baratz | ODA

Métodos analíticos para el tratamiento de potenciales anarmónios en Física Molecular [

Carvajal Zaera, Miguel,
autor

Monografía

El propósito de esta tesis es utilizar dos métodos analíticos para la descripción vibracional de moléculas, que incluyen la naturaleza anarmónica de los sistemas moleculares tanto en el análisis del espectro vibracional como en el de las intensidades de transición.Los dos métodos que se presentan tienen una base matemática y aplicaciones físicas disimiles. El modelo SU(2) forma parte de los llamad os métodos algebraicos, es puramente fenomenológico y hace uso de las técnicas matemáticos de la teoría de grupos. Esta teoría proporciona un conjunto de procedimientos que se utilizan para el ajuste y la predicción del espectro vibracional y para la obtención de autoestados del problema. Su metodología consiste en sustituir la forma de Hamiltoniano vibracional molecular en el espacio de fases, con modos locales descritos por potenciales anarmónicos y acoplados entre sí mediante ciertas interacciones, por un Hamiltoniano expresado en función de los generadores del algebra de SU(2), en el cual es posible reflejar la simetría discreta de la molécula.En cambio, el formalismo de los estados localizados en el espacio de configuración se aplica el análisis de las transiciones vibracionales y vibrónicas. El método consiste en la introducción de una base de autoestados de una variable concreta en el espacio de coordenadas. Esta base se define por una transformación ortogonal apropiada a partir de la base finita de autoestados ligados del Hamiltoniano. Los estados localizados simplifican el cálculo de las integrales de los elementos de matriz de operadores de interés desarrollándolas mediante expresiones analíticas cerradas con un buen grado de aproximación.A pesar de las diferencias entre ambos métodos, el modelo SU(2) y el formalismo de los estados localizados pueden aplicarse de forma combinada en el estudio de moléculas poliatómicas. Con el modelo SU(2) se obtiene el espectro de energías y sus autofunciones, a partir de las cuales y utilizando los estados CLS obtenemos las probabilidades de transición entre distintos estados. Hemos hecho hincapié en esta posibilidad, que refuerza las capacidades complementarias de ambos métodos.Mediante estas nuevas técnicas de cálculo, se mejora la aproximación armónica que ha imperado en la bibliografía frente al uso de potenciales anarmónicos, además de proporcionar resultados más realistas que son válidos incluso para estados a altas energías de excitación.En un intento de resumir brevemente esta tesis puede decirse que este trabajo se centra en el estudio de procedimientos simples que incluyen la naturaleza anarmónica de los sistemas moleculares, tanto en el análisis del espectro vibracional como en el de las intensidades de transición

https://rebiunoda.pro.baratznet.cloud:28443/OpacDiscovery/public/catalog/detail/b2FpOmNlbGVicmF0aW9uOmVzLmJhcmF0ei5yZW4vMjk1MzMzMjE

Título: Métodos analíticos para el tratamiento de potenciales anarmónios en Física Molecular Recurso electrónico] Miguel Carvajal Zaera ; directores José Miguel Arias Carrasco, Joaquín Gómez Camacho, Renato Lemus Casillas

Editorial: [Sevilla] [El autor] 2001

Descripción física: 1 recurso electrónico (198 páginas) 30 cm

Tesis: Tesis Univ. de Sevilla-2001/02

Bibliografía: Bibliogr.:p. 185-192

Materia: Física nuclear- Tesis y disertaciones académicas

Autores: Arias Carrasco, José Miguel, director Lemus Casillas, Renato, director Gómez Camacho, Joaquín José, director

Entidades: Universidad de Sevilla. Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear Universidad de Sevilla. Facultad de Física Universidad de Sevilla. Vicerrectorado de Postgrado y Doctorado

---

Baratz Innovación Documental

- Gran Vía, 59 28013 Madrid
- (+34) 91 456 03 60
- informa@baratz.es