



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Correlación e información mutua: densidad interelectrónica en espacios conjugados

Descripción general (resumen y metodología):

Se han llevado a cabo diferentes estudios cuantitativos en sistemas multielectrónicos para analizar el nivel de correlación y de 'información mutua' existente entre los electrones que componen un sistema dado. Tales estudios se han basado usualmente en un análisis comparativo entre la densidad de pares de electrones (dependiente de dos variables) y la distribución producto de las respectivas densidades marginales a un cuerpo. La mayor o menor discrepancia entre dichas magnitudes constituye una medida del grado de correlación entre los electrones constituyentes.

Más allá de un análisis comparativo visual, se persigue un estudio metodológicamente preciso y riguroso, empleando para ello una diversidad de funcionales que pone a nuestro alcance la bien conocida Teoría de la Información. En muchos casos tales funcionales actúan como 'medidas de distancia' entre distribuciones probabilísticas, considerando las propiedades de las que gozan gracias a sus respectivas definiciones, así como los espacios de distribuciones sobre los que se definen.

Cabe destacar que dos distribuciones pueden considerarse más o menos 'distantes' atendiendo a según qué aspectos de sus propiedades estructurales, por ejemplo el nivel de dispersión sobre su dominio o su posible carácter oscilatorio, entre otras.

Asimismo, dada la amplitud de aplicabilidad de las herramientas teórico-informacionales, es de interés considerar los estudios paralelos en los espacios conjugados de posiciones y momentos. Además del enriquecedor aporte de información al incluir ambos espacios (y en ocasiones el 'espacio producto'), es notable destacar la eventual existencia de relaciones de incertidumbre asociadas a los funcionales considerados, análogas a la notable relación de Heisenberg expresada en términos de las respectivas varianzas.

En fechas recientes nuestro grupo ha desarrollado con éxito algunos trabajos en las líneas mencionadas, con aplicaciones en sistemas atómicos neutros (carga total cero) o iones de carga unidad (cationes y aniones).

En este trabajo se pretende extender tales estudios sobre las densidades a dos cuerpos mediante el uso de 'funcionales generalizados', con carácter monoparamétrico, y que permiten dar un mayor/menor peso a diferentes regiones del dominio de la distribución, tales como la región de valencia o el entorno del origen. La modificación de los pesos relativos, tanto en el espacio de posiciones como en el de momentos, pone de manifiesto la interconexión entre las características estructurales de la densidad en el espacio considerado y las propiedades físico-químicas más relevantes del sistema al que corresponde.

1. Diseñar los códigos computacionales necesarios para la obtención de las correspondientes densidades a dos cuerpos.
2. Calcular la divergencia y similitud entre la densidad a dos cuerpos y el producto de las densidades a un cuerpo, para diferentes rangos de q , como medidas de correlación y de 'información mutua' entre los electrones que constituyen el sistema.
3. Interpretar los resultados en términos de las principales propiedades físicas de los átomos, y atendiendo a las propiedades estructurales de la nube electrónica.
4. Comparar los resultados con los obtenidos previamente mediante el uso de densidades a un cuerpo, y que no incluyen información en términos de correlación.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

Se han realizado con anterioridad estudios teórico-informacionales de características similares a las recién mencionadas, pero basados usualmente en el análisis de las densidades a un cuerpo, y solo más recientemente considerando las densidades a dos cuerpos. En estos últimos se ha empleado un reducido conjunto de funcionales comparativos, en particular: las divergencias de Jensen-Shannon (JSD) y de Kullback-Leibler (KL), y el índice de similitud cuántico QSI.

El objetivo principal de este trabajo es considerar las conocidas generalizaciones de tales funcionales, concretamente: (i) las divergencias de Jensen-Tsallis (JTD q) y de Jensen-Rényi (JRD q), así como el índice de similitud cuántico generalizado (QSI q). En lo que se refiere a las divergencias, la pionera de Jensen-Shannon se incluye como caso particular de ambas JTD q y JRD q , mientras que la similitud cuántica QSI aparece como caso específico de la generalización QSI q .

En todas las generalizaciones aquí consideradas, el parámetro característico q permitirá dar una relevancia específica a dominios concretos de especial interés físico, prestando especial atención a la región de valencia, dado el papel que juega en la manifestación de notables propiedades físicas de los sistemas aquí considerados. Así se ha puesto de manifiesto en trabajos previos mediante la aplicación de las generalizaciones a las densidades atómicas a un cuerpo, y se pretende ahora ganar información adicional y complementaria a partir de las densidades a dos cuerpos.

Bibliografía básica:

1. S. López-Rosa, J.C. Angulo, A.L. Martín, J. Antolín, Analysis of correlation and ionization from pair distributions in many-electron systems. *European Phys. J. Plus* (2021) 136:763.
2. S. Mondal, K. Sen, J.K. Saha, He atom in a quantum dot: Structural, entanglement, and information-theoretical measures. *Physical Review A* (2022) 105 (3).
3. P. Ghosh, D. Nath, Generalized quantum similarity index: An application to pseudoharmonic oscillator with isospectral potentials in 3D. *International Journal Of Quantum Chemistry* (2021) 121 (5).
4. J.C. Angulo, S. López-Rosa, Mutual information in conjugate spaces for neutral atoms and ions. *Entropy* (2022) 24:233.
5. A. Matrodi, S. Noorizadeh, N-Derivatives of Shannon entropy density as response functions. *Physical Chemistry Chemical Physics* (2020) 22:21535.
6. A. Bouvrie, J. Antolín, J.C. Angulo, Generalized Quantum Similarity Index: Applications in atoms. *Chem. Phys. Lett.* (2011) 506:326.
7. A.P. Majtey, A.R. Plastino, A. Plastino, New features of quantum discord uncovered by q -entropies. *Physica A-Statistical Mechanics And Its Applications* (2012) 391:2491.
8. J. Antolín, S. López-Rosa, J.C. Angulo, R.O. Esquivel, Jensen-Tsallis divergence and atomic dissimilarity for position and momentum space electron densities. *J. Chem. Phys.* (2010) 132:044105.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Es recomendable llevar a cabo secuencialmente los diferentes pasos necesarios para la elaboración del trabajo, con algunas excepciones:

1. Inicialmente se considera imprescindible la puesta a punto de los programas que proporcionen las densidades a uno y a dos cuerpos de los sistemas considerados. No obstante, también es de interés familiarizarse simultáneamente, en el contexto teórico, con aquellas medidas informacionales que serán objeto de estudio, de acuerdo con los objetivos

planteados.

2. El siguiente paso, en el ámbito computacional, requiere la determinación numérica de las medidas comparativas. Ello requiere el uso de procedimientos de integración, optimizados para lograr una adecuada precisión.
3. Aunque los resultados obtenidos para cada medida puedan interpretarse independientemente, se logrará una visualización global más completa haciendo un análisis conjunto y comparativo de todas ellas.

El interés de los resultados obtenidos y las conclusiones derivadas de ellos podrá enfatizarse mediante la comparación con los aportados por estudios previos en los que no se considera la correlación interelectrónica.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: JUAN CARLOS ANGULO IBÁÑEZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR

Correo electrónico: angulo@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: MARIA DEL MAR GUTIERREZ VILCHEZ

Correo electrónico: marguvil1000@correo.ugr.es