



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: Dinámica rotacional de moléculas en presencia de campos eléctricos y magnéticos.

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:

La dinámica de moléculas se controla y manipula experimentalmente por medio de campos electromagnéticos, que acoplan diferentes grados de libertad. En las moléculas polares de capa abierta, los momentos magnéticos asociados al espín electrónico y nuclear interaccionan con un campo magnético por medio del efecto Zeeman. Este tipo de moléculas son sistemas ideales para analizar la interacción entre el acoplamiento espín-órbita y la estructura rotacional en presencia de campos electromagnéticos, y experimentalmente se pueden utilizar intensidades de los campos de forma que los efectos Stark y Zeeman sean del mismo orden de magnitud. El objetivo de este trabajo fin de grado es investigar la interacción de una molécula polar con espín electrónico no nulo con una combinación de campos eléctrico y magnético.

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 de los campos.
- 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. La ecuación de se resolverá numéricamente, usando 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, si fuese necesario.

Bibliografía:

B.H. Bransden and C.J. Joachain, *The physics of atoms and molecules*, (Longman, Londres, 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).

M. Gärttner, J. J. Omiste, P. Schmelcher and R. González-Férez, *Fine Structure of Open Shell Diatomic Molecules in Combined Electric and Magnetic Fields*, *Molecular Physics* **111**, 1865-1878 (2013).

J. Brown and A. Carrington, *Rotational Spectroscopy of Diatomic Molecules*, (Cambridge University Press,



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

Cambridge 2003).

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

Alumno/a propuesto/a:

Granada, 20 de Mayo 2022

Sello del Departamento