



Modelo Teórico-Informacional de un sistema molecular de máximo entrelazamiento: cadenas de Markov, colapsos cuánticos y enantiómeros

Omar Hernández Montes¹, Gabriel Guzmán López¹, Moyocoyani Molina Espíritu¹, Rodolfo Esquivel Olea¹
¹Area de Química Cuántica, Departamento de Química, UAM-Iztapalapa; México
e-mail: omarxv@live.com.mx

No obstante que la teoría cuántica ha sido incorporada en las ciencias naturales desde su creación, todavía encontramos que sus metodologías adolecen de no considerar todos los efectos cuánticos que la teoría predice. Por ejemplo, en la química se utiliza ampliamente el modelo de partículas independientes y una representación preponderantemente corpuscular. Sin embargo, todavía no se han incorporado otros efectos cuánticos de suma importancia como la no localidad y el entrelazamiento cuántico. Con esto pretendemos aclarar que la química merece que se considere una descripción más completa.

Debido a lo anterior se planteó un trabajo en el que se pretende dar una interpretación más objetiva (menos prejuiciada por la visión corpuscular) del fenómeno de la homoquiralidad: hallar un Estado Entrelazado (EE) que de origen a los dos enantiómeros S y R cuya función de onda debe colapsar a cualquiera de los dos estados mediante una fluctuación. Este proceso es análogo al *gedanken* del gato de Schrödinger, en donde la función de onda de estados en superposición con el medio ambiente se representa como productos tensoriales en una cadena de Markov, de tal manera que a la función del EE se le acoplan términos que contribuyan a su colapso, en nuestro caso a los estados S o R. Aquí mostramos que esto dependerá del tamaño de la cadena de Markov.

La propuesta inicial fue obtener la estructura del EE a través de una metodología IRC y QST, ya que el EE debiera ser un estado de transición (ET) en el proceso de inter-conversión del estado S al R: estas metodologías fallaron en hallar un EE. Entonces se propuso que el EE debería tener una estructura completamente plana, que permitiera la inter-conversión S-R. El EE plano efectivamente colapsó a uno de los dos enantiómeros mediante una fluctuación (un pequeño desplazamiento de la geometría favorablemente hacía S o R). Una vez determinada la estructura de nuestro EE, se cuantificó el entrelazamiento y energía a los 3 distintos sistemas (S, R y EE), obteniéndose que el EE es más entrelazado que S y R. El esquema para cuantificar entrelazamiento está dado por la teoría de información cuántica, y debido a ello las metodologías de estructura electrónica utilizadas fueron multi-configuracionales; no se podría utilizar metodologías DFT ya que es una teoría mono-determinantal, hecho que no permite cuantificar la correlación no dinámica.