

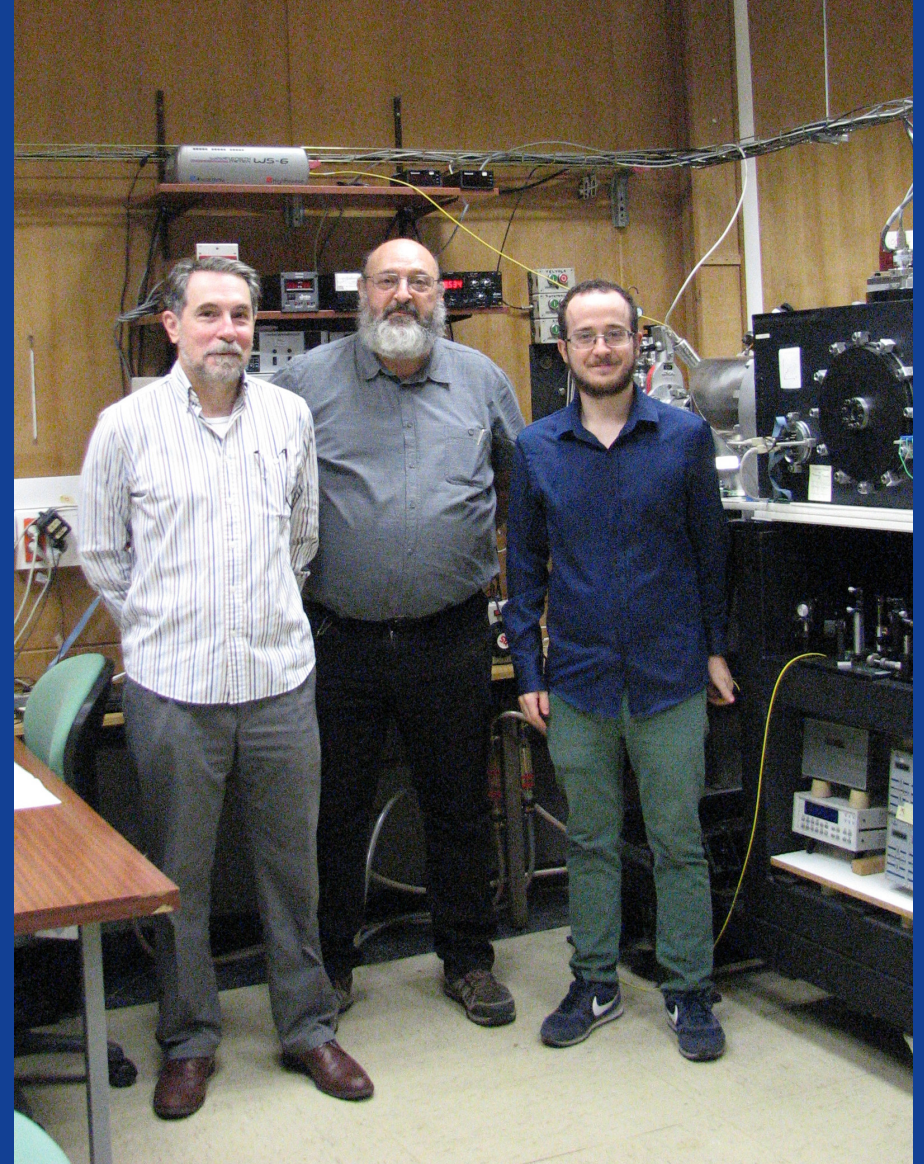
Espectroscopía de microchorros: gases y líquidos fuera del equilibrio

XIX Curso de Introducción a la Investigación
en Estructura de la Materia

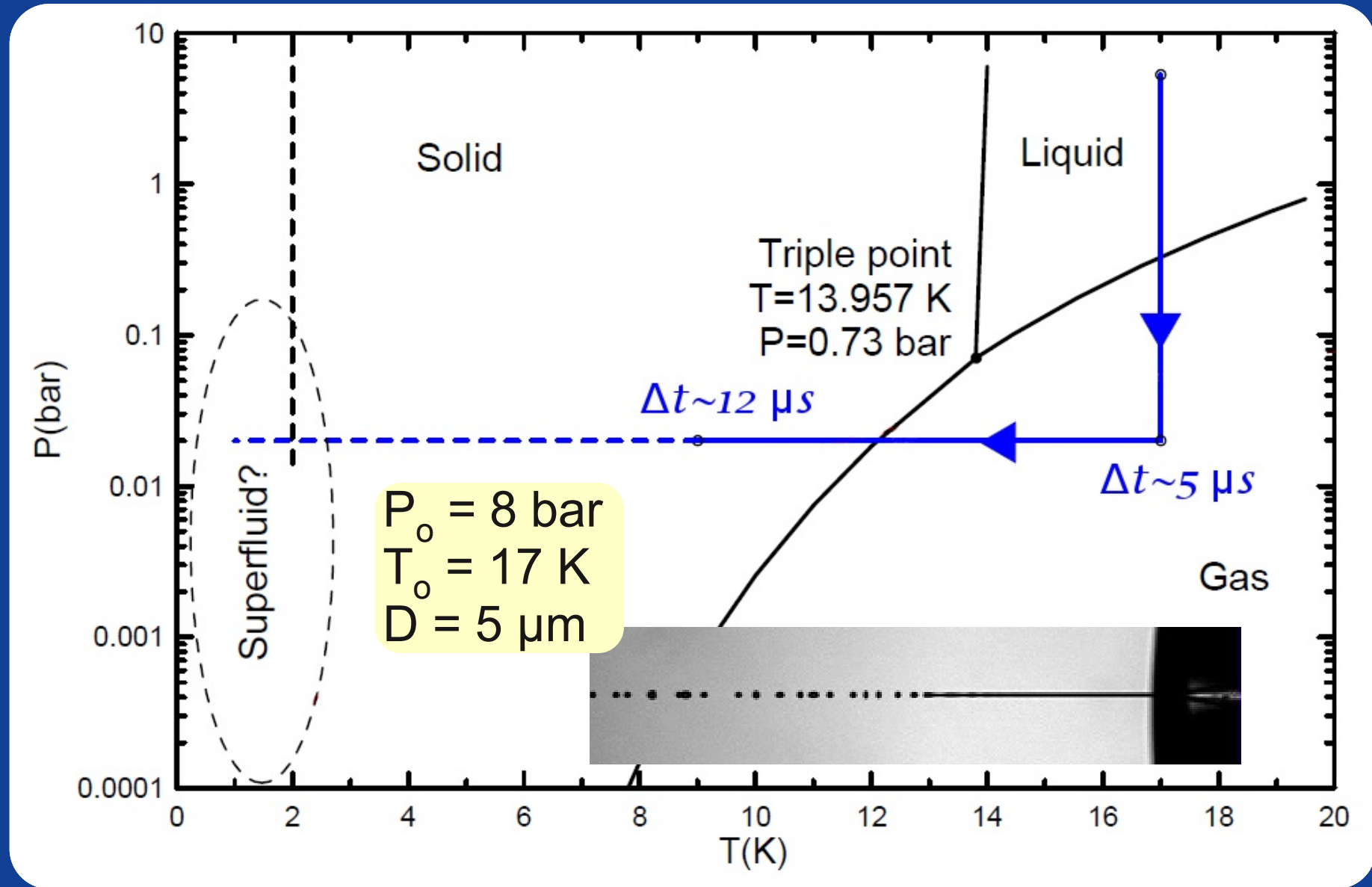
Guzmán Tejeda
Laboratorio de Fluidodinámica Molecular
Instituto de Estructura de la Materia (CSIC)

