



INTRODUCCIÓN

Jia et al. (2017) propusieron el potencial central mejorado de Pöschl-Teller (1), el cual es una reparametrización del segundo potencial de Pöschl-Teller, cuya ecuación depende de los parámetros moleculares reales de las moléculas diatómicas.

$$V(r) = D_e + D_e \left(\frac{\sinh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\sinh^2 \alpha(r - r_0)} - \frac{\cosh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\cosh^2 \alpha(r - r_0)} \right) \quad (1)$$

Parámetros del potencial:

$$\alpha = \pi c \omega_e \sqrt{\frac{\mu}{2D_e}}, \quad r_0 = r_e - \frac{1}{2\alpha} \coth^{-1} \left(\frac{1}{2\alpha r_e} + \frac{16\pi^4 c^2 \mu^2 r_e^3 \alpha_e \omega_e}{3\alpha h^2} \right)$$

Objetivos: Determinar la ecuación de energía rotacional-vibracional y función de onda radial normalizada del potencial central mejorado de Pöschl-Teller. Además, calcular los niveles de energía de rotación-vibración y funciones de onda radiales de las moléculas diatómicas $O_2^+(X^2\Pi_g)$, $N_2^+(X^2\Sigma_g^+)$ y $Cl_2(X^2\Sigma_g^+)$.

METODOLOGÍA DE TRABAJO

- La ecuación radial de Schrödinger con el potencial central mejorado de Pöschl-Teller.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_{\nu J}(r)}{dr^2} + \left(D_e + D_e \left(\frac{\sinh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\sinh^2 \alpha(r - r_0)} - \frac{\cosh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\cosh^2 \alpha(r - r_0)} \right) + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right) u_{\nu J}(r) = E_{\nu J} u_{\nu J}(r) \quad (2)$$

- Se utilizó primero la aproximación de Pekeris (Pekeris, 1934) para expresar el término centrífugo del potencial efectivo por una expresión la cual es de la misma forma que el potencial central mejorado de Pöschl-Teller. Esta fue obtenida por Eyube et al. (2021).

$$\frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \simeq \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(\frac{d_1}{\sinh^2 \alpha(r - r_0)} + \frac{d_2}{\cosh^2 \alpha(r - r_0)} \right) \quad (3)$$

donde

$$d_1 = \frac{\sinh^3 \alpha(r_e - r_0)}{4\alpha r_e \cosh \alpha(r_e - r_0)} (1 - 2 \sinh^2 \alpha(r_e - r_0)) + \frac{3}{4(\alpha r_e)^2} \sinh^4 \alpha(r_e - r_0)$$

$$d_2 = \frac{\cosh^3 \alpha(r_e - r_0)}{4\alpha r_e \sinh \alpha(r_e - r_0)} (1 + 2 \cosh^2 \alpha(r_e - r_0)) - \frac{3}{4(\alpha r_e)^2} \cosh^4 \alpha(r_e - r_0)$$

- Sustituimos (3) en (2), se obtiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_{\nu J}(r)}{dr^2} + \left(D_e + D_e \left(\frac{\sinh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\sinh^2 \alpha(r - r_0)} - \frac{\cosh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\cosh^2 \alpha(r - r_0)} \right) + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(\frac{d_1}{\sinh^2 \alpha(r - r_0)} + \frac{d_2}{\cosh^2 \alpha(r - r_0)} \right) \right) u_{\nu J}(r) = E_{\nu J} u_{\nu J}(r) \quad (4)$$

- El método de Nikiforov-Uvarov es usada para resolver la ecuación diferencial se segundo orden de tipo hipergeométrica (Nikiforov & Uvarov, 1988).

A la ecuación (4) se aplicó una transformación de coordenadas ($s = \tanh^2 \alpha(r - r_0)$) para reducir a una ecuación diferencial de segundo orden de tipo hipergeométrica generalizada (5).

$$\frac{d^2 u_{\nu J}(s)}{ds^2} + \frac{1 - 3s}{2s(1-s)} \frac{du_{\nu J}(s)}{ds} + \frac{(-\beta_0 s^2 + \beta_1 s - \beta_2)}{4s^2(1-s)^2} u_{\nu J}(s) = 0 \quad (5)$$

donde

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \beta_0 + \beta_2 - \beta_{\nu J} \\ \beta_{\nu J} &= -\frac{2\mu}{\hbar^2 \alpha^2} (E_{\nu J} - D_e) \\ \beta_0 &= \frac{2\mu}{\hbar^2 \alpha^2} D_e \cosh^4 \alpha(r_e - r_0) - \frac{J(J+1)d_2}{r_e^2 \alpha^2} \\ \beta_2 &= \frac{2\mu}{\hbar^2 \alpha^2} D_e \sinh^4 \alpha(r_e - r_0) + \frac{J(J+1)d_1}{r_e^2 \alpha^2} \end{aligned}$$

RESULTADOS

- Ecuación de energía de rotación - vibración con número cuántico de vibración (ν) y número cuántico de rotación (J).

