



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Moléculas en campos eléctricos estáticos y dependientes del tiempo.

Descripción general (resumen y metodología):

La dinámica rotacional de moléculas puede ser controlada y manipulada usando campos electromagnéticos externos, bien sean campos eléctricos estáticos o campos láseres no-resonantes. Estos campos dan lugar a la hibridación del momento rotacional angular junto con los fenómenos de alineación y orientación, que consisten en fijar el eje intermolecular en el sistema de referencia del laboratorio y añadir una dirección determinada de su momento dipolar eléctrico. Esta manipulación de la dinámica rotacional permite llevar a cabo medidas experimentales de gran precisión y el control de reacciones químicas en el régimen ultrafrío. Para el campo láser se pueden usar pulsos láseres de diferente anchura temporal, que inducen dinámicas rotacionales que son adiabáticas o no según se comparen con el periodo rotacional de la molécula. El objetivo de este trabajo fin de grado es investigar la interacción de una molécula polar con un campo eléctrico estático, y con un campo eléctrico de un pulso láser. Analizar las diferencias entre ambos sistemas, y explorar los regímenes de dinámica rotacional según la duración del pulso láser.

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

Objetivos planteados:

- Derivar, estudiar y entender el Hamiltoniano cuántico dentro de la aproximación del rotor rígido.
- Obtención de los Hamiltonianos de interacción para un campo eléctrico estático, y para un campo láser no resonante.
- Estudiar las simetrías del Hamiltoniano total.
- Análisis el espectro de energías en el régimen campos débiles utilizando teoría de perturbaciones.
- Resolución numérica de las ecuaciones de Schrödinger dependientes e independientes del tiempo.
- Estudiar el espectro de energías y la dinámica rotacional para diferentes configuraciones de los campos externos.
- Analizar e interpretar los resultados.

Bibliografía básica:

B.H. Bransden and C.J. Joachain, The physics of atoms and molecules, (Longman, 1993).
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).
H. Stapelfeldt, and T Seideman, Rev. Mod. Phys. 75, 543 (2003)

J. J. Omiste and R. González-Férez, Phys. Rev. A 86, 043437 (2012)
B. Friedrich, and Herschbach, Nature 353, 412–414 (1991)
K. von Meyenn, Z. Phys. 231, 154 1970

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: Alba Robles de la Torre

Correo electrónico: albarodela@correo.ugr.es