- José María Fernández
- Guzmán Tejeda
- Carlos Álvarez

Estudio cuantitativo de los flujos de fluidos fuera del equilibrio en la interfase entre la descripción microscópica (molecular y cuántica) y la macroscópica (mecánica de fluidos en el régimen del continuo)

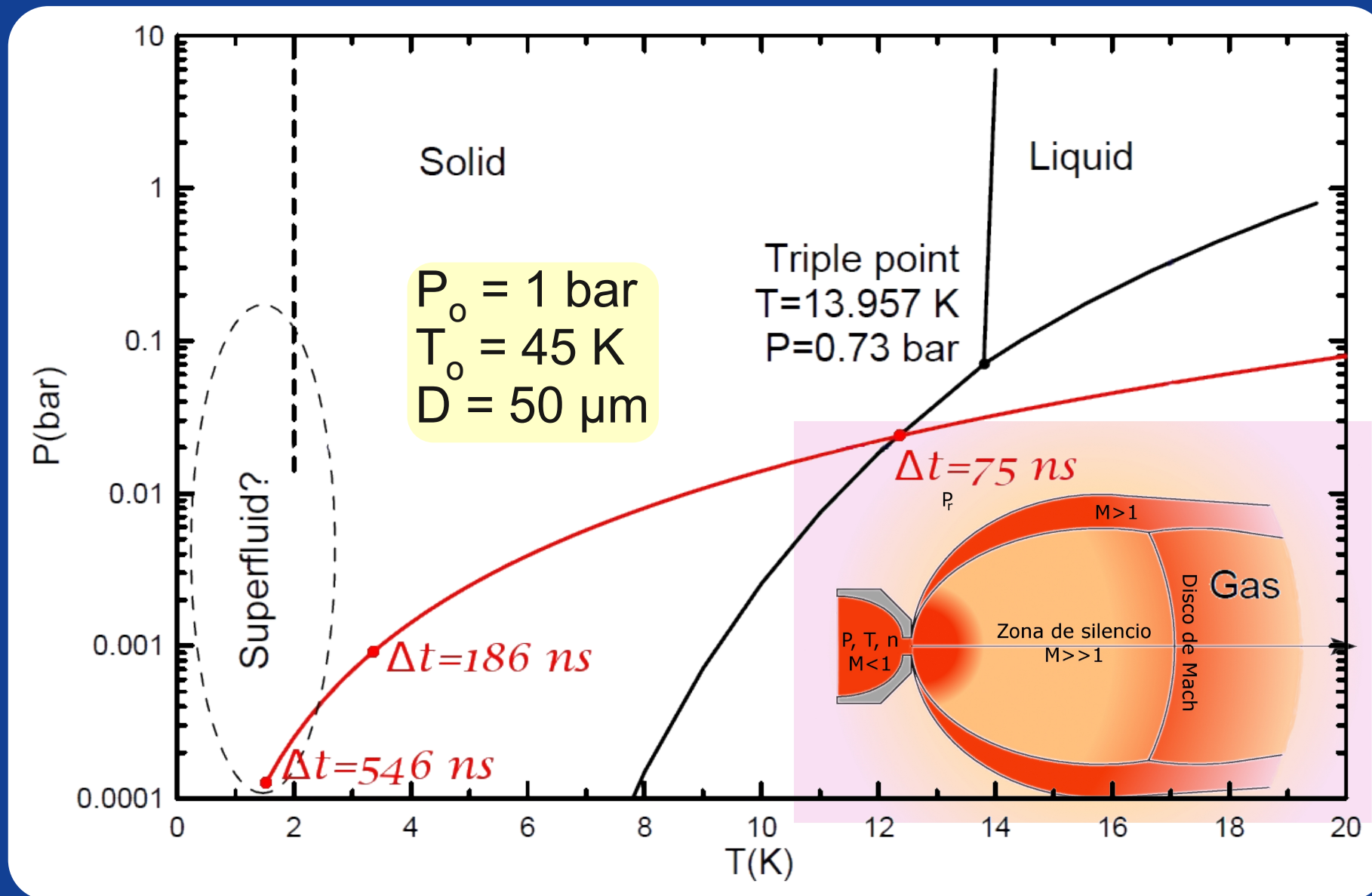


Trayectoria T-P: Microjet de $p\text{H}_2$ líquido



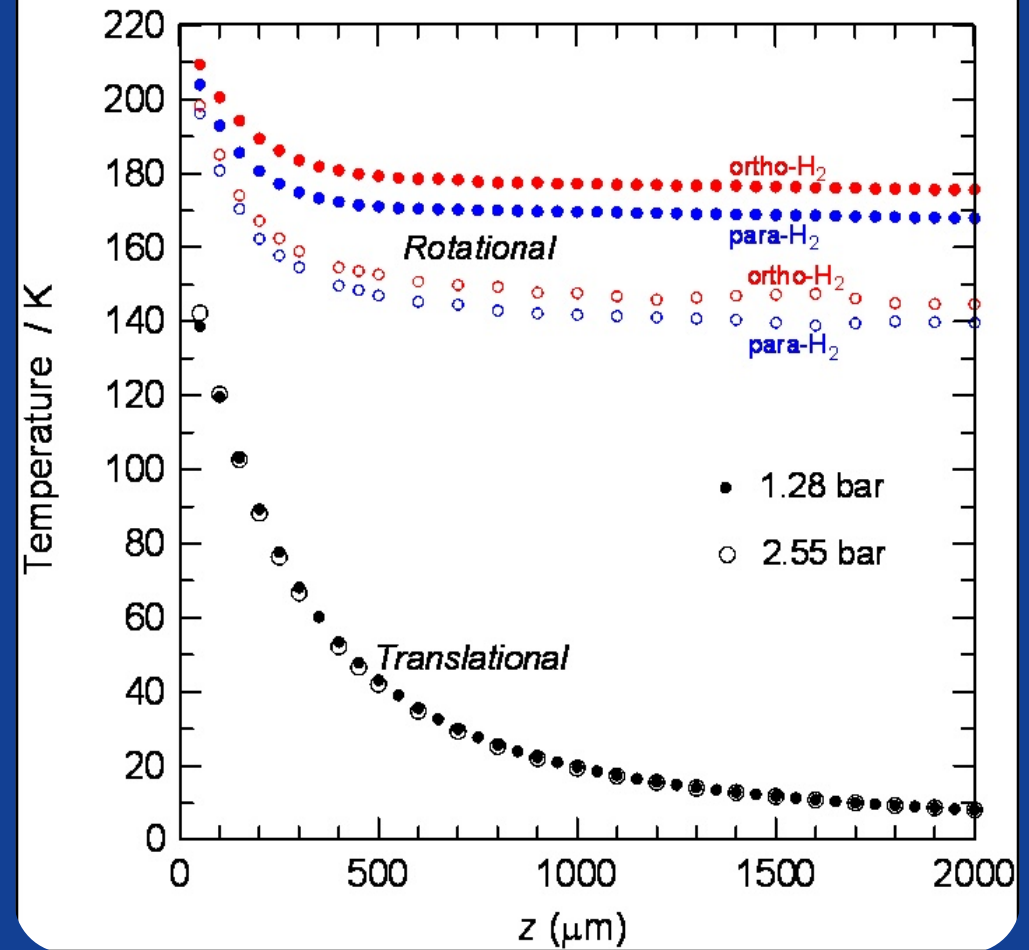
