



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Moléculas Rydberg: interacción y estructura

Descripción general (resumen y metodología):

Las moléculas Rydberg de largo alcance se forman a partir de un átomo Rydberg y un átomo en el estado fundamental. La interacción entre ambos sistemas se produce por la colisión a baja energía del electrón Rydberg con el átomo en el estado fundamental. Esta interacción se puede describir en términos del pseudo-potencial de Fermi, que viene dado un desarrollo en ondas parciales. Este tipo de moléculas Rydberg heredan las características de los átomos Rydberg, y sus pozos de potencial aparecen para distancias nucleares proporcionales a n^2 siendo n el número cuántico principal del átomo Rydberg. El objetivo de este trabajo fin de grado es entender la interacción que da lugar a este tipo de moléculas Rydberg, y e investigar la importancia de ondas parciales más altas en su estructura electrónica, así como explorar y caracterizar sus propiedades más importantes de estos sistemas.

Metodología:

- Estudiar los conceptos y propiedades de átomos Rydberg.
- Derivar analíticamente el pseudo-potencial de Fermi
- 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.

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

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 un átomo en el estado fundamental.
- Explorar el efecto de los diferentes términos del pseudopotencial de Fermi en la estructura electrónica.
- Analizar la estructura electrónica de estas macromoléculas, y sus propiedades más importantes.

Bibliografía básica:

- 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).
A. Omont. On the theory of collisions of atoms in Rydberg states with neutral particles. *Journal de Physique*, 1977, 38 (11), pp.1343-1359.
C. H. Greene, A. S. Dickinson, and H. R. Sadeghpour, Creation of Polar and Nonpolar Ultra-Long-Range Rydberg Molecules, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2458 (2000)
V. Bendkowsky et al, Observation of ultralong-range Rydberg molecules, *Nature* **458**, 1005 (2009).
R. N. Zare, *Angular Momentum: Understanding Spatial Aspects in Chemistry and Physics* (Wiley, New York, 1988).

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:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: JAVIER CANTO SANCHEZ

Correo electrónico: javiercanto@correo.ugr.es