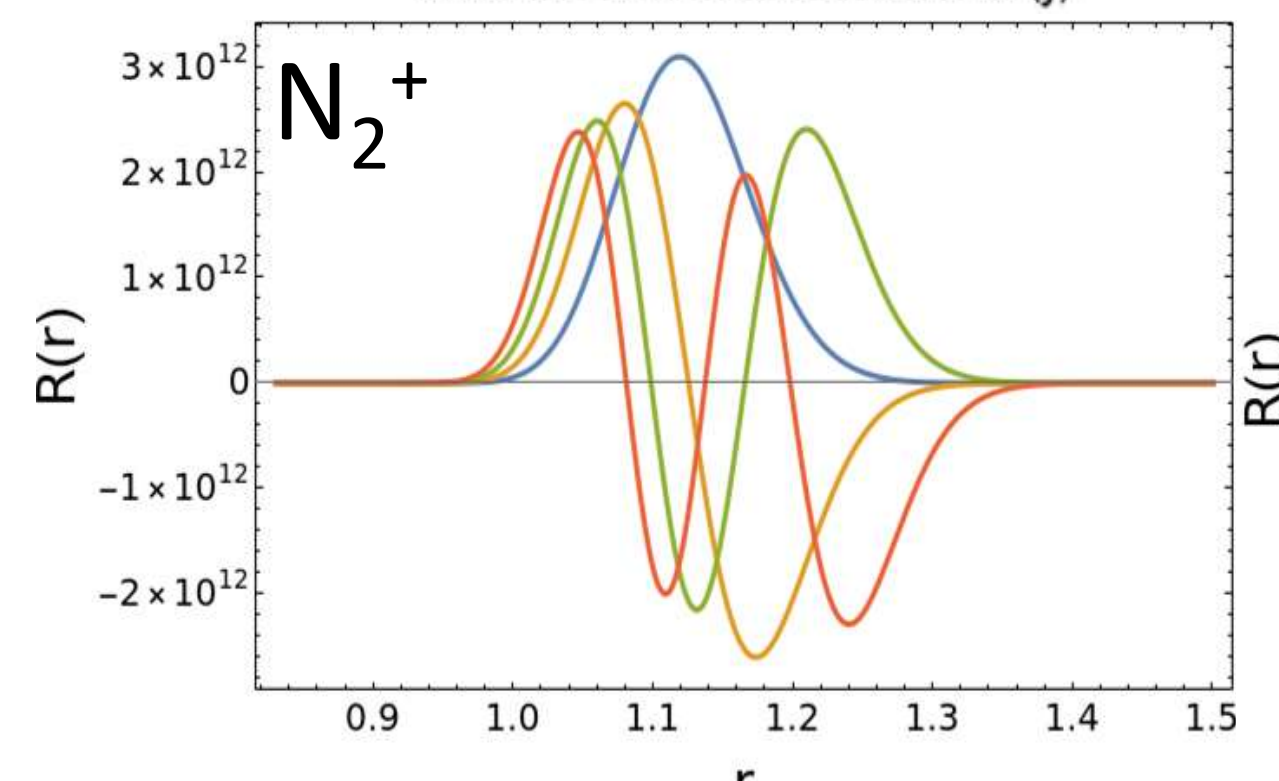
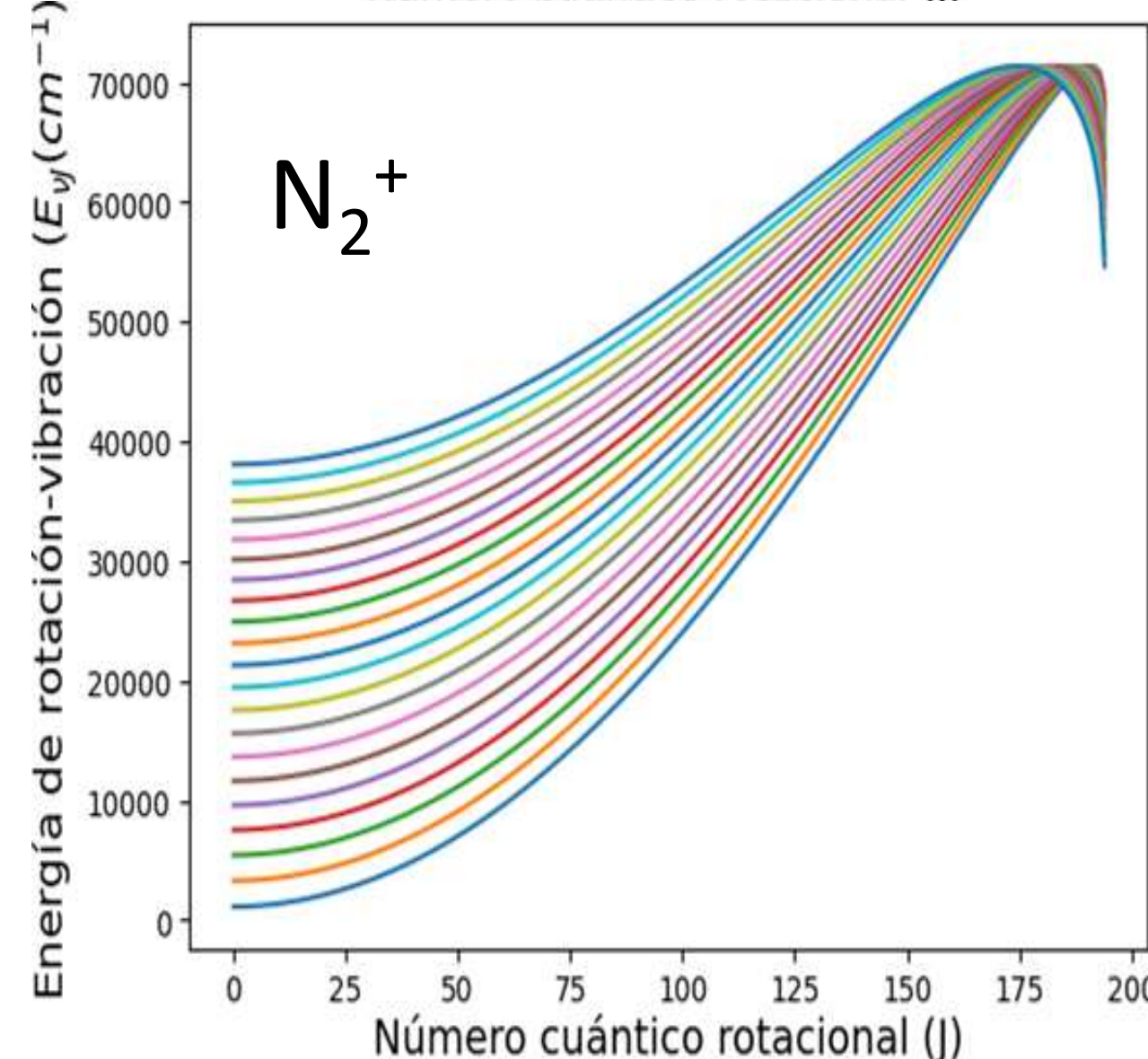
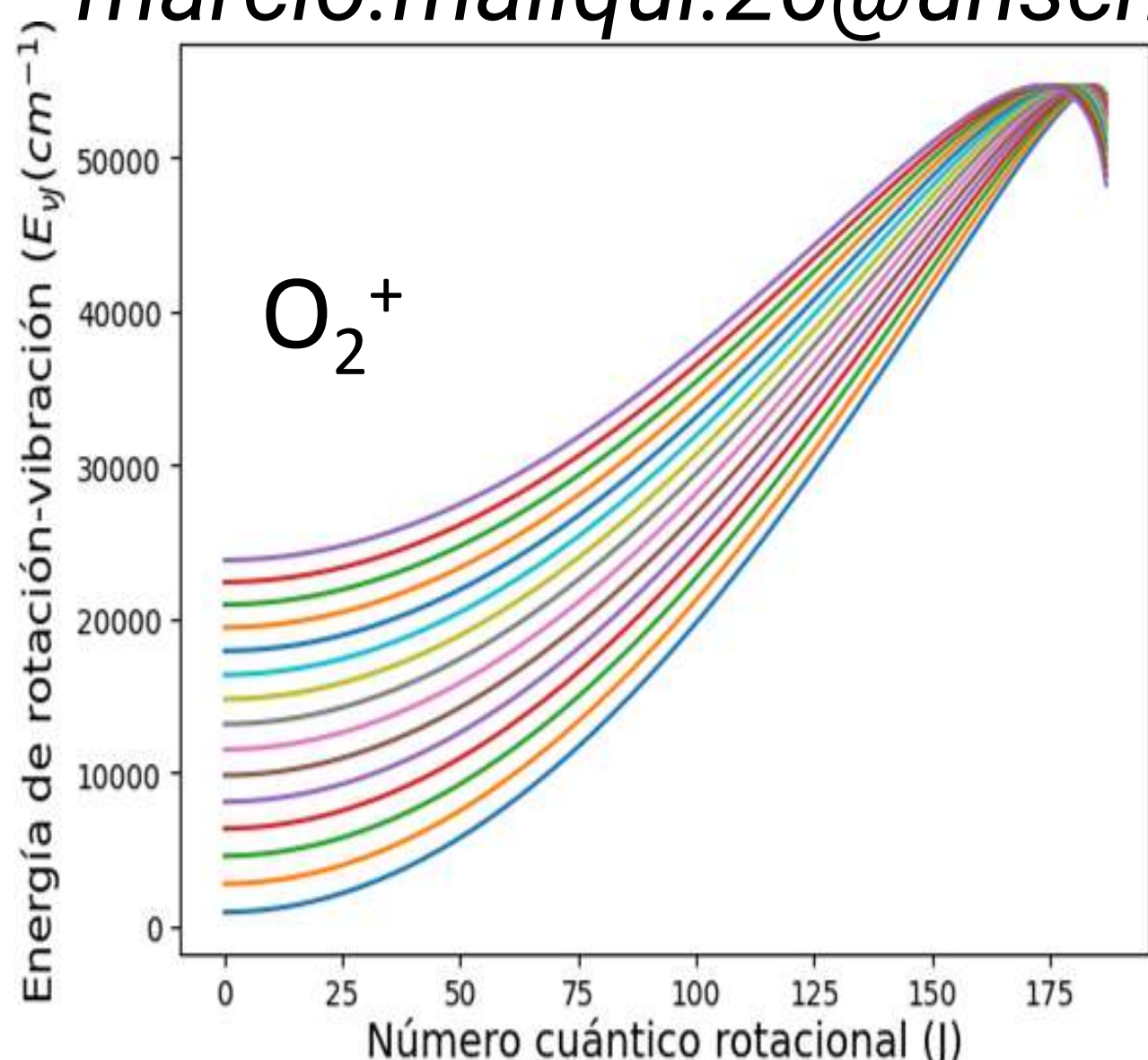
$$E_{\nu J} = D_e - \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu} \left(-1 - 2\nu + \sqrt{\beta_0 + \frac{1}{4}} - \sqrt{\beta_2 + \frac{1}{4}} \right)^2 \quad (6)$$