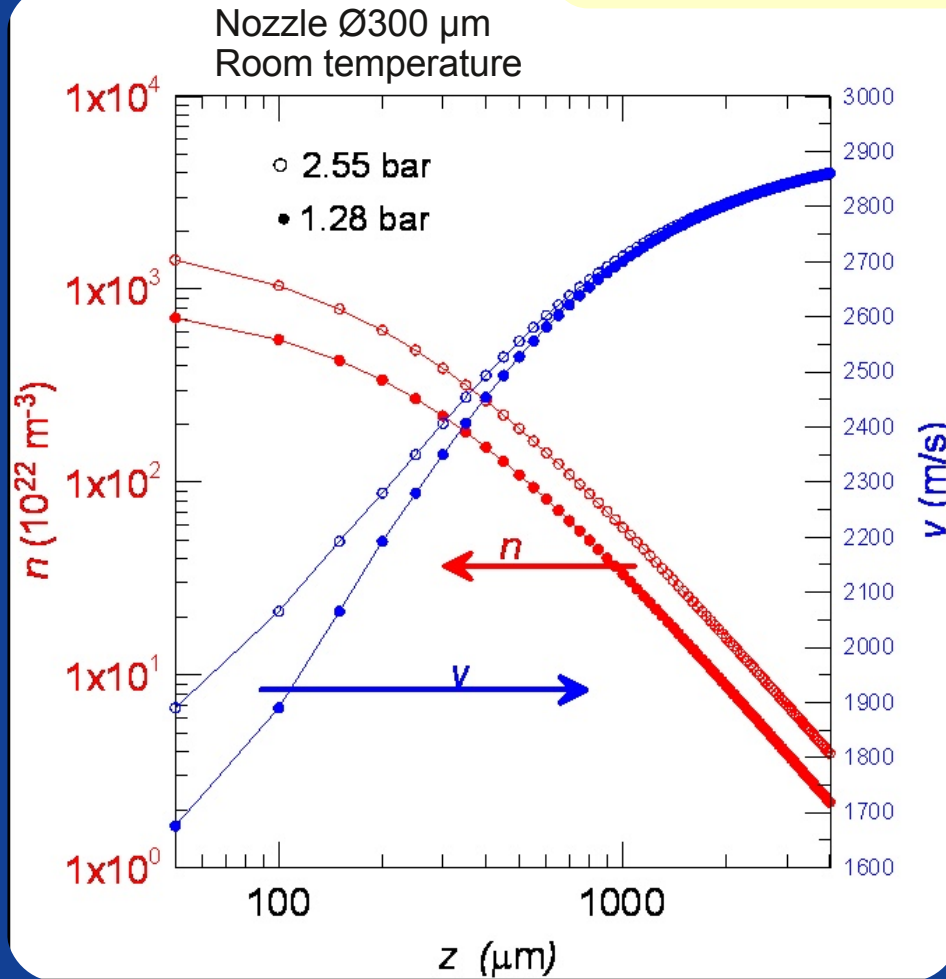
M. Kühnel, J.M. Fernández, G. Tejada, A. Kalinin, A. S. Montero & R.E. Grisenti.
Phys. Rev. Lett., **106**(24), 245301 (2011)

Trayectoria T-P: Microjet de $p\text{H}_2$ gas



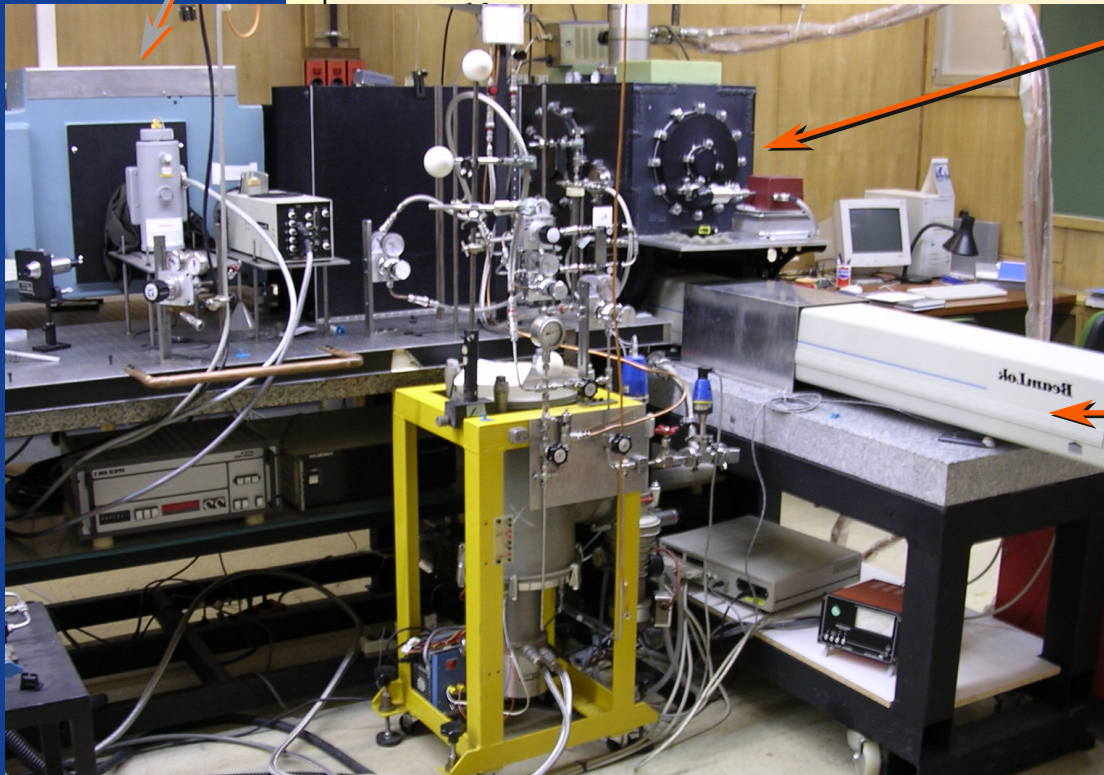
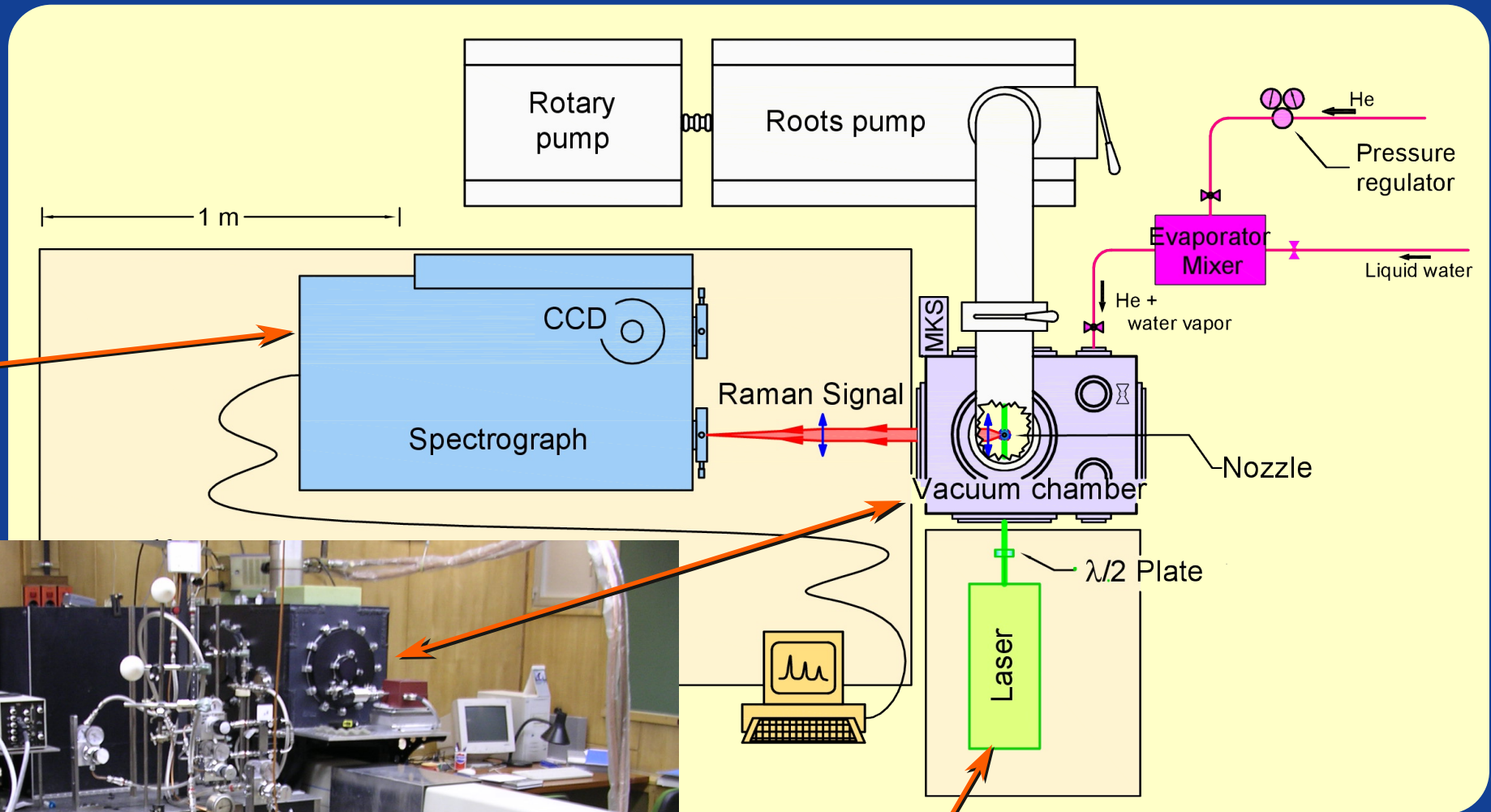
J.H. Morilla, J.M. Fernández, G. Tejeda, & S. Montero. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12**(38), 12060-12064 (2010)

