



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a:	Francisco Javier Gálvez Cifuentes
Departamento y Área de Conocimiento:	Física Atómica, Molecular y Nuclear
Correo electrónico:	galvez@ugr.es
Cotutor/a:	Enrique Buendía Ávila
Departamento y Área de Conocimiento:	Física Atómica, Molecular y Nuclear
Correo electrónico:	buendia@ugr.es

Título del Trabajo:	Átomos sometidos a presión.				
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	X	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:

Los estados estacionarios de átomos aislados son aceptablemente descritos con distintas aproximaciones. Una excelente aproximación cualitativa de los mismos se consigue con distintas versiones de la aproximación de partícula independiente y se pueden obtener resultados cuantitativos bastante precisos corrigiendo estas aproximaciones siguiendo distintos caminos. En algunos casos, como al introducir un átomo en una molécula o un cristal, se cambian las simetrías básicas presentes en el mismo al someterlo a campos externos de distinta simetría, sin embargo estos son poco intensos y sus efectos pueden ser tratados perturbativamente afectando sólo a los electrones corticales. Cuando los campos aplicados son más intensos, las modificaciones de la estructura interna del átomo pueden hacerse mucho más significativas.

Al hablar de átomos sometidos a presión se aborda el problema de la modificación de la estructura de los estados estacionarios de los mismos al cambiar de forma drástica el potencial medio que sienten los electrones en el átomo. Se utiliza, quizás, la aproximación más sencilla que consiste en someter al átomo a un potencial confinante con simetría esférica, esto es, introducirlo dentro de una esfera de paredes infinitas de radio determinado, cuyo valor determinará la intensidad del campo o 'presión' al que éste está sometido. En una aproximación diferente, más realista, se puede considerar al átomo en el centro de un potencial esférico, atractivo y de intensidad finita que limite las posibilidades de los electrones de situarse a distancias grandes del núcleo.

Se pretende estudiar el espectro de baja energía del átomo de Helio, utilizando la aproximación del potencial efectivo óptimo para la construcción de los estados atómicos. Se compararán los resultados con los obtenidos cuando se tiene un confinamiento infinito.



Objetivos planteados:

Modificación de la aproximación de potencial efectivo óptimo en átomos confinado en esferas.
Estudios del efecto del tamaño de la esfera en las propiedades del espectro de baja energía de los átomos.
Estudio del efecto de la barrera finita en comparación con la barrera infinita.

Metodología:

Estudio bibliográfico [1][2].
Utilización de programas básicos para el cálculo de las cantidades a determinar.
Análisis de los resultados teóricos y comparación con casos reales.

Bibliografía:

- A Sarsa, F J Gálvez and E Buendía, *A parametrized optimized effective potential for atoms*, J.Phys B36, 4393-4402 (2003).
- J Garza and R Vargas, *Comparative study between the Hartree-Fock and Kohn-Sham models for the lowest and triplet states of the confined helium atom*, Adv. Quantum Chem. **57**, 241-254 (2009).
- A Sarsa, E Buendía and F J Gálvez, *Study of confined many electron atoms by means of the POEP method*, J. Phys. **B47**, 185002 (2014).

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

Alumno/a propuesto/a:

Granada, 19 de mayo de 2023

Sello del Departamento