

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN CRISTÓBAL
DE HUAMANGA**

**FACULTAD DE INGENIERÍA DE MINAS GEOLOGÍA Y CIVIL
ESCUELA PROFESIONAL DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS**



TESIS:

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

Para optar el título profesional de:

**LICENCIADO EN CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS.
ESPECIALIDAD DE FÍSICA**

PRESENTADO POR:

Bach. Marcio Olwyn MALLQUI PEREZ

ASESOR:

Mg. Walter Mario SOLANO REYNOSO

AYACUCHO - PERÚ

2025

Dedicatoria

Se lo dedico a Dios y a mi familia por haberme apoyado durante cada etapa de mi vida y más en los tiempos difíciles.

Agradecimientos

Mi agradecimiento al profesor Walter Mario Solano Reynoso por la asesoría de la presente tesis y a la Escuela Profesional de Ciencias Físico Matemáticas de la Universidad Nacional San Cristóbal de Huamanga.

Índice de figuras

4.1. Gráfica de las energías de vibración calculados ($E_{\nu 0}$) y de las energías vibracionales experimentales RKR (E_{RKR}) para la molécula diatómica de $N_2^+(X^2\Sigma_g^+)$, en función del número cuántico vibracional.	35
4.2. Gráfica del error relativo porcentual de las energías de vibración calculados con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de N_2^+ en función del número cuántico vibracional.	36
4.3. Gráfica de las energías de vibración calculados ($E_{\nu 0}$) y de las energías vibracionales experimentales RKR (E_{RKR}) para la molécula diatómica $O_2^+(X^2\Pi_g)$ en función del número cuántico vibracional.	37
4.4. Gráfica del error relativo porcentual de las energías de vibración calculados con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de $O_2^+(X^2\Pi_g)$ en función del número cuántico vibracional.	38
4.5. Gráfica de las energías de vibración calculados ($E_{\nu 0}$) y de las energías vibracionales experimentales RKR (E_{RKR}) de la molécula diatómica de $Cl_2(X^2\Sigma_g^+)$ en función del número cuántico vibracional.	39
4.6. Gráfica del error relativo porcentual de las energías de vibración calculadas correspondientes a los números cuánticos de 0 hasta 4 con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de $Cl_2(X^2\Sigma_g^+)$ en función del número cuántico vibracional.	40
4.7. Energías de rotación-vibración de la molécula de $O_2^+(X^2\Pi_g)$ en función del número cuántico rotacional (J).	41
4.8. Energías de rotación-vibración de la molécula de $N_2^+(X^2\Sigma_g^+)$ en función del número cuántico rotacional (J).	42

4.9. Gráficas de las energías de rotación-vibración de la molécula de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$) en función del número cuántico rotacional (J).	43
4.10. Funciones de onda radiales y densidades de probabilidad radial vibracionales del PCMPT para la molécula diatómica N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)	44
4.11. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 2$ del PCMPT para la molécula diatómica N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)	45
4.12. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 5$ del PCMPT para la molécula diatómica N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)	45
4.13. Funciones de onda radiales y densidades de probabilidad radial vibracionales del PCMPT para la molécula diatómica O_2^+ ($X^2\Pi_g$)	46
4.14. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 2$ del PCMPT para la molécula diatómica O_2^+ ($X^2\Pi_g$)	47
4.15. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 5$ del PCMPT para la molécula diatómica O_2^+ ($X^2\Pi_g$)	47
4.16. Funciones de onda radiales y densidades de probabilidad radial vibracionales del PCMPT para la molécula diatómica Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)	48
4.17. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 2$ del PCMPT para la molécula diatómica Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)	49
4.18. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 5$ del PCMPT para la molécula diatómica Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)	49

