

Líneas de investigación

Gabriel J. Vázquez
Instituto de Ciencias Físicas
UNAM
Cuernavaca

Mis principales intereses en investigación son: 1) Espectroscopia electrónica de moléculas pequeñas en fase gaseosa (cálculos ab-initio); 2) *Medio Ambiente*, en particular en Ciencias Atmosféricas, específicamente *Espectroscopia Atmosférica* (mediciones de laboratorio y trabajo de campo); 3) Espectroscopia Astronómica (más recientemente). A continuación detallo brevemente estas líneas.

- I. Cálculos ab-initio de estructura electrónica. Una buena parte de mi trabajo de investigación se ha enfocado al estudio teórico de la Espectroscopia electrónica de moléculas pequeñas en fase gaseosa empleando técnicas mecánico-cuánticas SCF-CI. He estudiado varios tipos de sistemas moleculares, *i.e.*, moléculas neutras, radicales libres, iones positivos y negativos. Esto con el fin de investigar diversos procesos inherentes a la interacción materia-radiación, *i.e.*, absorción y emisión de radiación, fotodisociación y predisociación, fotoionización y autoionización, captura electrónica, etc. Calculamos varias propiedades moleculares, tales como energías de excitación, potenciales de ionización, energías de disociación, funciones momento dipolar eléctrico, factores de Franck-Condon, fuerzas de oscilador, tiempos de vida media radiativos, frecuencias de vibración, constantes de rotación, etc., así como información estructural y energética. Calculamos estados de valencia, Rydberg, par-iónico, superexcitados, excitados de coraza, catiónicos y aniónicos, y hemos estudiado interacciones entre algunos de estos tipos de estados.
- II. Ciencias atmosféricas. En 1992-94 tuve la oportunidad de pasar dos años en la división de química atmosférica del National Center for Atmospheric Research, en Boulder, Colorado. Esta estancia fue determinante en mi formación en Ciencias Atmosféricas. En el laboratorio estuve involucrado en la determinación de secciones eficaces de absorción y rendimientos cuánticos en la fotodisociación de NO₂, en función de la longitud de onda y temperatura. En lo que respecta al trabajo de campo, participé en tres clases de mediciones de prospección remota: 1) medición de especies atmosféricas empleando el Sol como fuente de radiación y un interferómetro FTIR como detector; 2) medición de contaminantes emitidos

por los escapes de vehículos en movimiento; 3) medición de contaminación atmosférica urbana basada en absorción de radiación IR y UV en el aire ambiente.

En dos artículos revisé algunas técnicas espectroscópicas que se usan comúnmente para la medición remota de compuestos atmosféricos en el aire ambiente, *i.e.*, TDLAS (Tunable Diode Laser Absorption Spectroscopy), lidar (LIght Detection And Ranging), DOAS (Differential Optical Absorption Spectroscopy), FTIR (Fourier Transform InfraRed).

III. Interés en espectroscopia astronómica. Durante 2012-13 pasé un año en el National Astronomical Observatories of China (NAOC), donde empecé a familiarizarme con temas astronómicos y astrofísicos. Mi interés principal es la aplicación de la espectroscopia atómica y molecular en astronomía, esto es, *Espectroscopia Astronómica*. Mi idea es estudiar la espectroscopia molecular y diversos procesos fotofísicos de sistemas pequeños, los cuales existen en el espacio, tales como H₂, CO, CH, NH⁺, C₂, CF⁺, etc., y con los cuales, o he estado involucrado, o estoy actualmente trabajando, y esto en el contexto de su relevancia astronómica.