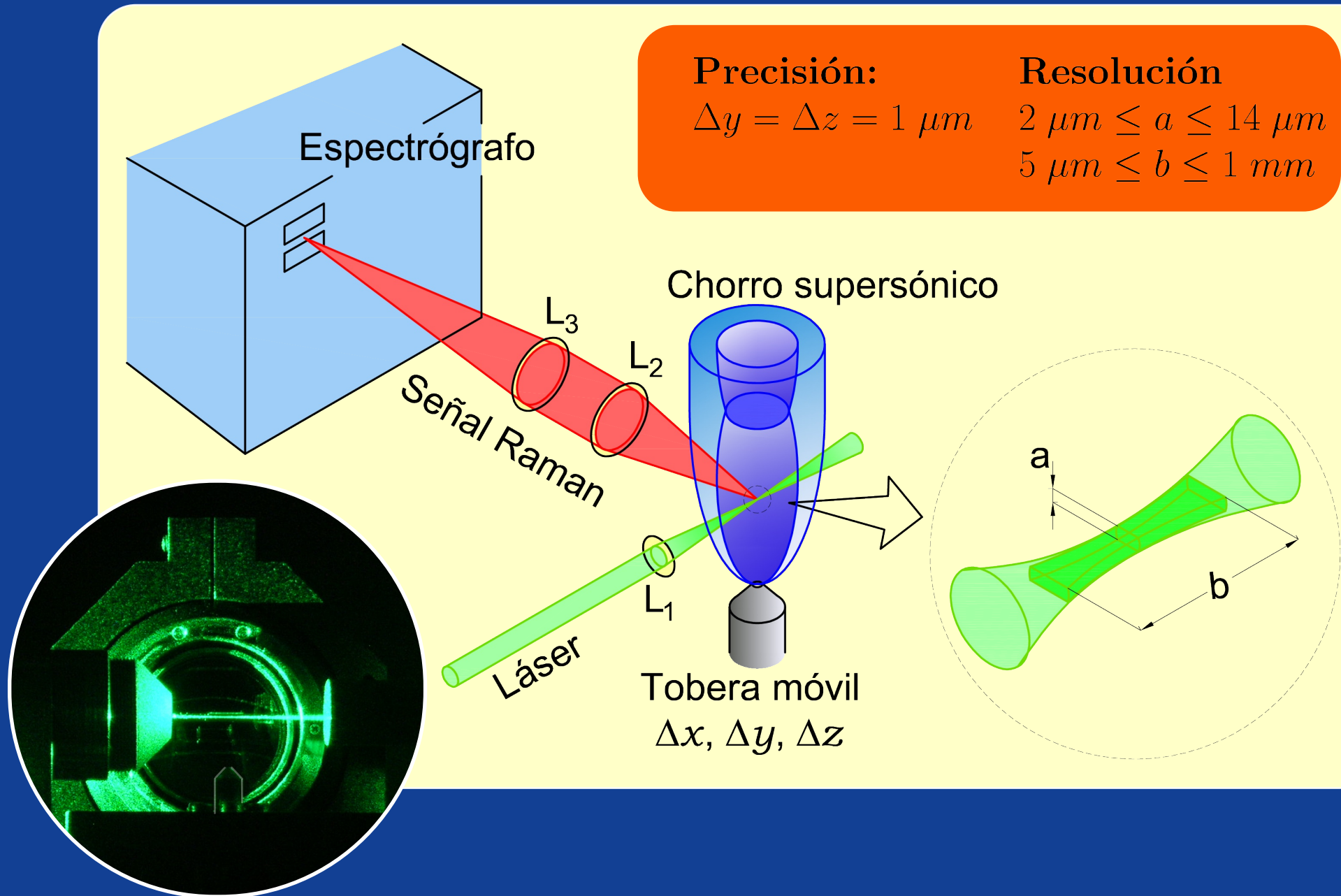
Chorro supersónico de H₂



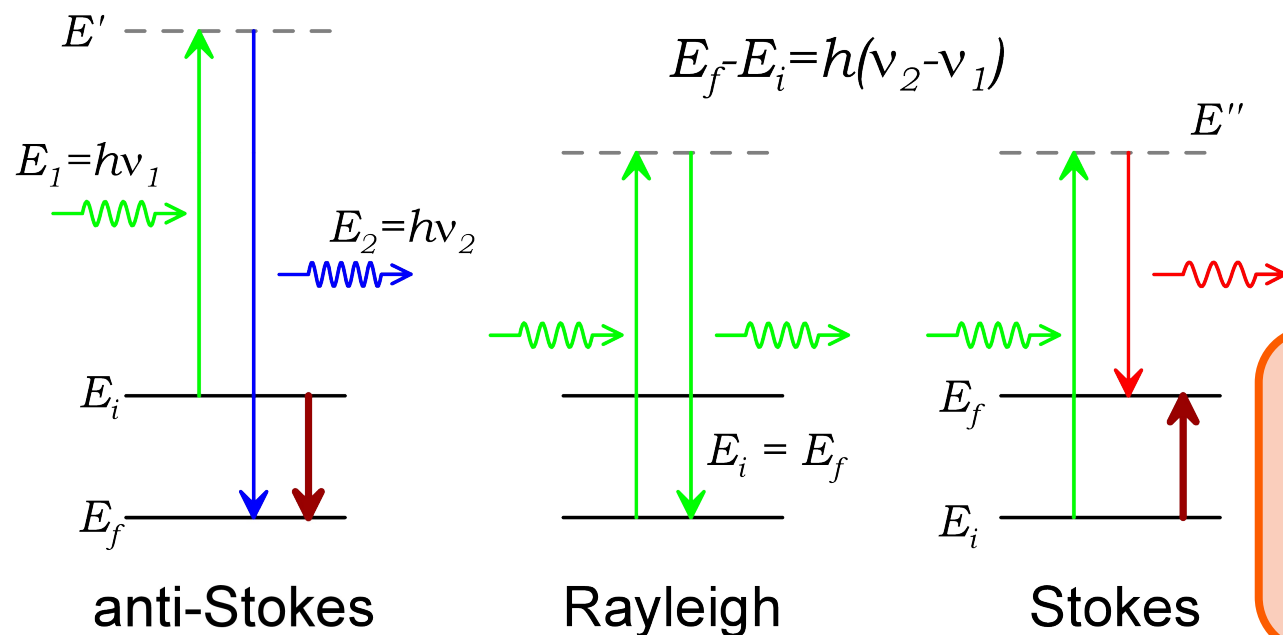
- Se rompe el equilibrio termodinámico: $T_{\text{tras}} \neq T_{\text{rot}} \neq T_{\text{vib}}$