Índice de cuadros

2.1. Los parámetros moleculares experimentales de las moléculas usadas en este estudio	13
3.1. <i>Las energías vibracionales experimentales RKR (E_{RKR}) para la molécula de N_2^+ en el estado $X^2\Sigma_g^+$ y O_2^+ en el estado $X^2\Pi_g$:</i>	32
3.2. <i>Las energías vibracionales RKR (E_{RKR}) para la molécula de Cl_2 en el estado $X^2\Sigma_g^+$.</i>	32
4.1. Los valores de los parámetros del potencial central mejorado de Pöschl-Teller para las moléculas N_2^+ , O_2^+ y Cl_2	34
4.2. Las energías de vibración calculados para la molécula N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$).	35
4.3. Las energías de vibración calculados para la molécula O_2^+ ($X^2\Pi_g$).	37
4.4. Las energías de vibración calculados para la molécula Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)	39
4.5. Las energías de rotación-vibración máximas de cada una de las gráficas.	41
4.6. Las energías de rotación-vibración máximas de cada una de las gráficas.	42
4.7. Las energías de rotación-vibración máximas de cada una de las gráficas.	43

Resumen

En esta tesis se presenta la solución del potencial central mejorado de Pöschl-Teller, el cual modela el potencial de las interacciones diatómicas, habiendo empleado la aproximación de Pekeris para el término centrífugo y el método de Nikiforov- Uvarov para resolver la ecuación radial de Schrödinger con el potencial central mejorado de Pöschl - Teller, obteniendo los autovalores de la energía de rotación- vibración y la función de onda radial. El interés de aplicar la aproximación de Pekeris al término centrífugo para resolver el potencial mejorado de Pöschl-Teller radica en la no existencia de soluciones exactas cuando el número cuántico rotacional es distinto de cero ($J \neq 0$). El análisis de los resultados de la energía de rotación-vibración, mostró el aumento de la energía hasta un cierto máximo y luego el decrecimiento, observándose la existencia de niveles de energía degenerados. Los resultados numéricos de las energías vibracionales son próximas a los datos experimentales obtenidas por el método RKR (Rydberg-Klein-Rees). El comportamiento de las funciones de onda radial obtenidas como parte de las soluciones de la ecuación radial, muestran nodos en la medida en que crece el número cuántico vibracional, cuyas densidades de probabilidad correspondientes tienen sus picos para ciertas distancias internucleares, indicando posiciones en las cuales se encuentra a la molécula con mayor probabilidad. La consideración exclusiva de los estados vibracionales de la molécula O_2^+ , desde el nivel 0 hasta el 14, proporciona resultados próximos a los datos experimentales, siempre que se utilicen los parámetros moleculares correspondientes al estado electrónico fundamental. De forma similar, se obtienen buenas concordancias para N_2^+ en el rango de niveles vibracionales de 0 a 20, y para la molécula $Cl_2 (X^2\Sigma_g^+)$ de 0 a 4.

Abstract

In this thesis we present the solution of the improved Pöschl-Teller central potential, which models the potential of diatomic interactions, having employed the Pekeris approximation for the centrifugal term and the Nikiforov- Uvarov method for solving the radial Schrödinger equation with the improved Pöschl-Teller central potential, obtaining the eigenvalues of the rotation-vibrational energy and the radial wave function. The interest of applying the Pekeris approximation to the centrifugal term to solve the improved Pöschl-Teller potential lies in the non-existence of exact solutions when the quantum number is exact solutions when the rotational quantum number is nonzero ($J \neq 0$). The analysis of the results of the rotation-vibration energy shows the increase of the energy up to a certain maximum and then the decrease, observing the existence of degenerated energy levels. the existence of degenerate energy levels. The numerical results of the vibrational energies are close to the experimental data obtained by the RKR method (Rydberg, RKR). RKR (Rydberg-Klein-Rees) method. The behavior of the radial wave functions obtained as part of the solutions of the radial equation, show nodes as the vibrational quantum number increases, whose corresponding probability densities have their peaks for certain internuclear distances, indicating positions in which the molecule is most likely to be found. The application of only vibrational states for the molecule of O_2^+ from vibrational quantum number 0 to 14 are close in the case of the corresponding experimental molecular parameters of the fundamental molecular electronic state. Similarly, one has for N_2^+ from 0 to 20, and for the N_2^+ molecule from 0 to 20. Cl_2 molecule from 0 to 4.

