



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: ANGULO IBÁÑEZ, JUAN CARLOS
Departamento y Área de Conocimiento: DPTO. Y ÁREA DE FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR

Cotutor/a:
Departamento y Área de Conocimiento:

Título del Trabajo: Efectos relativistas en el oscilador armónico de Dirac

Tipología del Trabajo:
(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/15)

Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del grado

Breve descripción del trabajo:

El oscilador de Dirac es un modelo exactamente resoluble que fue introducido en el contexto de la mecánica cuántica relativista de muchos cuerpos. El problema ha sido también explorado como posible fuente de un término de interacción para modelar confinamiento en cromodinámica cuántica. Estas consideraciones establecen sin lugar a dudas que un sistema tan ‘sencillo’ como el oscilador de Dirac puede servir como ejemplo interesante en mecánica cuántica relativista.

La descripción de los efectos relativistas en este sistema, que se plantea en el presente trabajo, es de carácter cuantitativo. Este planteamiento surge a raíz de las siguientes consideraciones: (i) en el ámbito cualitativo, son bien conocidas las diferencias entre las soluciones relativista y no-relativista; pero (ii) tales diferencias no han sido discutidas con tanta profundidad en un marco cuantitativo, exceptuando las concernientes a los respectivos espectros energéticos. Se propone aquí un análisis basado en las densidades a un cuerpo, en espacios conjugados, usando el formalismo y las técnicas propias de la Teoría de la Información.

Se han llevado a cabo, con éxito, trabajos similares al aquí planteado en otros sistemas mecanocuánticos. Especialmente destacables son los más recientes en átomos hidrogenoides en estados fundamental y excitados.

Objetivos planteados:

Los efectos relativistas en la densidad monoparticular de este sistema pueden ser cuantificadas por medio de funcionales comparativos (‘medidas de divergencia’), diversas medidas de complejidad, y los planos de información substendidos por los factores de cada complejidad. Las funciones a comparar son las densidades radiales de Schrödinger (no-relativista) y Dirac (relativista), con resultados complementarios en los espacios conjugados de posición y momento. La interpretación de los resultados se hará en términos de (i) la frecuencia del oscilador, y (ii) sus diferentes estados cuánticos, tanto fundamental como excitados. Como objetivo adicional se encuentra la búsqueda de posibles relaciones de incertidumbre, entre medidas comparativas en ambos espacios conjugados.



Metodología:

Los pasos a seguir, de forma natural, según los objetivos planteados previamente, son los siguientes:

- Determinación de las expresiones analíticas de las autofunciones asociadas a los problemas de autovalores de Schrödinger y de Dirac, en ambos espacios conjugados (posición y momento).
- Implementación computacional de dichas expresiones, posibilitando el cálculo de las respectivas densidades en cualquier punto de su dominio.
- Diseño de subrutinas de integración y derivación numéricas: las primeras para el cálculo de valores esperados o de funcionales de la densidad, las segundas para cuantificar el grado de orden/desorden en términos del gradiente de la distribución.
- Cálculo de diversas magnitudes de interés físico (e.g. valores esperados radiales, momentos de frecuencia, entropía de Shannon, información de Fisher, medidas de complejidad y/o divergencia de carácter global y local, similitud cuántica...).
- Interpretación de los resultados, en cada espacio (posición y momento), enfatizando la relevancia de los efectos relativistas en términos de la frecuencia del oscilador y/o su nivel de excitación.
- Análisis de la correlación entre variables de espacios conjugados, estableciendo a ser posible relaciones de incertidumbre en términos de los valores esperados y funcionales de la densidad calculados previamente.

Bibliografía:

J. Benítez, R.P. Martínez y Romero, H.N. Núñez-Yepes, A.L. Salas-Brito, Phys. Rev. Lett. 64 (1990) 1643.
M. Moshinsky, A. Szczepaniak, J. Phys. A 22 (1989) L817.
Y. F. Pérez, C. J. Quimbay, Revista Colombiana de Física 42 (2010) 240.
Statistical Complexity: Applications in Electronic Structure, ed. K.D. Sen (Springer, London, 2011).
J. Antolín, J.C. Angulo, S. Mulas, S. López-Rosa, Phys. Rev. A 90 (2014) 042511.

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG
Alumno/a propuesto/a:

Granada, 24 de Mayo

2016