- El chorro supersónico es un sistema dinámico, condicionado por la cinética de colisiones: congelación T_{rot} y T_{vib}

Caracterización espectroscópica

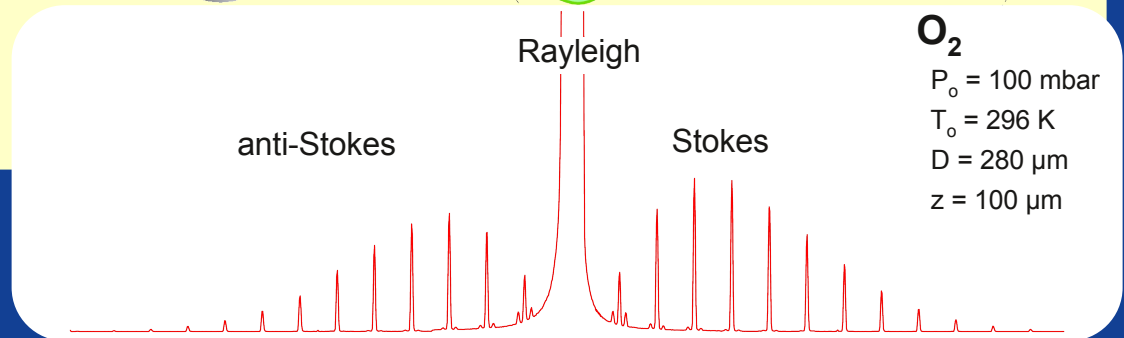
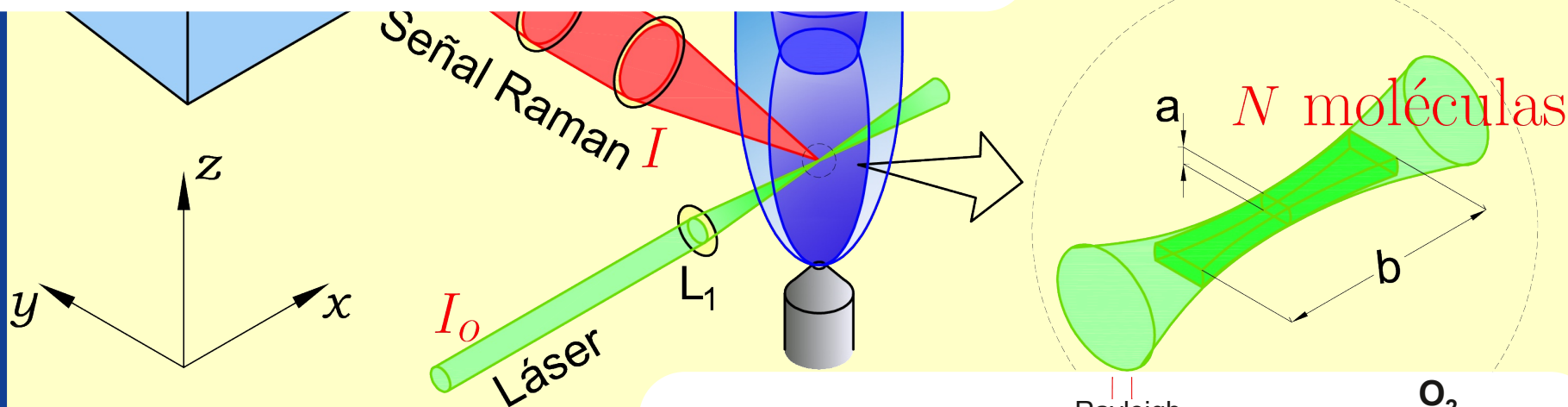