Índice general

Dedicatoria	II
Agradecimientos	III
Índice de figuras	IV
Índice de cuadros	VI
Resumen	VII
Abstract	VIII
I. Introducción	1
II. Marco teórico	4
2.1. La ecuación radial de Schrödinger para un potencial molecular diatómico	4
2.2. Nivel de energía de rotación - vibración ($E_{\nu,J}$)	6
2.3. Niveles de energía degenerados	7
2.4. Función de onda radial ($R(r)$)	7
2.5. Potencial central mejorado de Pöschl-Teller (PCMPT)	8
2.6. Moléculas diatómicas	9
2.6.1. Estados electrónicos de las moléculas diatómicas	9
2.6.2. Símbolos de los términos moleculares	9
2.6.3. Parámetros moleculares experimentales	11
2.6.4. Descripción de las moléculas diatómicas a estudiar:	12

2.7. Aproximación de Pekeris al término centrífugo	13
2.8. Método de Nikiforov-Uvarov (N-U)	15
2.9. Desviación porcentual absoluta media (MAPD)	21
III. Material y métodos	22
3.1. Solución del potencial central mejorado de Pöschl-Teller.	22
3.2. Obtención de valores de energía para las moléculas N_2^+ , O_2^+ y Cl_2	30
3.3. Obtención de las funciones de onda radiales y densidades de probabilidad radiales para las moléculas N_2^+ , O_2^+ y Cl_2	31
3.4. Datos de otros trabajos usados para las discusiones del presente trabajo	31
3.5. Herramientas utilizadas	33
IV. Resultados y Discusiones	34
4.1. Los α y r_0 calculados para las moléculas diatómicas N_2^+ , O_2^+ y Cl_2	34
4.2. Las energías de vibración de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)	34
4.3. Las energías de vibración de O_2^+ ($X^2\Pi_g$)	37
4.4. Las energías de vibración de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)	39
4.5. Energía de rotación-vibración de la molécula de O_2^+ ($X^2\Pi_g$)	41
4.6. Energías de rotación-vibración de la molécula de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)	42
4.7. Energías de rotación-vibración de la molécula de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)	43
4.8. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para la molécula de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)	44
4.9. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para la molécula de O_2^+ ($X^2\Pi_g$)	46
4.10. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para la molécula de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)	48
V. Conclusiones y Recomendaciones	50
5.1. Conclusiones	50
5.2. Recomendaciones	50
Bibliografía	52

VI. Anexo	59
6.1. Código Python y Wolfram Mathematica	59

Capítulo I

Introducción

La búsqueda de las soluciones exactas de la ecuación radial de Schrödinger para modelos de potenciales moleculares es un área de investigación muy amplia desde el nacimiento de la mecánica cuántica (Stanek, 2011). Se han planteado diferentes potenciales que se viene trabajando desde los años 30 del siglo XX, como el potencial de Morse (Morse, 1929), potencial de Rosen–Morse (Rosen & Morse, 1932), potencial de Frost–Musulin (Frost & Musulin, 1954), potencial de Tietz (Tietz, 1963) y los potenciales de Schiöberg (Schiöberg, 1986), estos potenciales modelan la interacción de dos átomos que conforman una molécula diatómica.

Uno de los potenciales al que se dedicó bastante atención fue el de Pöschl-Teller, que modela la interacción de dos átomos que conforma una molécula diatómica (Pöschl & Teller, 1933). Barut et al. (1987), resolvieron la ecuación radial de Schrödinger con el segundo potencial de Pöschl-Teller, obteniendo las relaciones de las energías y funciones de onda de estados ligados y de esparcimiento (scattering) de ondas s . Posteriormente, Ma y Xu (2005), resolvieron la ecuación radial de Schrödinger con el primero y segundo potencial de Pöschl-Teller, obteniendo los niveles de energía de los estados ligados de ondas s . Dong (2009), utilizando el potencial de Pöschl-Teller de segundo tipo modificado, obtuvo los niveles de energía de onda s . En el mismo año, Agboola (2009) resolvió la ecuación de Schrödinger D-dimensional con el potencial modificado de Pöschl-Teller y también obtuvo algunos valores esperados. Para ello utilizó una aproximación al término centrífugo, el método de Nikiforov-Uvarov y el teorema de Feynman-Hellmann, encontrando la ecuación de energía y función de onda normalizada de estados ligados, como también algunos valores esperados. Chen et al. (2012), resolvieron la ecuación de Schrödinger D-dimensional con el potencial

