



Soluciones de la ecuación radial de Schrödinger utilizando el potencial central mejorado de Pöschl-Teller aplicadas a moléculas diatómicas

Marcio Olwyn Mallqui Pérez

marcio.mallqui.26@unsch.edu.pe

Mg. Walter Mario Solano Reynoso

walter.solano@unsch.edu.pe

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:

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

- El método de Nikiforov-Uvarov es usado para resolver la ecuación diferencial de 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

$$\beta_{\nu J} = -\frac{2\mu}{\hbar^2 \alpha^2} (E_{\nu J} - D_e)$$

$$\beta_0 = \frac{2\mu}{\hbar^2 \alpha^2} D_e \cosh^4 \alpha(r_e - r_0) - \frac{J(J+1)d_2}{r_e^2 \alpha^2}$$

$$\beta_2 = \frac{2\mu}{\hbar^2 \alpha^2} D_e \sinh^4 \alpha(r_e - r_0) + \frac{J(J+1)d_1}{r_e^2 \alpha^2}$$

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.

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

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear ($R(r)$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función de la Distancia internuclear (r Ångström).

Gráficas de Energía de rotación-vibración ($E_{\nu J}$) para O_2^+ , Cl_2 y N_2^+ en función del Número cuántico rotacional (J).

Gráficas de Distancia internuclear (R