UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2026/2027

GRADO: Grado en Física

CÓDIGO DEL TFG: 267-114-2026/2027

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Macromoléculas Rydberg

Descripción general (resumen y metodología):

Las moléculas Rydberg de largo alcance se pueden formar cuando un átomo Rydberg interacciona con otro átomo en su estado fundamental o con una molécula diatómica hetereonuclear. Los mecanismos de enlace de estas dos macromoléculas son intrínsicamente diferentes. En las primeras, el enlace se debe a la colisión a bajas energías del electrón Rydberg, débilmente ligado, y el átomo en el estado fundamental, y esta interacción se describe por los pseudo-potenciales de Fermi. En el segundo tipo de macromoléculas, se trata de un acoplamiento anisotrópico entre el momento dipolar eléctrico de la molécula polar y el campo eléctrico creado por el electrón Rydberg y al core atómico. En este caso, la molécula diatómica se describe usando la aproximación del rotor rígido, que se justifica debido al gran tamaño del átomo Rydberg y las escalas de energías involucradas. Ambas macromoléculas tienen aplicaciones en espectroscopia de gran resolución, y en tecnologías cuánticas. Es interesante comparar estos dos tipos de moléculas Rydberg, entender como sus mecanismos de enlace dan lugar a propiedades físicas distintas. Para dicho estudio, se resolverá las ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo de cada macromolécula, dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer, y utilizados métodos ab-initio.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

Estudiar las propiedades de los átomos Rydberg.

Entender las interacciones que describen las interacciones que dan lugar a estas moléculas Rydberg.

Derivar el Hamiltoniano que caracteriza una molécula Rydberg formada con un átomo Rydberg interaccionando con un átomo en el estado fundamental y una molécula polar.

Analizar la estructura electrónica de estas dos macromoléculas, y comparación entre ellas.

Análisis y discusión de los resultados

Bibliografía básica:

B.H. Bransden and C.J. Joachain, The physics of atoms and molecules, (Longman, 1993).
T. Gallagher, Rydberg Atoms (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
C. H. Greene, A. S. Dickinson, and H. R. Sadeghpour, Creation of Polar and Nonpolar Ultra-Long-Range Rydberg Molecules, Phys. Rev. Lett. 85, 2458 (2000).

E. Fermi, Sopra lo Spostamento per Pressione delle Righe Elevate delle Serie Spettrali, Nuovo Cimento 11, 157 (1934).
E. L. Hamilton, C. H Greene and H. R. Sadeghpour, Shape-Resonance-Induced Long-Range Molecular Rydberg States, J. Phys. B 35, L199 (2002).
A. Omont, On the Theory of Collisions of Atoms in Rydberg States with Neutral Particles, J. Phys. 38, 1343 (1977).
R. González-Férez, H.R. Sadeghpour, and P. Schmelcher, Rotational hybridization, and control of alignment and orientation in triatomic ultralong-range Rydberg molecules, New Journal of Physics 17, 013021 (2015).
R. González-Férez, S.T. Rittenhouse, P. Schmelcher and H.R. Sadeghpour, A protocol to realize triatomic ultralong range Rydberg molecules in an ultracold KRb gas, Journal of Physics B 53, 074002 (2020).
H. W. Kroto, Molecular Rotation Spectra (Dover, New York, 1992).
R. N. Zare, Angular Momentum: Understanding Spatial Aspects in Chemistry and Physics (Wiley, New York, 1988).

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: MARÍA ROSARIO GONZÁLEZ FÉREZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR

Correo electrónico: rogonzal@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: LUCIA UREBA GONZALEZ

Correo electrónico: luciaureba14@correo.ugr.es