



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a:	Antonio M. Lallena Rojo
Departamento y Área de Conocimiento:	Física Atómica, Molecular y Nuclear
Cotutor/a:	
Departamento y Área de Conocimiento:	

Título del Trabajo: Cálculo Monte Carlo del espectro de energía de la molécula de hidrógeno

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	<input type="checkbox"/>	4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio	<input type="checkbox"/>
		2. Estudio de casos teórico-prácticos	<input checked="" type="checkbox"/>	5. Elaboración de un proyecto	<input type="checkbox"/>
		3. Trabajos experimentales	<input type="checkbox"/>	6. Trabajo relacionado con prácticas externas	<input type="checkbox"/>

Breve descripción del trabajo:

En este trabajo se pretende abordar el cálculo del espectro de energía de la molécula de hidrógeno mediante técnicas Monte Carlo. Este trabajo es complementario de la asignatura "Física atómica y molecular".

Objetivos planteados:

- Estudio de la molécula de hidrógeno: aproximación de Born-Oppenheimer
- Estudio de las técnicas de integración Monte Carlo
- Cálculo del espectro de energía de la molécula de hidrógeno
- Aplicación para funciones de onda de prueba con uno o dos parámetros variacionales

Metodología:

Se estudiará en primer lugar la molécula de hidrógeno, analizando su hamiltoniano y formulando la aproximación de Born-Oppenheimer para describir su dinámica. Simultáneamente se estudiarán las técnicas de integración Monte Carlo necesarias para resolver el problema del cálculo del espectro de energías correspondiente al hamiltoniano analizado en el marco del método variacional. Se particularizarán las técnicas de cálculo para los casos de funciones de onda de prueba con uno (la separación entre los dos núcleos de hidrógeno) y dos (el anterior y la longitud característica de la función de onda electrónica) parámetros variacionales.

Bibliografía:

- B.H. Bransden, C.J. Joachain, *Physics of atoms and molecules*, Pearson, 2003
 J. K. Cohen-Tanouji, B. Liu, F. Laloë, *Quantum mechanics*, Addison-Wesley, 1975.
 S. E. Koonin, *Computational physics*, Addison-Wesley, 1986.
 D. A. McQuarrie, *Quantum Chemistry*, Oxford University Press, 1983.
 A. D. McLean, A. Weiss, M. Yoshimine, *Configuration interaction in the hydrogen molecule*. *Rev. Mod. Phys.* 32 (1960) 211.
 F. Salvat PENELOPE - A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport, NEA, 2016.

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

Alumno/a propuesto/a:

Granada, 4 de mayo de 2018

Sello del Departamento