



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: **Fernando Arias de Saavedra Aliás**

Departamento y Área de Conocimiento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Cotutor/a: **Enrique Buendía Ávila**

Departamento y Área de Conocimiento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Título del Trabajo: **Aproximación de campo medio en moléculas diatómicas: Determinación de potenciales interatómicos**

Tipología del Trabajo: *Estudio de casos teóricos o prácticos, relacionados con la temática del grado, a partir de material ya disponible en los Centros*

Breve descripción del trabajo:

La descripción de los modos vibracionales y rotacionales de las moléculas diatómicas viene determinada por el promedio de la estructura electrónica de los átomos que las constituyen y no por los detalles de la misma. Es habitual parametrizar el potencial de interacción entre los dos núcleos de la molécula y describir las vibraciones en términos de los estados excitados de dicho potencial (por ejemplo, el potencial de Morse). Este potencial medio depende, evidentemente, de la distribución de los electrones en cada uno de los átomos, que se debe modificar en función de la distancia relativa entre los mismos.

El trabajo pretende obtener el potencial promedio para estas moléculas diatómicas utilizando la aproximación de potencial efectivo óptimo para describir el movimiento de los electrones en el sistema de los dos núcleos en función de la distancia. La solución del problema en estos términos permite obtener el potencial interatómico microscópicamente y además estudiar el proceso de formación de la molécula.

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG

Alumno/a propuesto/a:

Granada, 15 de Mayo de 2015