modificado de Pöschl-Teller, utilizando un nuevo esquema de aproximación para el término centrífugo, obteniendo las soluciones analíticas de los estados de esparcimiento (scattering). You et al. (2013) resolvieron la ecuación radial de Schrödinger con el segundo potencial de Pöschl-Teller, utilizando para ello un esquema de aproximación mejorado al término centrífugo y concluyendo que se obtuvieron las energías y funciones de onda de estados ligados y de esparcimiento (scattering).

En recientes años se han publicado versiones mejoradas de potenciales centrales para moléculas diatómicas al utilizar la energía de disociación y la distancia internuclear de equilibrio para una molécula diatómica con parámetros explícitos (Sun et al., 2013). Estas versiones mejoradas de modelos de potenciales centrales diatómicos han despertado mucho interés (Liu & Jia, 2022), debido a que estos son convenientes para aplicaciones prácticas, ya que pueden modelar las curvas de potencial de interacción interatómica y permitir calcular los niveles de energía rotacionales-vibracionales de las moléculas diatómicas (Jia et al., 2017). Una de estas versiones mejoradas de potencial, es el potencial central mejorado de Pöschl-Teller que fue propuesto por Jia et al. (2017). El término “mejorado” se refiere a una reparametrización del potencial original de Pöschl-Teller, de modo que sus parámetros matemáticos coincidan con los parámetros moleculares reales. Este potencial central fue utilizado en pocos trabajos.

En una publicación reciente Eyube et al. (2021), resolvieron la ecuación radial de Schrödinger con el potencial mejorado de Pöschl-Teller, utilizando el esquema de la aproximación tipo Pekeris para modelar el término centrífugo del potencial efectivo, la regla de cuantización mejorada y técnicas de solución específicas para resolver la ecuación, obteniendo la expresión de la energía rotacional-vibracional y la expresión de la función de onda radial no normalizadas. También obtuvieron las energías vibracionales de la molécula de RbH ($X^1\Sigma^+$) que concuerdan con los datos experimentales de Rydberg-Klein-Rees (RKR). Posteriormente, Liu y Jia (2022) resolvieron la ecuación radial de Schrödinger con el potencial mejorado de Pöschl-Teller, utilizando el esquema de aproximación mejorada de Greene-Aldrich y el enfoque de invarianza de forma supersimétrica, obteniendo la expresión de la energía rotacional-vibracional. Además, calcularon los niveles vibracionales de las moléculas diatómicas de CO ($X^1\Sigma^+$) y dímero $^7\text{Li}_2$ ($a^3\Sigma_u^+$).

Los objetivos de la presente tesis fueron, determinar las funciones de onda radiales y niveles de energía rotacionales-vibracionales utilizando el potencial central mejorado de Pöschl-Teller en la

ecuación radial de Schrödinger de manera analítica, y calcular los niveles de energía rotacionales-vibracionales y funciones de onda radiales de las moléculas diatómicas O_2^+ , N_2^+ y Cl_2 , a partir de los resultados analíticos obtenidos para el potencial central mejorado de Pöschl–Teller. Solamente las energías vibracionales de las moléculas diatómicas se compararon con datos experimentales publicados en Singh y Rai (1966) y Coxon (1971). También se han conseguido normalizar analíticamente las funciones de onda, cuyo aporte puede permitir determinar valores esperados de observables físicos.

