



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a:

Departamento y Área de Conocimiento: DEPARTAMENTO Y ÁREA DE FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR

Correo electrónico: angulo@ugr.es

Cotutor/a:

Departamento y Área de Conocimiento:

Correo electrónico:

Título del Trabajo: Efectos relativistas en la densidad radial de sistemas hidrogenoides D-dimensionales

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:

La consideración de los efectos relativistas en la descripción de sistemas mecanocuánticos es objeto de interés desde hace décadas, de hecho casi un siglo, tras la formulación de la Teoría de la Relatividad para explicar, en un marco teórico, las observaciones experimentales de diferentes fenómenos físicos. Tales observaciones se realizan en un rango de escalas muy amplio, desde el astronómico al subatómico. La nueva formulación teórica aporta una justificación de las conclusiones obtenidas a partir de las observaciones realizadas, y que no podían ser derivadas desde la ‘teoría clásica’ de las leyes físicas, vigentes hasta dicha fecha.

El coste de la enriquecedora ‘teoría relativista’ fue la necesaria implementación de un formalismo matemático mucho más complejo, para la adecuada descripción de numerosos sistemas y procesos físicos. La ventaja es que en dicha formulación relativista quedaba incluida la precedente ‘formulación clásica’ al menos como caso límite, de tal modo que la nueva teoría podría considerarse como una extensión/generalización de la precedente. Y con el ‘aliciente’ adicional de que las condiciones límite mencionadas corresponden justamente a las del usual tratamiento de la ‘vida cotidiana’, es decir, a escalas intermedias. Como se mencionó inicialmente, emerge la necesidad de la descripción relativista en las escalas extremas, particularmente en los casos atómico y subatómico.

Surge pues el interés por valorar, preferiblemente de forma cuantitativa, la necesidad o no de llevar a cabo una descripción relativista en tales escalas, considerando en particular el nivel de precisión en las medidas de diferentes observables si se opta por la ‘simplificación no-relativista’ frente a la ‘exactitud relativista’. Este es, precisamente, el principal objetivo del presente trabajo, en el caso particular de sistemas hidrogenoides (i.e. con un solo electrón), prestando atención a las propiedades estructurales de la densidad radial obtenida a partir de la función de onda. Trabajos pioneros en esta línea son bien conocidos [1], aunque de carácter cualitativo mediante la comparación ‘visual’ de las densidades.

En concreto se llevarán a cabo diferentes procedimientos comparativos entre las densidades no-relativista y relativista de tales sistemas, obtenidas a partir de las respectivas ecuaciones de Schrödinger y Dirac. Dicho estudio se extiende a:

- dimensionalidad (D) arbitraria;
- estado fundamental y estados excitados (caracterizados por números cuánticos apropiados);
- densidades en los espacios conjugados: posición (r) y momento (p).

Mencionemos que, entre los principales motivos para centrar el estudio en sistemas hidrogenoides, se encuentran: (i) la disponibilidad de expresiones analíticas, en todos los casos recién indicados, para las funciones de onda y las densidades asociadas, así como para los respectivos niveles de energía [1-3], y (ii) la factorización de la densidad total en una parte radial y una angular. Todo ello supone una notable simplificación de cara a la obtención de algunas de las magnitudes bajo estudio.



Si consideramos las densidades radiales obtenidas en los ámbitos relativista (f_R) y no-relativista (f_{NR}), se procederá al uso una diversidad de funcionales de 2 densidades, bien conocidos en el marco de la Teoría de la Información. En forma genérica, considerando un funcional $F(f_R, f_{NR})$ acotado inferior y/o superiormente, el valor extremo se alcanzaría en el supuesto $f_R=f_{NR}$, interpretando los valores tanto más alejados del extremo como los correspondientes a densidades tanto más diferentes entre sí, i.e. como si F fuese una medida de la ‘distancia’ (no matemáticamente estricta) entre f_R y f_{NR} .

Cabe remarcar que, en el pasado, nuestro grupo ha realizado estudios en una línea similar, aunque diferentes del actual en los siguientes aspectos:

- Para sistemas atómicos con 2 o más electrones, se han empleado densidades calculadas numéricamente, al no disponer de expresiones analíticas para las funciones de onda, incluso limitándonos solo al estado fundamental [4].
- En el caso de los sistemas hidrogenoides, en algunos casos se han comparado los valores de funcionales de una sola densidad (e.g. complejidad C) obtenidos para cada uno de los casos relativista/no-relativista [5]. Es decir, se han comparado los valores $C(f_R)$ y $C(f_{NR})$, procedimiento diferente a los comparativos del ‘tipo directo’ aquí considerado mediante funcionales $F(f_R, f_{NR})$.
- Para sistemas hidrogenoides se han calculado algunas magnitudes $F(f_R, f_{NR})$, en particular con las divergencias Jensen-Shannon (JSD) y Jensen-Fisher (JFD), pero exclusivamente para el caso tridimensional [6].
- También en estos sistemas hemos obtenido recientemente expresiones analíticas para el índice de similitud cuántica (QSI) entre estados arbitrarios (para cualquier dimensión y en ambos espacios conjugados), pero restringidas al marco no-relativista [7].
- Con otros propósitos se han aplicado las medidas previas: procesos de ionización atómica (comparando las densidades de neutros e iones) [8,9] o de correlación interelectrónica (densidad 2 cuerpos vs 1 cuerpo) [10].

