



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: María Rosario González Férrez

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

Cotutor/a:

Departamento y Área de Conocimiento:

Título del Trabajo: Dinámica rotacional de una molécula en un tren de pulsos láseres ultracortos.

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		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:

Experimentalmente se utilizan pulsos láseres no-resonantes para controlar y manipular la dinámica rotacional de moléculas. Esto permite fijar su eje intermolecular en el sistema de referencia del laboratorio, fenómeno que se conoce como alineación, y realizar medidas experimentales con una gran precisión. Los pulsos láseres con duraciones de femto-segundos suelen ser mucho más cortos que el periodo rotacional molecular, e inducen una dinámica no adiabática. Así, tras su aplicación la molécula se alinea de forma significativa cada periodo o medio periodo rotacional incluso en ausencia del campo láser. Un tren de pulsos permite repetir periódicamente esta alineación, facilitando llevar a cabo medidas experimentales. El objetivo de este trabajo fin de grado es investigar la interacción de un tren de pulsos láseres ultracortos con una molécula polar descrita como un rotor rígido.

Objetivos planteados:

- Derivar, estudiar y entender el Hamiltoniano cuántico dentro de la aproximación del rotor rígido.
- Estudiar las simetrías del sistema.
- Estudiar el espectro de energías y la dinámica para diferentes configuraciones del tren de pulsos.
- Analizar e interpretar los resultados.

Metodología:

Para describir la molécula se usarán las aproximaciones de Born-Oppenheimer y del rotor rígido, suponiendo que los acoplamientos entre los grados de libertad electrónico y vibracional y entre los grados de libertad rotacional y vibracional son despreciables. Además, se promediará temporalmente en la frecuencia de los pulsos láseres, de esta forma la interacción del campo láser con el momento dipolar permanente de la molécula se anula quedando solamente la interacción con la polarizabilidad. Las ecuaciones de Schrödinger dependientes e independientes del tiempo se resolverán numéricamente. Para ello se utilizarán métodos computacionales híbridos que combinarán el desarrollo en serie en la base formada por 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).^[1]

J. J. Omiste and R. González-Férrez, *Phys. Rev. A* **86**, 043437 (2012).



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG
Alumno/a propuesto/a:

Granada, 28 de Junio 2020