- Ecuación de la función de onda radial normalizada.

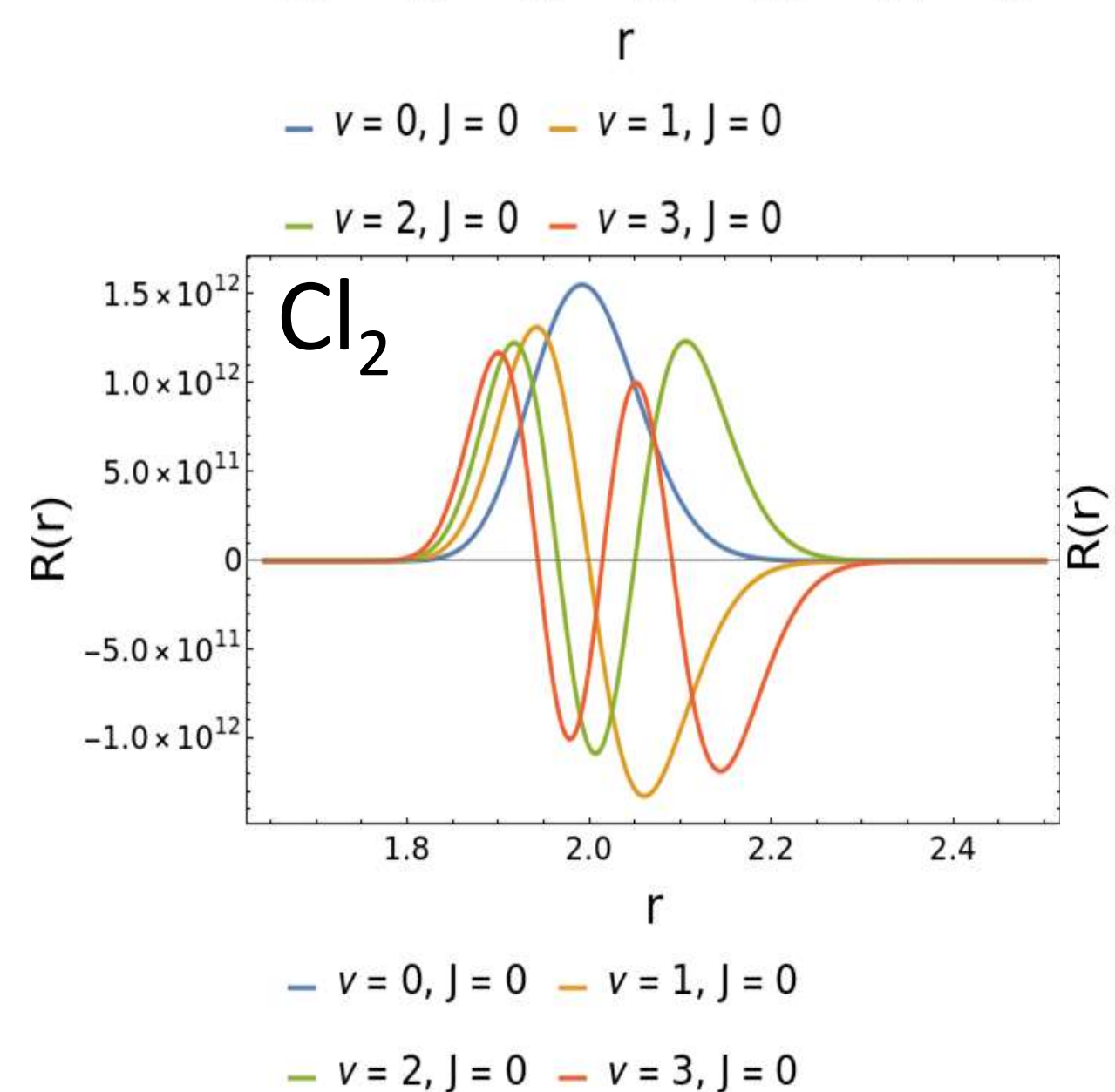
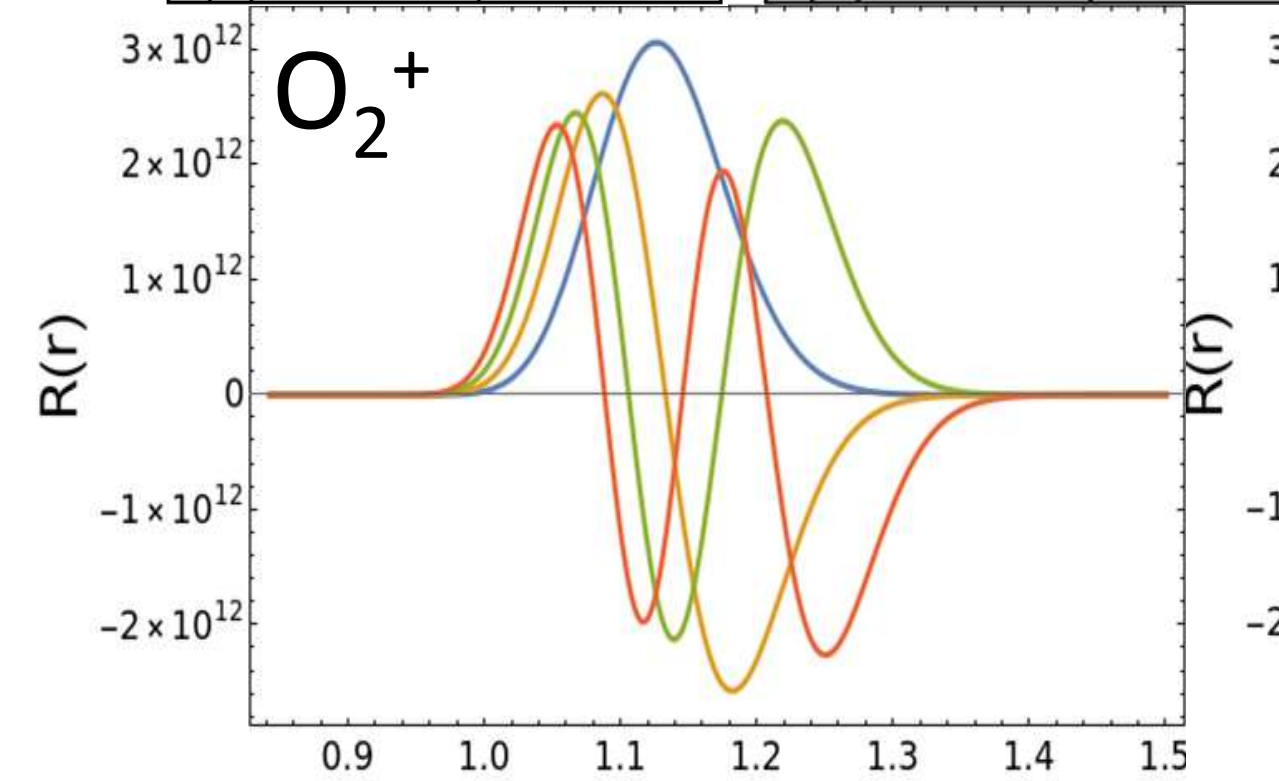
$$R_{\nu J}(r) = \frac{1}{\sqrt{\left(\sum_{k=0}^{\nu} \sum_{m=0}^{\nu} \frac{(-\nu)_k (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + 1)_k}{(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_k k! (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k} \frac{(-\nu)_m (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_m (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + k + 1)_m}{(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m m! (1 + k + \sqrt{\beta_{\nu J}} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m} \right)}} \frac{1}{r} (\tanh^2 \alpha(r - r_0))^{\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{4}} (1 - (\tanh^2 \alpha(r - r_0)))^{\frac{\sqrt{\beta_{\nu J}}}{2}} \sqrt{\left(\frac{\Gamma(\nu + 1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})}{\nu! \Gamma(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})} \right)^2} \beta \left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + 1, \sqrt{\beta_{\nu J}} \right)} P_{\nu}^{(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}, \sqrt{\beta_{\nu J}})} (1 - 2(\tanh^2 \alpha(r - r_0))) \quad (7)$$

