

## Fuerzas inducidas por corriente en rotores moleculares Brownianos

- Federico D. Ribetto,<sup>1,2</sup> Sebastián E. Deghi,<sup>2</sup> Hernán L. Calvo,<sup>2</sup> Raúl A. Bustos-Marún<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física - Universidad Nacional de Río Cuarto

<sup>2</sup>Instituto de Física Enrique Gaviola (CONICET-UNC)

<sup>3</sup>Facultad de Ciencias Químicas - Universidad Nacional de Córdoba

En la actualidad el avance de la nanotecnología ha impulsado el desarrollo de dispositivos nanométricos que pueden consistir de moléculas individuales y funcionar, por ejemplo, como un motor eléctrico. Estos motores moleculares consisten en moléculas asimétricas adsorbidas a un sustrato, las cuales requieren de un acople con una fuente externa de energía para poder girar sobre un dado eje. Esta energía puede ser provista por el paso de un flujo de electrones proveniente de la punta de un microscopio STM, dispositivo que puede ser utilizado en simultáneo para observar las rotaciones [1,2].

El principio de funcionamiento de este tipo de sistema es el mismo que el de los denominados motores Brownianos [3], y se basa en una combinación de potenciales asimétricos y eventos aleatorios de tunelamiento inelástico de electrones. Sin embargo, dado que hay corrientes eléctricas involucradas en el proceso y teniendo en cuenta que estas pueden inducir fuerzas no-conservativas en sistemas nanométricos [4,5,6], resulta interesante entonces preguntarse sobre el rol de las llamadas fuerzas inducidas por corriente (FICs) en estos rotores moleculares.

En este trabajo adoptamos un enfoque de ecuación de Langevin y tomamos la base teórica de los motores Brownianos para desarrollar un modelo simple capaz de reproducir resultados de un trabajo experimental sobre rotores moleculares [1]. Estos incluyen tanto la direccionalidad del rotor como los histogramas que describen la distribución angular de sus rotaciones. Para estimar el rol de las FICs se estudió un modelo Hamiltoniano mínimo cuyos parámetros fueron ajustados para reproducir la variación de las corrientes (medidas experimentalmente) en función de la posición del rotor. Nuestros resultados indican que si bien la contribución no conservativa de las FICs es pequeña, estas producen una distorsión importante tanto en la direccionalidad como en la distribución de rotaciones. De acuerdo a esto, la inclusión de FICs en el modelado de rotores moleculares impulsados por corrientes resultaría fundamental para una completa descripción del fenómeno.

### Referencias:

- [1] H. Tierney, C. Murphy, A. Jewell. *et al.*, *Experimental demonstration of a single-molecule electric motor*, Nature Nanotech. **6**, 625–629 (2011).
- [2] C. Murphy & C. Sykes, *Development of an electrically driven molecular motor*, Chem. Rec. **14**, 834 (2014).
- [3] P. Hänggi & F. Marchesoni, *Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale*, Rev. Mod. Phys. **81**, 387- (2009).
- [4] F. D. Ribetto, R. A. Bustos-Marún & H. L. Calvo, *Role of coherence in quantum-dot-based nanomachines within the Coulomb blockade regime*, Phys. Rev. B. **103**, 155435 (2021).
- [5] S. E. Deghi, L. J. Fernández-Alcázar, H. M. Pastawski & R. A. Bustos-Marún, *Current-induced forces in single-resonance systems*, J. Phys.: Condens. Matter **33**, 175303 (2021).
- [6] R. A. Bustos-Marún, G. Refael & F. von Oppen, *Adiabatic Quantum Motors*, Phys. Rev. Lett. **111**, 6 (2013).