Capítulo II

Marco teórico

2.1. La ecuación radial de Schrödinger para un potencial molecular diatómico

La ecuación de Schrödinger para un potencial central molecular ($V(r)$) (Ikhdaïr, 2009), es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r)\right) \psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (2.1)$$

donde μ es la masa reducida una molécula diatómica, r es la separación internuclear y \hbar es la constante de Planck reducida (Tang et al., 2014).

Utilizando el operador Laplaciano (∇^2) en coordenadas esféricas, obtenemos:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi(r, \theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V(r)) \psi(r, \theta, \varphi) = 0 \quad (2.2)$$

dado que el hamiltoniano es la suma de una parte radial y otra angular, se sabe que, en general, las soluciones son separables como producto de una parte radial y otra angular cuyas soluciones son los armónicos esféricos ($Y_{Jm}(\theta, \varphi)$) (Zettili, 2009).

$$\psi_{\nu, J, m}(r, \theta, \varphi) = R_{\nu J}(r) Y_{Jm}(\theta, \varphi) \quad (2.3)$$

Sustituyendo la ecuación (2.3) en (2.2) y ordenándolo, se tiene:

$$Y_{Jm}(\theta, \varphi) \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{\nu J}(r)}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E_{\nu J} - V(r)) R_{\nu J}(r) \right) \\ = -\frac{R_{\nu J}(r)}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y_{Jm}(\theta, \varphi) \quad (2.4)$$

\widehat{L} es el momento angular orbital (Zettili, 2009).

$$\widehat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (2.5)$$

La ecuación (2.4) toma la forma:

$$Y_{Jm}(\theta, \varphi) \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{\nu J}(r)}{dr} \right) + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E_{\nu J} - V(r)) R_{\nu J}(r) \right) = \frac{R_{\nu J}(r)}{\hbar^2 r^2} \widehat{L}^2 Y_{Jm}(\theta, \varphi) \quad (2.6)$$

\widehat{L}^2 no depende de r , este commuta con el $V(r)$ y la energía cinética radial, así que conmuta con el Hamiltoniano. Además \widehat{L}_z conmuta con \widehat{L}^2 , por lo tanto el Hamiltoniano, \widehat{L}_z y \widehat{L}^2 conmutan mutuamente, con lo que tienen eigenfunciones comunes (Zettili, 2009). Las eigenfunciones de \widehat{L}_z y \widehat{L}^2 son los armónicos esféricos $Y_{Jm}(\theta, \varphi)$.

$$\widehat{L}_z Y_{Jm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{Jm}(\theta, \varphi) \quad (2.7)$$

$$\widehat{L}^2 Y_{Jm}(\theta, \varphi) = J(J+1)\hbar^2 Y_{Jm}(\theta, \varphi) \quad (2.8)$$

Sustituyendo (2.8) en la ecuación (2.6) y ordenándolo, obtenemos :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{\nu J}(r)}{dr} \right) + V(r) R_{\nu J}(r) + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} R_{\nu J}(r) = E_{\nu J} R_{\nu J}(r) \quad (2.9)$$

La ecuación (2.9), es conocida como la ecuación radial de Schrödinger para un potencial molecular diatómico (Tezcan et al., 2008).

Para simplificar la ecuación diferencial (2.9), se introduce una función $u_{\nu J}(r)$:

$$u_{\nu J}(r) = r R_{\nu J}(r) \quad (2.10)$$

Por lo tanto la ecuación (2.9), toma la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_{\nu J}(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu r^2} \right] u_{\nu J}(r) = E_{\nu J} u_{\nu J}(r) \quad (2.11)$$

o

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_{\nu J}(r)}{dr^2} + V_{eff} u_{\nu J}(r) = E_{\nu J} u_{\nu J}(r) \quad (2.12)$$

donde

$$V_{eff} = V(r) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu r^2} \quad (2.13)$$

lo cual es conocido como el potencial efectivo, donde $\frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu r^2}$ es denominado el término centrífugo del potencial efectivo (Eyube et al., 2021) o potencial repulsivo (Zettili, 2009) y $V(r)$ es el potencial central molecular. Además, $E_{\nu J}$ es el nivel de energía de rotación-vibración con número cuántico de vibración (ν) y número cuántico de rotación (J), siendo $R_{\nu J}(r)$ la función de onda radial (Eyube et al., 2023).