Caracterización espectroscópica

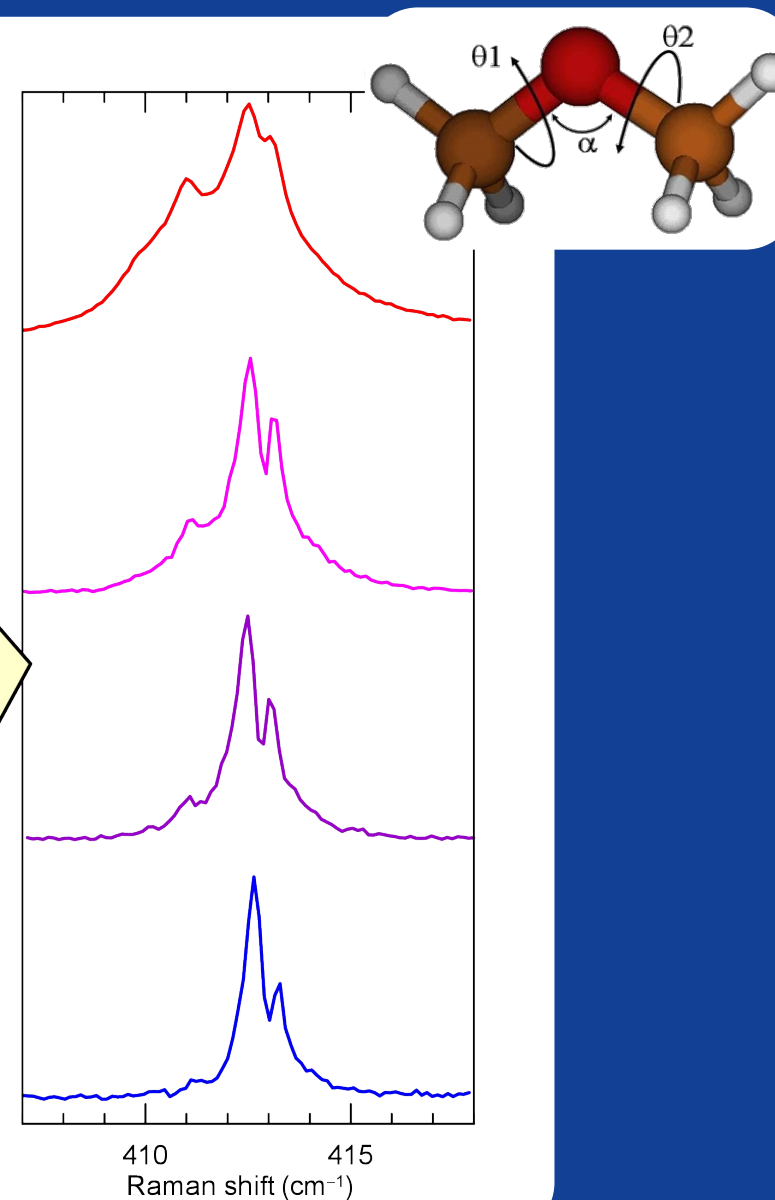
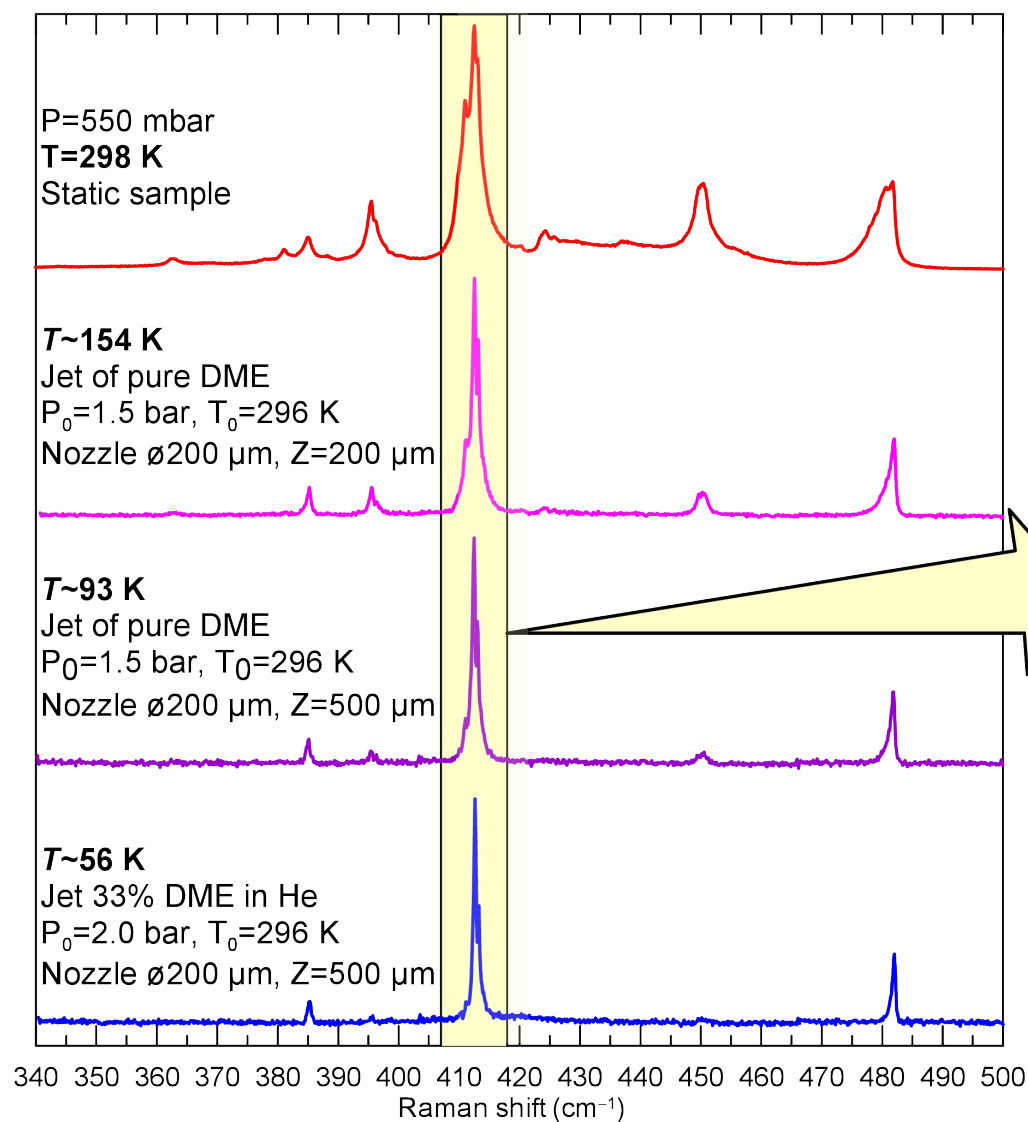


$$I_i = I_o \underbrace{N P_i(T)}_{N_i} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} \right)^{[geom]}$$

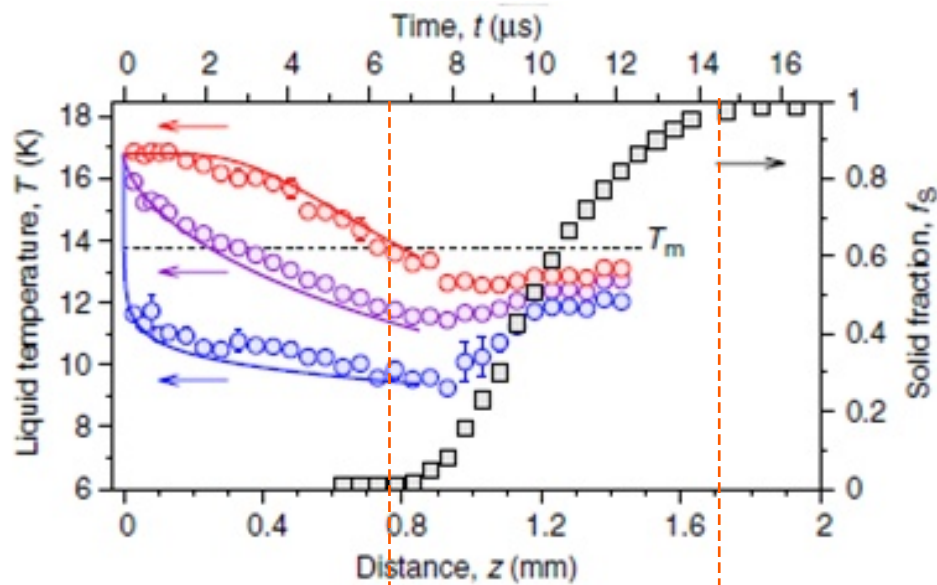


- Universal (todas las moléculas tienen espectro Raman)
 - Relación lineal entre la Intensidad del espectro y la densidad
 - Medida directa de poblaciones rotacionales y vibracionales
 - Medida directa de la composición y del estado de agregación
 - Intervalo de 1 a 6000 cm^{-1}
 - Resolución espacial de pocas micras
 - Estabilidad de varias horas
 - No hay interacción con las paredes
 - Renovación constante de la muestra
-
- Debilidad intrínseca del efecto Raman
 - Resolución espectral moderada (~ 0.1 — 1 cm^{-1})

