



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

| | |
|---|-------------------------------------|
| Tutor/a: | Enrique Buendía Ávila |
| Departamento y Área de Conocimiento: | Física Atómica, Molecular y Nuclear |
| Correo electrónico: | buendia@ugr.es |
| Cotutor/a: | Fernando Arias de Saavedra Alías |
| Departamento y Área de Conocimiento: | Física Atómica, Molecular y Nuclear |
| Correo electrónico: | arias@ugr.es |

Título del Trabajo: Potencial de interacción entre los núcleos en moléculas diatómicas: Determinación microscópica con el potencial efectivo óptimo.

| | | | | | |
|--|----------------|---------------------------------------|---|---|--|
| 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:

Los estados vibracionales de una molécula dependen de la interacción entre los núcleos de los átomos que la constituyen y de la distribución de los electrones en torno a los mismos. La distribución de los electrones en la molécula viene determinada por el estado electrónico en que dicha molécula se encuentra y su determinación exige la solución de la ecuación de Schrödinger para el movimiento de los electrones, que en primera aproximación debe incluir la interacción electrostática de los electrones con la carga de los núcleos de la molécula y la repulsión electrostática entre los mismos. La distribución espacial de los núcleos y la distancia entre los mismos entran como 'parámetros' externos en la ecuación de Schrödinger y en las energías y vectores propios de la misma. La aplicación del principio variacional permiten establecer en cada caso la distribución geométrica y las distancias de equilibrio. En moléculas diatómicas, la distribución geométrica es única y sólo se tiene un parámetro libre, la distancia entre los núcleos, R , en la ecuación de Schrödinger. En este caso el potencial entre los núcleos se obtiene resolviendo la ecuación de autovalores para distintos valores de R y el potencial no es más que el valor de la energía del estado electrónico que se considera como función de R . Si se describen los estados de la molécula como mezcla de configuraciones, es evidente que es necesario incluir entre las mismas tanto las dominantes en torno a la distancia de equilibrio de la molécula como las que domina a grandes y cortas distancias, para que lograr un comportamiento razonable de la energía del estado con R .

En el trabajo se propone abordar el estudio del estado fundamental de las moléculas diatómicas en un marco multiconfiguracional para describir adecuadamente todo el rango de valores de R que permitan aproximar el potencial entre los núcleos. Se propone utilizar la aproximación de partícula independiente conocida como aproximación de campo medio óptimo parametrizado desarrollada para el estudio de los estados estacionarios de átomos y que se ha mostrado como una alternativa sencilla y eficiente al Hartree-Fock.

Objetivos planteados:

Extensión del método del potencial efectivo óptimo multiconfiguracional a moléculas diatómicas.
Estudio de propiedades del estado fundamental de moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares.

Metodología:

Estudio bibliográfico.



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

*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, 18 de mayo de 2021

Sello del Departamento