



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a:	Fernando Arias de Saavedra Alías
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: Estados ligados de hamiltonianos no separables: Aproximación numérica y desarrollo en bases auxiliares.					
Tipología del Trabajo: (Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)	(Marcar con X)	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 la solución, sea exacta o aproximada, de la ecuación de valores propios asociada al movimiento cuántico en dos o más dimensiones de una partícula bajo la acción de un potencial dado se utiliza la separación de variables siempre que esta sea posible. Cuando el potencial es no separable, la opción más utilizada es la de desarrollar las soluciones en una base auxiliar y diagonalizar el problema en dicha base. Escrito el problema en representación de coordenadas, en general, no es posible la integración analítica de la ecuación diferencial resultante y la aplicación de métodos numéricos para su resolución no es habitual dado que se plantean algunos problemas técnicos de difícil solución.

En este trabajo, se pretende abordar el problema de la resolución numérica de este problema en dos dimensiones utilizando como herramienta básica el método de Prolongación Analítica Sucesiva que ha demostrado ser un método extraordinario en la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias y ha proporcionado resultados prácticamente exactos para los autovalores y autofunciones de una partícula moviéndose en una dimensión en el seno de cualquier potencial. Se pretende diseñar un algoritmo numérico que resuelva el problema de autovalores asociado al movimiento en dos dimensiones de una partícula sometida a la acción de un potencial no separable y comparar las soluciones con las que se obtienen mediante desarrollo en términos de una base auxiliar.

Objetivos planteados:

Resolución mediante bases auxiliares de hamiltonianos bidimensionales no separables.

Resolución mediante el método de prolongación analítica sucesiva de hamiltonianos bidimensionales no separables.

Comparación de resultados entre ambos métodos de resolución.



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:

- H Taseli and R Eid, *Eigenvalues of the Two-Dimensional Schrodinger Equation with Nonseparable Potentials*, International Journal Quantum Chemistry **59**, 183-201 (1996)
- P. Pedrama, M. Mirzaeib and S.S. Gousheh, *Accurate energy spectrum for double-well potential: periodic basis*, Molecular Physics, **108**, 1949-1955 (2010)
- E Buendía, F J Gálvez and A Puertas, *Study of the singular anharmonic potentials by means of the analytic continuation method*, Jour. Phys. **A28**, 6731-6738 (1995)

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