Simplificación espectral: Dimetil eter

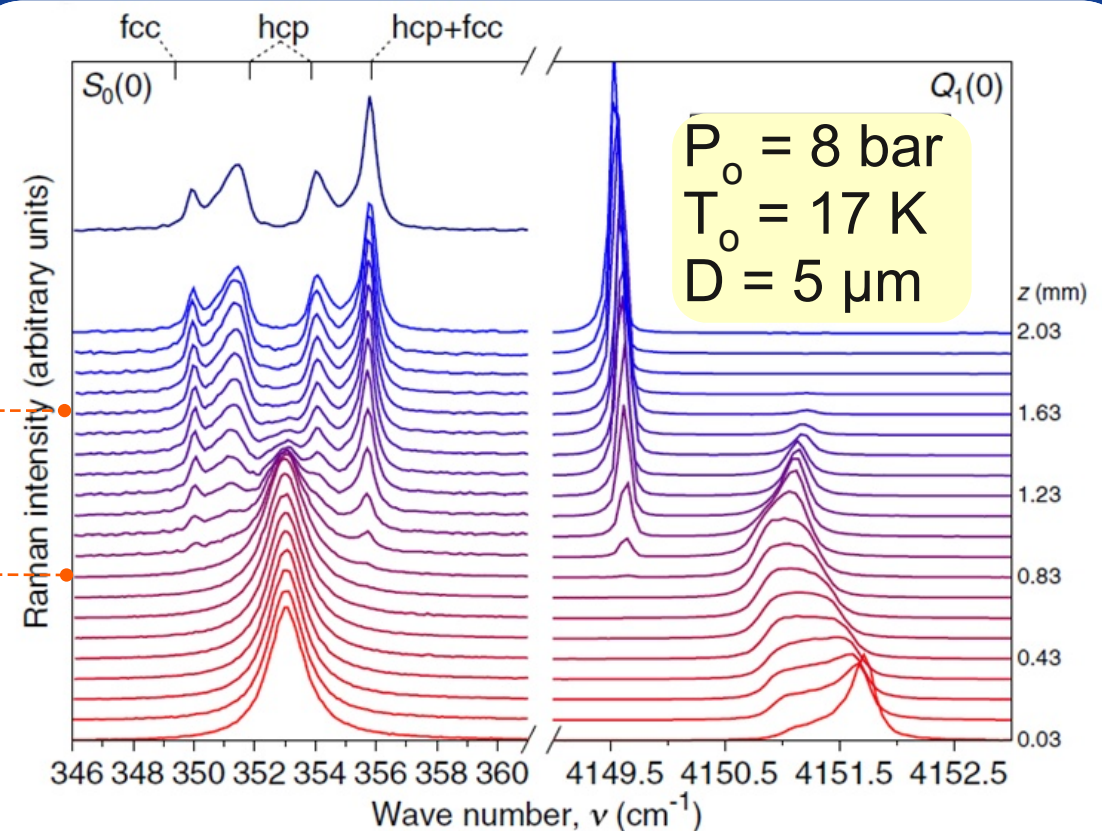
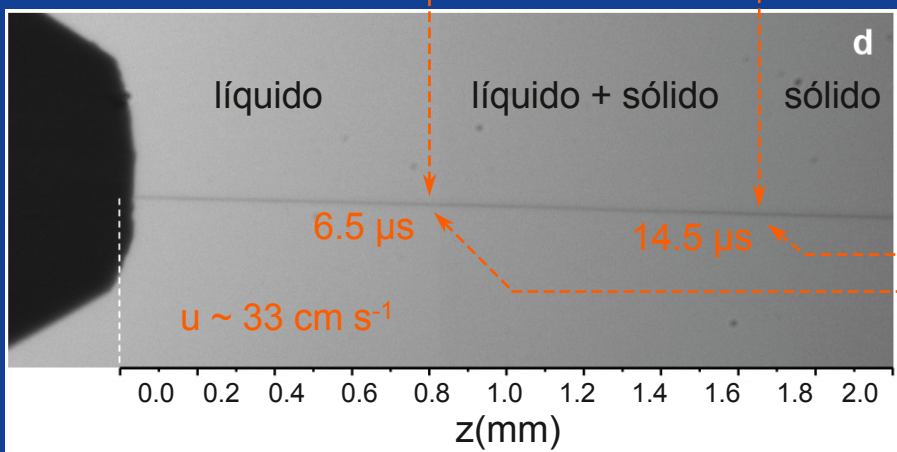


