcta las masas correspondientes. Cuando se trata de definir caminos de reacción para la disociación molecular, esto es de primordial importancia. De hecho, algunas predicciones iniciales tentativas pudieron ser corregidas oportunamente gracias a la simulación. Este resultado nos permitirá en el futuro continuar con el análisis de otros espectros. Este tema está aún en proceso de validación con la revisión de las predicciones numéricas actuales.

#### PRODUCTOS:

- Artículo enviado para revisión: "*Imaging elliptically polarized infrared near-fields on nanoparticles by strong field dissociation of functional surface groups*"; Philipp Rosenberger, Ritika Dagar, Wenbin Zhang, Ana Sousa Castillo, Marcel Neuhaus, Emiliano Cortes, Stefan A. Maier, Cesar Costa-Vera, Matthias F. Kling, Boris Bergues; *European Journal of Physics* (Indexada en SCOPUS, Q3); ISSN: 01430807; marzo 2022.
- Ponencia oral: "*TOF MS Spectra simulation for ions from ultrafast and high-field induced molecular dissociation on the surface of nanoparticle*"; César Costa Vera; XVII Encuentro de Física; Escuela Politécnica Nacional, Departamento de Física; Ecuador - Quito; octubre 2021.
- Ponencia oral: "*De las nanopartículas de ultra-alto vacío a la aerofauna en los Bosques Andinos: Tecnologías láser de análisis*"; César Costa Vera; IV Congreso Internacional de Ciencias Básicas; Universidad Técnica de Manabí; Ecuador - Manta; octubre 2021.
- Póster: "*Spatial control of molecular dissociation on the surface of nanoparticles with tailored laser fields*"; R. Dagar, W. Zhang, P. Rosenberger, A. Sousa Castillo, S. A. Khan, E. Cortés, S. A. Maier, A. S. Alnaser, C. Costa Vera, M. F. Kling, B. Bergues; 2nd Annual AttoChem COST Action; modalidad virtual; octubre 2021.
- Proyecto de mayor impacto: "*Evaluation of the plasmonic properties of nanoparticles for reaction nanoscopy studies*"; César Costa, Matthias Kling; Proyecto de Cooperación Digital EPN – LMU; financiado por la Fundación Alexander von Humboldt; julio 2021.

#### 4. LIQUIDACIÓN ECONÓMICA:

El Proyecto de Investigación Interno sin Financiamiento PII-DFIS-2021-02 no contó con asignación presupuestaria.

#### 5. FINALIZACIÓN:

Con la presente Acta se declara finalizado y cerrado el Proyecto de Investigación Interno sin Financiamiento PII-DFIS-2021-02 *"Determinación de variables dinámicas de los iones de la disociación con pulsos ultracortos de adsorbatos en la superficie de nanopartículas plasmónicas mediante la modelización de sus espectros de masa de tiempo de vuelo"*.

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 veintitrés días del mes de junio de dos mil veintidós.

---

Dra. Alexandra Alvarado  
**Vicerrectora de Investigación,  
Innovación y Vinculación**

---

Dr. César Costa  
**Director del Proyecto  
PII-DFIS-2021-02**

sp/cc