



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a:	Enrique Buendía Ávila
Departamento y Área de Conocimiento:	Física Atómica, Molecular y Nuclear
Cotutor/a:	Fernando Arias de Saavedra Alías
Departamento y Área de Conocimiento:	Física Atómica, Molecular y Nuclear

Título del Trabajo: Aproximación del potencial efectivo óptimo en moléculas diatómicas													
Tipología del Trabajo: (Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)	(Marcar con X)												
	<table border="1"> <tr> <td>1. Revisión bibliográfica</td> <td></td> <td>4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio</td> <td></td> </tr> <tr> <td>2. Estudio de casos teórico-prácticos</td> <td>X</td> <td>5. Elaboración de un proyecto</td> <td></td> </tr> <tr> <td>3. Trabajos experimentales</td> <td></td> <td>6. Trabajo relacionado con prácticas externas</td> <td></td> </tr> </table>	1. Revisión bibliográfica		4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio		2. Estudio de casos teórico-prácticos	X	5. Elaboración de un proyecto		3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas	
	1. Revisión bibliográfica		4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio										
	2. Estudio de casos teórico-prácticos	X	5. Elaboración de un proyecto										
3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas											

Breve descripción del trabajo:

En las moléculas la pérdida de la simetría esférica complica la aproximación teórica de las mismas. Las simetrías de las moléculas más sencillas permiten aún una sistematización en la organización de los estados estacionarios de las mismas. La construcción de los estados estacionarios de las moléculas se realiza en una aproximación de partícula independiente, que puede construirse con distintas hipótesis de partida, por ejemplo, combinando los orbitales de los átomos que constituyen la molécula de manera que se adapten a las simetrías de la misma, o bien construyendo directamente los orbitales monoparticulares resolviendo la correspondiente ecuación para una partícula sometida a las interacciones presentes en la molécula (electrostáticas en primera aproximación).

La aproximación de partícula independientes óptima se conoce como método de Hartree-Fock, aunque la resolución de las ecuaciones integro diferenciales que genera es engorrosa en general y muy complicada si se desea incluir mezcla de configuraciones. La más sencilla de las aproximaciones de partícula independiente es utilizar los estados monoparticulares que se obtienen para una partícula bajo la acción del potencial generado por los núcleos dispuestos en unas determinadas posiciones susceptibles de cambiar, buscando el mínimo de energía de la molécula en el estado que se considere. En esta aproximación se desprecian los efectos de apantallamiento de los electrones en la interacción con la carga de los núcleos. Se propone estudiar la aproximación denominada de potencial efectivo óptimo, que se ha mostrado muy eficiente en la aproximación de los estados estacionarios de los átomos, para la aproximación de los estados ligados de las moléculas. Esta aproximación es similar a la descrita anteriormente, sin embargo, en su primera aproximación incluye, en forma promediada y autoconsistente, el apantallamiento que los electrones ejercen sobre el campo electrostático creado por los núcleos atómicos.

En este trabajo se pretende centrar el estudio sobre los estados fundamentales de moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares, buscando determinar las propiedades básicas de las mismas.

Objetivos planteados:

Extensión del método del potencial efectivo óptimo a moléculas diatómicas.

Estudio de propiedades del estado fundamental de moléculas diatómicas homo- y heteronucleares.



Metodología:

Estudio bibliográfico.

Utilización de programas básicos para el cálculo de las cantidades a determinar.

Análisis de los resultados teóricos y comparación con casos reales.

Bibliografía:

- . B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Physics of atoms and molecules*, Longman Scientific and Technical (1983), reprinted (1993).
- . P.F. Bernath, *Spectra of Atoms and Molecules*, Oxford University Press (1995).
- . B J Ransil, *Studies in Molecular Structure. II. LCAO-MO-SCF Wave functions for Selected First-Row Diatomic Molecules*, Rev. Mod. Phys. **32**, 245-354, (1960).
- . A Sarsa, F J Gálvez and E Buendía, *A parametrized optimized effective potential for atoms*, J.Phys. **B36**, 4393-4402 (2003).

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

Alumno/a propuesto/a:

Granada, de 2017

Sello del Departamento