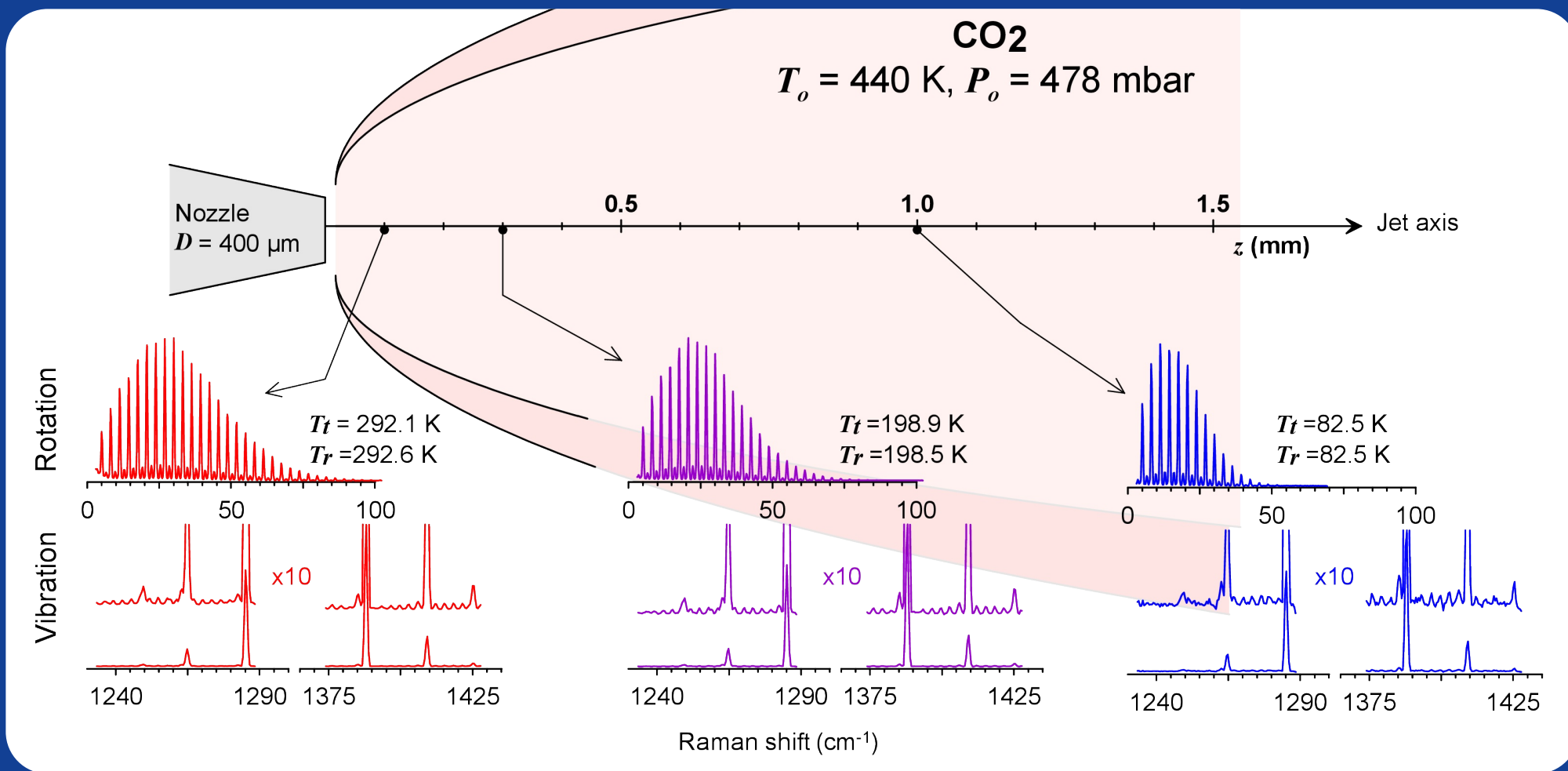
Cristalización de pH_2



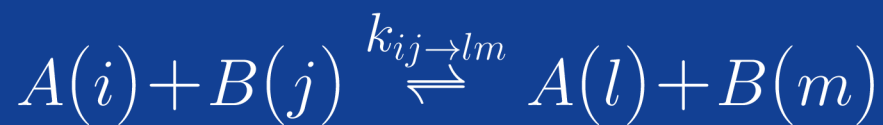
Kühnel, M.; Fernández, J. M.; Tejada, G.; Kalinin, A.; Montero, S. & Grisenti, R. E.
Phys. Rev. Lett., 106, 245301 (2011)

Kühnel, M.; Fernández, J. M.; Tramonto, F.; Tejada, G.; Moreno, E.; Kalinin, A.; Nava, M.; Galli, D. E.; Montero, S. & Grisenti, R. E. Phys. Rev. B, 89, 180201 (2014)



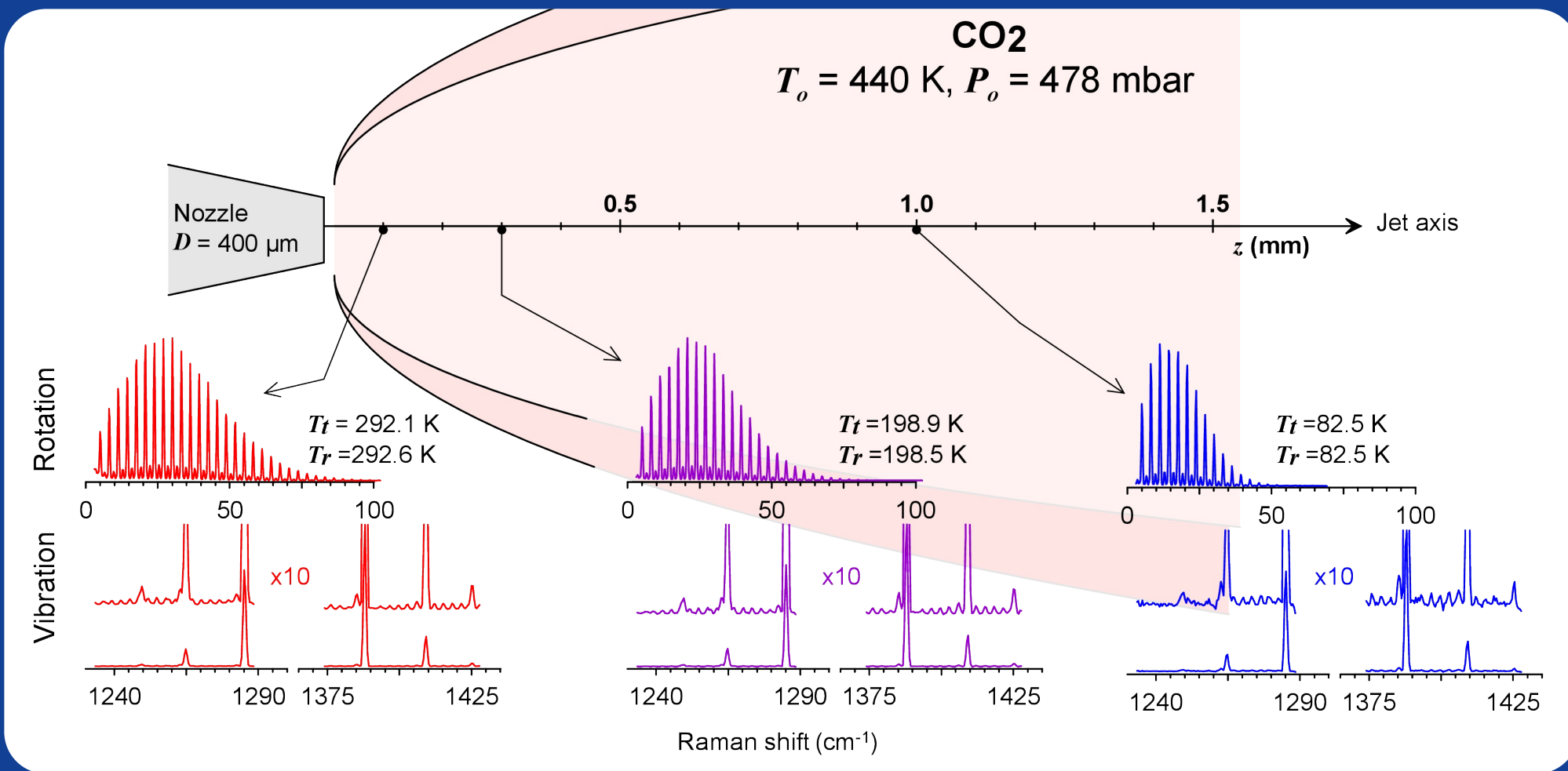


Proceso colisional



Ecuación maestra

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = N \sum_{jlm} (-P_i P_j k_{ij \rightarrow lm} + P_l P_m k_{lm \rightarrow ij})$$



Proceso colisional



Ecuación maestra

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = N \sum_{jlm} (-P_i P_j k_{ij \rightarrow lm} + P_l P_m k_{lm \rightarrow ij})$$

El laboratorio de Fluidodinámica Molecular del IEM ofrece formación en física molecular experimental, con marcado carácter interdisciplinar y una visión integral de problemas relevantes de la física molecular actual.

Formación en:

- Espectroscopía Raman de altas prestaciones
- Láseres de potencia y técnicas ópticas relacionadas
- Dinámica supersónica y subsónica de fluidos
- Alto vacío y criogenia

Posibles temas de trabajo:

- Colisiones de moléculas de interés astrofísico y atmosférico (O_2 , CO , CO_2 , H_2O ...) consigo mismas o con He , H_2 .
- Cinética de agregación y estructura de agregados moleculares pequeños de H_2 , O_2 , CO , H_2O ...
- Estudios de flujos de gas en microcanales