



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: Rosario González Férez

Departamento y Área de Conocimiento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Correo electrónico: rogonzal@ugr.es

Cotutor/a: Marta Anguiano Millán

Departamento y Área de Conocimiento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Correo electrónico: mangui@ugr.es

Título del Trabajo: Estudio teórico de la molécula de hidrógeno ionizada

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:

El objetivo de este trabajo es resolver analíticamente la ecuación de Schrödinger electrónica para el estado fundamental de la molécula H_2^+ . Para ello, se usará la aproximación adiabática de Born-Oppenheimer, que separa el movimiento electrónico del nuclear. La solución exacta de la ecuación de Schrödinger electrónica se obtendrá utilizando coordenadas esferoidales prolatas. El conocer la solución exacta del problema del ión molecular H_2^+ nos permite comprobar la validez de los métodos aproximados de resolución de la ecuación de Schrödinger que se utilizan para el estudio de sistemas más complejos. La aproximación que se usa más frecuentemente en el estudio de sistemas moleculares con más electrones consiste en describir la función de onda electrónica (orbitales moleculares) mediante una combinación lineal de los orbitales atómicos, centrados en sus respectivos núcleos. Los coeficientes de esta combinación se optimizan utilizando el método variacional de Rayleigh-Ritz. En este trabajo se compararán los resultados exactos con aquéllos que proporciona dicho método variacional.

Objetivos planteados:

1. Formulación general del problema.
2. Estudio de la aproximación de Born-Oppenheimer para la molécula de H_2^+ .
3. Solución exacta del problema electrónico.
4. Solución del método variacional.
5. Resultados y comparación con datos experimentales.

Metodología:

Se hará uso de *Mathematica* y también de algunos métodos numéricos para llevar a cabo la resolución de algunas integrales. También se usará un código en *FORTRAN* o *PYTHON* para llevar a cabo los cálculos analíticos, y obtener determinadas expresiones de forma más sencilla.



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

Bibliografía:

- [1] Bransden B. H., Joachain C. J.; Physics of Atoms and Molecules; Longman Scientific & Technical, Harlow, 1983.
- [2] Atkins P. W., Friedman R. S.; Molecular Quantum Mechanics; IV Edition, Oxford University Press, Oxford, 2005.
- [3] Hinchliffe A. Molecular modelling for beginners, Wiley, Manchester UK. 2003.

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

Granada, 19 de Mayo 2021

Sello del Departamento