Marcio Olwyn Mallqui Pérez

marcio.mallqui.26@unsch.edu.pe

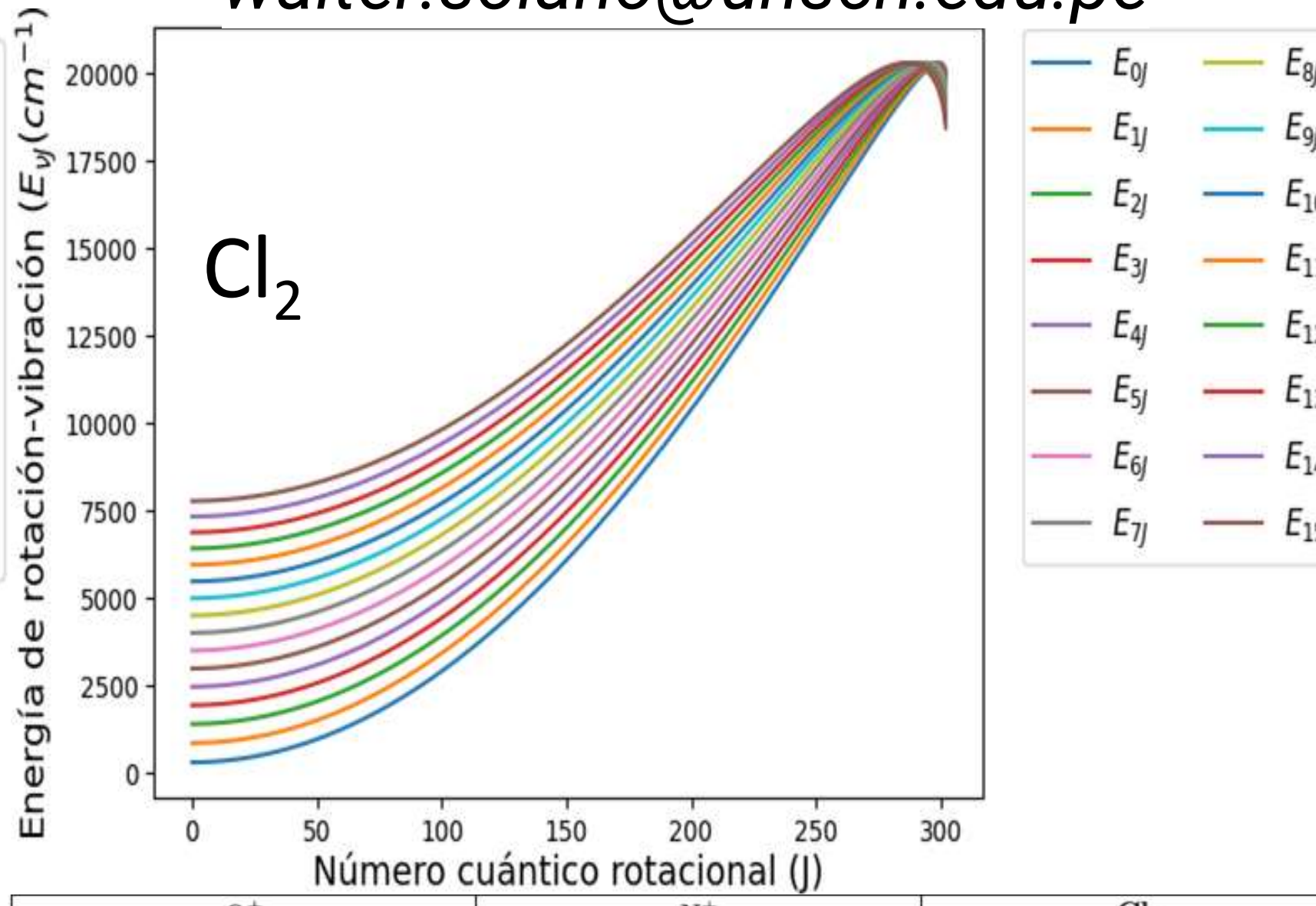


N ₂ ⁺				O ₂ ⁺			
ν	J	r mínima	r máxima	ν	J	r mínima	r máxima
0	0	-	1.12054	0	0	-	1.12779
1	0	1.08023	1.17428	1	0	1.08709	1.18265
2	0	1.06039	1.21014	2	0	1.06719	1.21947
3	0	1.04653	1.24053	3	0	1.05334	1.25076
0	2	-	1.12056	0	2	-	1.12781
1	2	1.08025	1.17429	1	2	1.08711	1.18267
2	2	1.06041	1.21017	2	2	1.06720	1.21949
3	2	1.04655	1.24056	3	2	1.05336	1.25079
0	5	-	1.12064	0	5	-	1.12789
1	5	1.08032	1.17439	1	5	1.08718	1.18277
2	5	1.06048	1.21027	2	5	1.06728	1.21959
3	5	1.04662	1.24066	3	5	1.05343	1.25090

