



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: María Rosario González Férrez

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

Correo electrónico: rogonzal@ugr.es

Cotutor/a:

Departamento y Área de Conocimiento:

Correo electrónico:

Título del Trabajo: Moléculas Rydberg formadas por átomos Rydberg y moléculas quirales.

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:

Las moléculas Rydberg de largo alcance se forman a partir de un átomo Rydberg y una molécula en el estado fundamental. La interacción entre ambos sistemas se produce por el acoplamiento entre el momento dipolar eléctrico de la molécula y el campo eléctrico debido al electrón Rydberg y al *core* atómico. Debido al gran tamaño del átomo Rydberg y a las escalas de energías involucradas, la molécula en el estado fundamental se describe usando la aproximación del rotor rígido. Una molécula quiral posee dos enantiómeros caracterizados por las mismas constantes rotacionales, y por componentes del momento dipolar eléctrico de igual magnitud, pero cuyo producto difiere en signo. El objetivo de este trabajo fin de grado es explorar las moléculas Rydberg formadas a partir de uno de los dos enantiómeros de una molécula quiral, e investigar si la macromolécula posee propiedades quirales.

Objetivos planteados:

- Entender las interacciones que describen estos sistemas dentro de la aproximación Born-Oppenheimer.
- Derivar el Hamiltoniano que caracteriza una molécula Rydberg formada a partir de un átomo Rydberg y una molécula quiral.
- Analizar la estructura electrónica de estas macromoléculas.
- Explorar el efecto de la quiralidad en las propiedades estructurales de las moléculas Rydberg.

Metodología:

- Estudiar los conceptos y propiedades de átomos Rydberg, y de moléculas asimétricas.
- Resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer.
- Analizar los potenciales adiabáticos de estas moléculas Rydberg y sus propiedades.

Bibliografía:

B.H. Bransden and C.J. Joachain, *The physics of atoms and molecules*, (Longman, Londres, 1993).
 T. Gallagher, *Rydberg Atoms* (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).
 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 K Rb gas*, *Journal of Physics B* **53**, 074002 (2020).



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

D. Patterson, M. Schnell and J.M. Doyle, *Enantiomer-specific detection of chiral molecules via microwave spectroscopy*, *Nature* **497**, 475 (2013).

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).

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

Alumno/a propuesto/a: Lucía Verdegay Fernández

Granada, 20 de Mayo 2022

Sello del Departamento