



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: María Rosario González Férez

Departamento y Área de Conocimiento: Física Atómica Molecular y Nuclear

Cotutor/a:

Departamento y Área de Conocimiento:

Título del Trabajo: *Dinámica rotacional de dos moléculas polares diatómicas: interacción dipolar y transferencia de energía.*

Tipología del Trabajo: *Estudio de casos teórico-prácticos*

(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/15)

Breve descripción del trabajo:

En este trabajo fin de grado se considerará un sistema formado por dos moléculas diatómicas heteronucleares en presencia de un campo eléctrico estático. Se trata de investigar la dinámica rotacional de este sistema considerando distintos regímenes según domine bien la interacción con el campo eléctrico o bien la interacción dipolar entre los dos moléculas, o cuando ambas interacciones sean comparables. Además se considerarán diferentes condiciones iniciales para las dos moléculas, tales como una en el estado fundamental y la otra en un estado excitado, y se analizará la transferencia de energía entre ellas, y el impacto que un campo eléctrico externo puede tener en este proceso.

Objetivos planteados:

Los objetivos de este trabajo fin de grado son:

- Comprender el impacto de un campo eléctrico estático en la dinámica rotacional de una molécula diatómica heteronuclear.*
- Analizar de la interacción dipolar entre dos moléculas diatómicas heteronucleares.*
- Estudiar del impacto de un campo eléctrico en la interacción dipolar de dos moléculas diatómicas heteronucleares.*
- Investigar la transferencia de energía entre las moléculas diatómicas heteronucleares.*

Metodología:

La dinámica de las dos moléculas se describirá dentro de las aproximaciones de Born-Oppenheimer y del rotor rígido, suponiendo por tanto que los acoplamientos entre los grados de libertad electrónico y vibracional, como entre los grados de libertad rotacional y vibracional son despreciables. Dentro de la aproximación del rotor rígido, se resolverán numéricamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de estas dos moléculas en presencia de campos externos para analizar el espectro, y la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para investigar la dinámica. Para ello se utilizarán métodos computacionales híbridos que combinarán el desarrollo en serie en la base de los armónicos esféricos para las coordenadas angulares, y el método de Lanczos para la propagación temporal.

Bibliografía:

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).

Juan J. Omiste and Rosario González-Férez, Nonadiabatic effects in long-pulse mixed-field orientation of a linear polar molecule, Phys. Rev. A 86, 043437 (2012)



Universidad de Granada



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

A. Micheli, G. Pupillo, H. P. Büchler, and P. Zoller, *Cold polar molecules in two-dimensional traps: Tailoring interactions with external fields for novel quantum phases*, Phys. Rev. A **76**, 043604 (2007)

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG
Alumno/a propuesto/a: Miguel Ángel Martínez García, DNI: 77139971H

Granada, 20 de Mayo 2016