



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Estados super-rotadores de una molécula en un centrifugador óptico

Descripción general (resumen y metodología):

Un centrifugador óptico es un pulso láser cuya polarización lineal rota de forma acelerada. En presencia de un centrifugador óptico, el espectro de una molécula se caracteriza por una gran hibridación del movimiento rotacional, y por la creación de estados super-rotadores que poseen un momento angular rotacional muy alto. Además, este tipo de pulsos láseres inducen una dinámica rotacional altamente no-adiabática, cuyas características dependen de la polarizabilidad y constante rotacional de la molécula. El objetivo de este trabajo fin de grado es investigar la interacción de centrifugador óptico con una molécula descrita como un rotor rígido.

La molécula será descrita dentro de 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. 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 en presencia del pulso laser de un centrifugador óptico.
- Estudiar las simetrías del sistema.
- Estudiar el espectro de energías y la dinámica rotacional en presencia del centrifugador óptico.
- Analizar e interpretar los resultados para varias aceleraciones de la polarización del láser.

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. Karczmarek, J. Wright, P. Corkum, and M. Ivanov, Phys. Rev. Lett. 82, 3420 (1999).

A. Korobenko, A. A. Milner, and V. Milner, Phys. Rev. Lett. 112, 113004 (2014).

A. Korobenko, A. A. Milner, J. W. Hepburn, and V. Milner, Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 4071 (2014).

A. A. Milner, A. Korobenko, J. W. Hepburn, and V. Milner, The Journal of Chemical Physics 147, 124202 (2017).

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:

Correo electrónico: