



## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

**Tutor/a:** M. Rosario González Férrez

**Departamento y Área de Conocimiento:** Física Atómica, Molecular y Nuclear

**Cotutor/a:**

**Departamento y Área de Conocimiento:**

**Título del Trabajo:** Moléculas en campos externos: dinámica cuántica y clásica.

**Tipología del Trabajo:**

(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)

( Marcar con X)

1. Revisión bibliográfica	X	4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio	
2. Estudio de casos teórico-prácticos	X	5. Elaboración de un proyecto	
3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas	

**Breve descripción del trabajo:**

En este trabajo fin de grado se investigarán la interacción de un campo eléctrico con una molécula polar descrita como un rotor rígido. Se trata de considerar tanto las descripciones cuántica como una clásica de la molécula en el campo externo. Se resolverán numéricamente las dos ecuaciones de movimiento clásicas y la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. El alumno aprenderá técnicas computacionales para resolver las ecuaciones de Schrödinger dependiente e independiente del tiempo, y las ecuaciones del movimiento clásicas. El objetivo es explorar las diferencias que caracterizan las dos descripciones considerando la acción de un campo eléctrico que podrá o no depender del tiempo.

**Objetivos planteados:**

- Derivar, estudiar y entender las ecuaciones del movimiento clásicas
- Derivar, estudiar y entender el Hamiltoniano cuántico y la ecuación de Schrödinger
- Resolver la ecuación de Schrödinger de este sistema.
- Estudiar el espectro de energías y la dinámica para diferentes configuraciones del campo eléctrico.
- Resolver las ecuaciones clásicas del movimiento de este sistema.
- Estudiar la dinámica clásica de la molécula considerando diferentes configuraciones del campo eléctrico.
- Comparación de la dinámica clásica y la dinámica cuántica.
- Análisis de las diferencias.

**Metodología:**

La dinámica de las 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 dependiente e independiente del tiempo de la moléculas en presencia de un campo externo para analizar el espectro y la dinámica. Las ecuaciones del movimiento clásicas se plantearán para un rotor rígido en campos externos, y se resolverán numéricamente. 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, y el método numéricos de resolución de ecuaciones diferenciales.

**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).



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA



Facultad de Ciencias  
Sección de Físicas

J, J. Omiste and R. González-Férez, *Nonadiabatic*, Phys. Rev. A **86**, 043437 (2012)  
J. P. Salas, Eur. Phys. J. D **41** (2007) 95.  
M. Iñarrea, J. P. Salas, R. González-Férez and P. Schmelcher, Physics Letters A **374** (2010) 457  
R. Cushman, L. Bates, *Global aspects of classical integrable systems* (Birkhauser Verlag, Besel, Switzerland, 1997)

***A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG***

*Alumno/a propuesto/a:*

Granada, 11 de Mayo 2018

Sello del Departamento