



Contribution ID: 87

Type: **Invited talk**

La Relación de Crooks aplicada a sistemas de dos osciladores armónicos acoplados simulados bajo movimiento browniano

Thursday, 16 April 2026 16:30 (20 minutes)

La Relación de Crooks [1], uno de los teoremas de fluctuación, es hoy en día un método estándar para calcular diferencias de energía libre entre dos estados de un sistema utilizando procesos fuera del equilibrio. En el presente trabajo construimos un sistema de dos osciladores armónicos de masa y resorte en un baño térmico acoplados por un tercer resorte, y simulamos mediante dinámica browniana el proceso directo por el cual separamos los osciladores hasta que el enlace entre ellos se rompe, para luego volver a juntarlos en un proceso reverso durante el cual el enlace entre ellos se restablece. En un segundo sistema, el resorte de acople vuelve a aparecer al final del proceso de estirado. Al trazar las curvas de fuerza vs. elongación y medir para muchas repeticiones los histogramas de los trabajos realizados en los procesos directo y reverso, es posible usar la Relación de Crooks para calcular la diferencia de energía libre entre los estados inicial y final. Nuestros resultados evidencian que la Relación de Crooks es capaz de predecir con exactitud del 1% la diferencia de energía libre entre los ensambles canónicos inicial y final, incluso al ejecutar el protocolo con velocidades tres órdenes de magnitud mayores que las de la evolución cuasi-estacionaria. Además, las curvas obtenidas de fuerza vs elongación se asemejan a las obtenidas en experimentos con horquillas de ARN [3]. Los sistemas propuestos no sólo ilustran el funcionamiento y significado conceptual de la Relación de Crooks, sino que también podrían usarse como punto de partida para construir modelos simplificados de moléculas biológicas.

[1] Crooks, G. E. Phys. Rev. E 60, 2721-2726 (1999).

[2] Julián David Jiménez Paz, “La relación de Crooks: trabajo y energía libre en osciladores acoplados fuera del equilibrio”, Trabajo de Grado, Físico. Director Prof. José Daniel Muñoz, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá (2024).

[3] D. Collin et. al, Bustamante, C. et al. Nature 437, 231-234 (2005).

Primary authors: Prof. MUÑOZ CASTAÑO, Jose Daniel (Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá); Mr JIMÉNEZ PAZ, Julián David (Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia; Dir. actual: Physics Department, Cornell University)

Presenter: Prof. MUÑOZ CASTAÑO, Jose Daniel (Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá)

Session Classification: Invited Talks

Track Classification: Statistical Physics