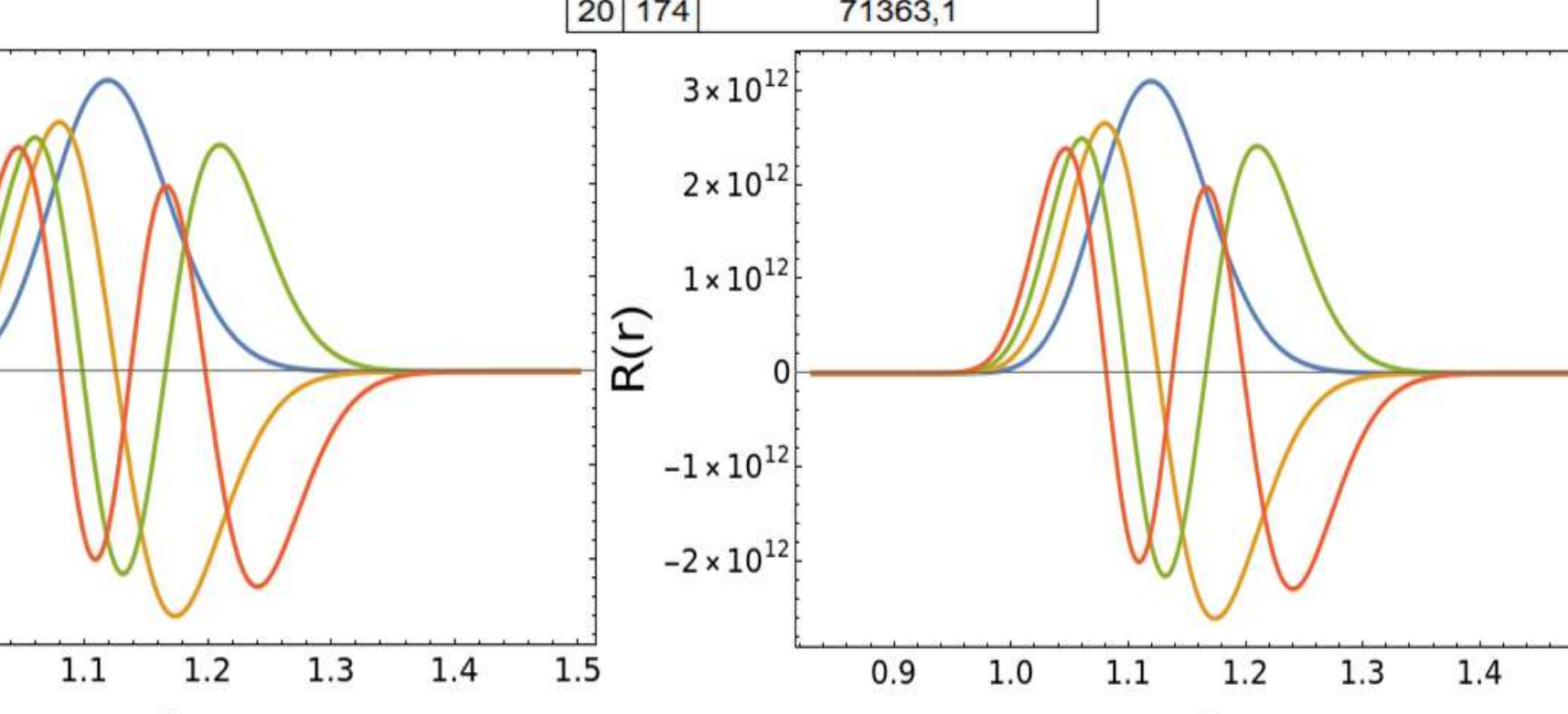


Mg.Walter Mario Solano Reynoso

