UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2024/2025

GRADO: Grado en Física

CÓDIGO DEL TFG: 267-042-2024/2025

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Dinámica rotacional de una molécula en un pulso láser

Descripción general (resumen y metodología):

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. Si la duración de los pulsos láseres ser mucho más cortos que el periodo rotacional molecular, su aplicación induce 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. El objetivo de este trabajo fin de grado es investigar la interacción de diferentes pulsos láseres con una molécula polar descrita como un rotor rígido.

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.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

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

Bibliografía básica:

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).

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

J. J. Omiste, R González-Férez, Physical Review A 94, 063408 (2016).

J. H. Mun, H. Sakai, R. González-Férez, Physical Review A 99, 053424 (2019).

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: MARÍA ROSARIO GONZÁLEZ FÉREZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR

Correo electrónico: rogonzal@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: MARIO MARTINEZ SAEZ

Correo electrónico: mariomtnz@correo.ugr.es