Objetivos planteados:

El presente estudio supone una extensión de alguno de los mencionados previamente, en concreto el de $F(f_R, f_{NR})$ con $D=3$, en las siguientes direcciones:

- Considerando sistemas de dimensionalidad arbitraria $D>2$ (i.e. no necesariamente tridimensionales).
- Aplicando una mayor diversidad de funcionales, más allá de JSD y JFD. Mencionemos, entre ellos: (i) las divergencias Jensen-Rényi (JRDq) [11] y Jensen-Tsallis (JTDq) [12], generalizaciones monoparamétricas de la previamente empleada JSD (caso particular de las anteriores con $q=1$); y (ii) el índice de similitud QSI [13], y su generalización (QSIq) [14], siendo QSI el caso particular para $q=2$.

La factorización de la densidad $f(\mathbf{r})=f(r)\chi(\Omega)$ en partes radial/angular en el espacio D -dimensional, con idéntica parte angular en las funciones relativista y no-relativista, tiene como principales consecuencias:

- Para funcionales de tipo aditivo, como son las divergencias JSD, JFD y JRDq, su valor en cada caso es la suma de las divergencias radial y angular, siendo nula esta última al compartir las funciones bajo comparación la parte angular. Por tanto, el cálculo de tales medidas no requiere considerar la parte angular. Análogamente sucede con QSI y QSIq, que quedan factorizadas como una similitud radial, y una angular de valor 1.
- No sucede así con JTDq, dado su bien conocido carácter no-aditivo. La comparación de las partes radiales no equivale a la de las densidades totales, sino a la de sus promedios esféricos, como se hace en este trabajo.

Metodología:

1. Diseñar los códigos computacionales necesarios para la obtención de las correspondientes densidades radiales de Schrödinger y de Dirac, así como sus derivadas. En todos los casos, para dimensionalidad y estados arbitrarios.
2. Calcular la divergencia y similitud entre las densidades radiales relativista/no-relativista, para diferentes rangos de q cuando proceda, como medidas de la relevancia de los efectos relativistas en sistemas hidrogenoides.
3. Interpretar los resultados en términos de las principales propiedades estructurales de las densidades, y atendiendo a los valores de los números cuánticos que caracterizan los estados.
4. Comparar con los resultados obtenidos previamente mediante las divergencias JSD y JFD en el caso tridimensional.
5. Establecer la eventual dependencia de los resultados en los autovalores energéticos de las respectivas soluciones.



Bibliografía:

1. V.M. Burke, I.P. Grant, *The effect of relativity on atomic wave functions*. Proc. Phys. Soc., London 90, 297 (1967).
2. H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Systems* (Plenum, New York, 1977).
3. A. Rubinowicz, *Dirac's one-electron problem in momentum representation*. Phys. Rev. 73, 1330 (1948).
4. A.L. Martín, S. López-Rosa, J.C. Angulo, J. Antolín, *Jensen–Shannon and Kullback–Leibler divergences as quantifiers of relativistic effects in neutral atoms*. Chem. Phys. Lett. 635, 75 (2015).
5. P.A. Bouvrie, S. López-Rosa, J.S. Dehesa, *Quantifying Dirac hydrogenic effects via complexity measures*. Phys. Rev. A 86, 012507 (2012).
6. J. Antolín, J.C. Angulo, S. Mulas, S. López-Rosa, *Relativistic global and local divergences in hydrogenic systems: A study in position and momentum spaces*. Phys. Rev. A 90, 042511 (2014).
7. I. López-García, J.C. Angulo, S. López-Rosa, *Similarity among quantum-mechanical states: analysis and applications for central potentials*. J. Phys. A: Math. Theor. 57, 495209 (2024).
8. J. Antolín, J.C. Angulo, *Quantum similarity indices for atomic ionization processes*. Eur. Phys. J. D 46, 21 (2008).
9. S. López-Rosa, J. Antolín, J.C. Angulo, R.O. Esquivel, *Divergence analysis of atomic ionization processes and isoelectronic series*. Phys. Rev. A 80, 012505 (2009).
10. J.C. Angulo, S. López-Rosa, *Mutual information in conjugate spaces for neutral atoms and ions*. Entropy (2022) 24, 233 (2022).
11. J. Burbea, C.R. Rao, *On the convexity of higher order Jensen differences based on entropy functions*. IEEE Trans. Inf. Theory 28, 489 (1982).
12. A. Ben Hamza, *Nonextensive information-theoretic measure for image edge detection*. J. Electron. Imaging 15, 013011 (2006).
13. R. Carbó-Dorca, J. Arnau, L. Leyda, *How similar is a molecule to another? An electron density measure of similarity between two molecular structures*. Int. J. Quantum Chem. 17, 1185 (1980).
14. P.A. Bouvrie, J. Antolín, J.C. Angulo, *Generalized Quantum Similarity Index: Applications in atoms*. Chem. Phys. Lett. 506, 326 (2011).



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

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

Granada, 5 de Junio 2025

Sello del Departamento