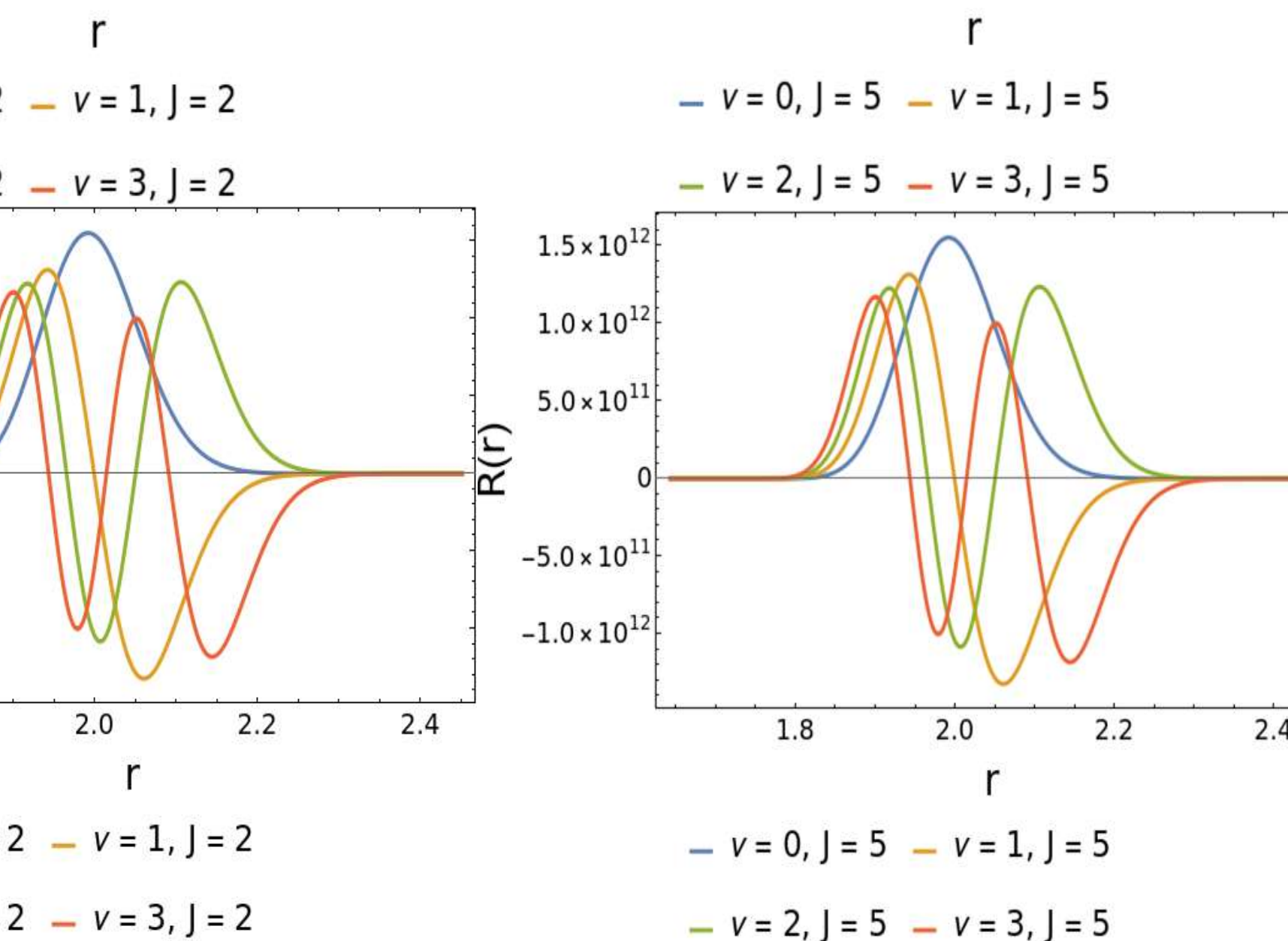
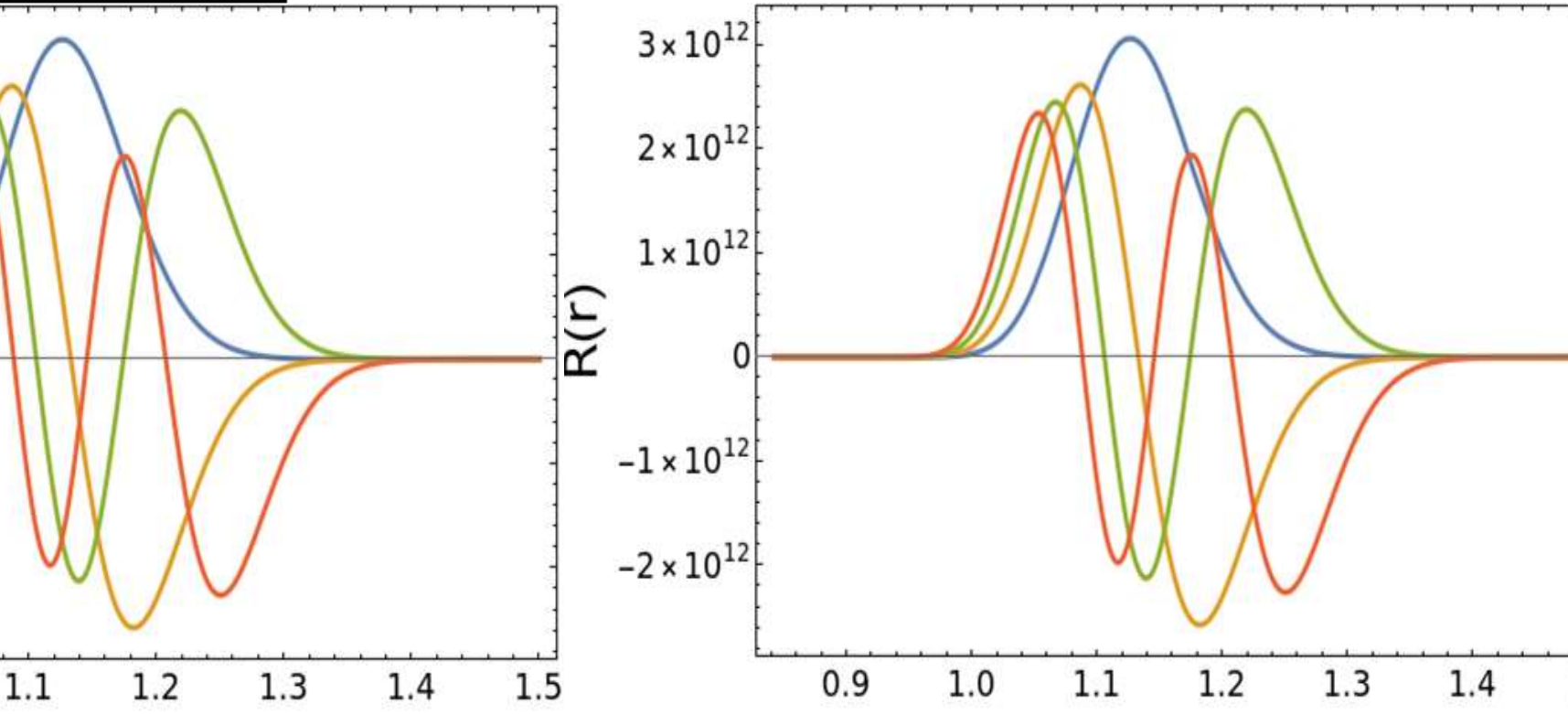
walter.solano@unsch.edu.pe



