

X. DISOCIACIÓN DE MOLÉCULAS, LA ECUACIÓN DE RICCATI Y RUNGE-KUTTA.

Se considera una molécula formada por dos átomos alcalinos (diatómica), la energía del sistema satisface la siguiente ecuación diferencial radial,

$$E\Psi(R) = -\frac{\partial^2\Psi(R)}{\partial R^2} + \left(\frac{J(J+1)}{R^2} + V(R)\right)\Psi(R), \quad (28)$$

donde J es el momento rotacional el cual varía de manera discreta iniciando en 0 y forma una barrera en el potencial radial efectivo de interacción entre los dos núcleos $V(R)$, si dos átomos no ligados logran pasar dicha barrera pueden causar la aparición de estados cuasi-ligados a lo que llamaremos una molécula. La barrera es más alta cuanto mayor sea el número J .

Considere la interacción entre los núcleos mediante el potencial de Morse de la figura 7 dado por,

$$V(R) = D_e \left(1 - e^{-a(R-R_e)}\right)^2, \quad (29)$$

donde D_e es la profundidad del pozo y R_e es la ubicación del mínimo del potencial.

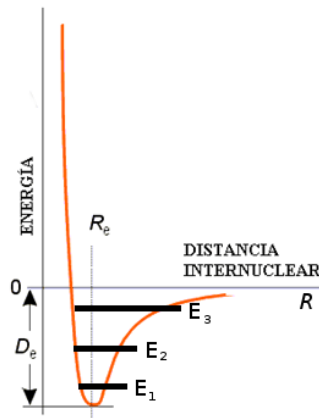


FIG. 7: Diagrama del potencial de Morse y tres energías dentro de la zona del espectro, dos energías E_1 y E_2 donde la molécula se encuentra formada y E_3 donde la molécula tiene mayor probabilidad de disociación.

Ecuación de Riccati: para transformar una ecuación diferencial radial de segundo orden de la forma,

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(x)y(x),$$

en una ecuación de primer orden no lineal, la cual es llamada la ecuación de Riccati, se define,

$$g = \frac{y'(x)}{y(x)}, \quad (30)$$

por tanto la ecuación (28) se escribe de manera,

$$g' + g^2 = f(x). \quad (31)$$

Tenga en cuenta que la función g diverge en $R = 0$ ya que la función $\Psi(R = 0) = 0$, de tal manera que se va a solucionar la ecuación es en la parte exterior del potencial para el caso en que los átomos no alcanzan a sobrepasar la barrera y por tanto no forman una molécula, para esto le sirve la condición de la función de onda $\Psi(R = R_e) = 0$.

1. Pinte el potencial $\left(\frac{J(J+1)}{2R^2} + V(R)\right)$ en función de la coordenada radial R , fijando la profundidad D_e y el mínimo R_e , para diferentes valores de $J > 10$. Haga un zoom en el *hombro* del potencial para apreciar mejor la barrera centrífuga. Haga un multiplot donde muestre las dos gráficas una al lado de la otra: el potencial completo y el zoom a la barrera. Haga una secuencia de fotos tal que pueda realizar una animación del crecimiento de la barrera centrífuga.

2. Tome tres valores para $E = E_3$ tal que se encuentre atravesando la barrera cenetrífuga de potencial y por encima de la barrera centrífuga para un J dado, y solucione el sistema de ecuaciones (30 y 31) usando el método de **Runge-Kutta** RK2 y RK4. Obtenga la función $\Psi(R)$ y gráfíqela como función radial para 3 valores de J , hágalo sistemáticamente creciendo J a lo que llamará que irá creciendo la barrera centrífuga.

Referencias

- [1] M. Berrondo, J. Recamier. *Resonances and antibound states in a Morse potential*. International Journal of Quantum Chemistry, Vol 62, 239-244 (1998).