O ₂ ⁺				N ₂ ⁺				Cl ₂			
ν	J	Energía máxima (cm ⁻¹)		ν	J	Energía máxima (cm ⁻¹)		ν	J	Energía máxima (cm ⁻¹)	
0	185	54682,2		0	191	71364,7		0	299	20273,6	
1	184	54686,4		1	191	71351,9		1	299	20276,4	
2	184	54680,5		2	190	71364,7		2	298	20275,4	
3	183	54688,0		3	190	71352,1		3	298	20275,5	
4	182	54684,0		4	189	71364,8		4	297	20276,4	
5	182	54683,9		5	188	71360,9		5	296	20276,0	
6	181	54687,7		6	188	71360,6		6	295	20275,1	
7	180	54687,7		7	187	71365,0		7	295	20275,8	
8	179	54686,2		8	186	71363,3		8	294	20276,2	
9	178	54684,6		9	185	71359,1		9	293	20276,3	
10	177	54683,6		10	185	71362,1		10	292	20276,4	
11	177	54684,3		11	184	71364,2		11	291	20276,4	
12	176	54684,5		12	183	71364,9		12	290	20276,3	
13	174	54685,1		13	182	71365,0		13	289	20276,1	
14	173	54686,4		14	181	71364,9		14	287	20275,8	
				15	180	71365,0		15	286	20276,3	
				16	179	71365,0					
				17	178	71364,9					
				18	177	71364,5					
				19	176	71363,3					
				20	174	71363,1					



Distancias internucleares (Ångström) mínimas y máximas que puede tomar las molécula, estas fueron obtenidas utilizando las gráficas de densidad de probabilidad radial ($|R(r)|^2$).



CONCLUSIONES

- En las gráficas de energía de rotación-vibración para las moléculas se observó que llega a un máximo valor de energía y luego decrecen, dando lugar a niveles de energía degenerados.
- Las distancias internucleares aumentan a medida que aumenta el número cuántico rotacional (J). Debido a que J está asociado al término centrífugo o llamado potencial repulsivo, haciendo que se separen más los dos átomos que conforman las moléculas diatómicas.

REFERENCIAS

- Jia, C. S., Zhang, L. H., & Peng, X. L. (2017). Improved Pöschl-Teller potential energy model for diatomic molecules. International Journal of Quantum Chemistry, 117(14), e25383. <https://doi.org/10.1002/qua.25383>
- Pekeris, C. L. (1934). The rotation-vibration coupling in diatomic molecules. Physical Review, 45(2), 98-103. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.45.98>
- Eyube, E. S., Bitrus, B. M., & Jabil, Y. Y. (2021). Thermodynamic relations and ro-vibrational energy levels of the improved Pöschl-Teller oscillator for diatomic molecules. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 54(15), 155102. <https://doi.org/10.1088/1361-6455/ac00c5>
- Nikiforov, A., & Uvarov, V. (1988). Special Functions of Mathematical Physics. Birkhäuser, Basel.