La ecuación (2.11) se llama a veces ecuación radial de Schrödinger (Alonso & Finn, 1971). Por lo tanto, la ecuación (2.11) lo consideramos como nuestra ecuación radial de Schrödinger que necesita ser resuelta.

2.2. Nivel de energía de rotación - vibración ($E_{\nu J}$)

$Y_{Jm}(\theta, \phi)$ son los armónicos esféricos que es una función en coordenadas angulares. Las variaciones de Θ y ϕ manteniendo a r constante, hace que haya cambios en la orientación espacial de la molécula diatómica, lo cual establece un movimiento rotacional. Los números cuánticos J y m son números cuánticos rotacionales. Por otro lado, los cambios en la coordenada r son cambios en la distancia internuclear, lo cual establece un movimiento vibracional y el número cuántico ν es el número cuántico vibracional (Levine, 2001). Por lo tanto, $E_{\nu J}$ simboliza el nivel de energía de rotación - vibración con número cuántico de vibración ν y número cuántico de rotación J para una molécula diatómica (Liu & Jia, 2022).

2.3. Niveles de energía degenerados

Los niveles de energía son degenerados cuando varias funciones de onda tienen la misma energía (Engel & Reid, 2006).

Teniendo en cuenta que para un J dado, hay $2J + 1$ valores de m , debido a que m toma valores que cae en el intervalo de $-J$ a J (Levine, 2004), esto es,

$$m = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J \quad (2.14)$$

Así, la energía $E_{\nu J}$ es $2J + 1$ veces degenerado. Debido a que para un J dado, hay $2J + 1$ diferentes funciones de onda $\psi_{\nu, J, m}$ las cuales les corresponde la misma energía (Zettili, 2009).

2.4. Función de onda radial ($R(r)$)

Para describir el estado de un sistema en mecánica cuántica se utiliza la función de onda, que contiene toda la información que es posible conocer acerca del sistema (Levine, 2001). La información está dada por $|rR(r)|^2 dr$, que es la probabilidad radial de que los átomos de una molécula diatómica estén separados por una distancia r y $r + dr$ (Gordillo-Vázquez & Kunc, 1998), donde la distancia entre los dos átomos se llama distancia internuclear (Rey Lara, 2021) y $|rR_{\nu J}(r)|^2$ es la densidad de probabilidad radial (Serway et al., 2006). Así, los átomos de una molécula diatómica deberán estar separados una distancia en donde la onda de la gráfica de densidad de probabilidad radial ($|rR_{\nu J}(r)|^2$) tenga una amplitud apreciable (Eisberg & Resnick, 2000). Según De La Peña (2014), para que la función de onda sea físicamente aceptable, debe cumplir las siguientes condiciones:

1. La $R(r)$ y sus derivadas deben ser continuas.
2. La $R(r)$ debe tener un único valor en cada punto.
3. La $R(r)$ debe ser finita en todo punto y de cuadrado integrable.

La condición de normalización (Serway et al., 2006), es:

$$\int_0^{\infty} |rR(r)|^2 dr = 1 \quad (2.15)$$

donde la integral se toma sobre todos los valores posibles de r (Serway et al., 2006).

2.5. Potencial central mejorado de Pöschl-Teller (PCMPT)

En 1933, Pöschl y Teller propusieron dos potenciales analíticos que modelan la interacción diatómica (Pöschl & Teller, 1933), sus ecuaciones son:

$$V_1(r) = \frac{h^2\alpha^2}{8\pi^2\mu} \left[\frac{\kappa(\kappa-1)}{\sin^2 \alpha(r-r_o)} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2 \alpha(r-r_o)} \right], \quad 0 \leq \alpha(r-r_o) < \frac{\pi}{2} \quad (2.16)$$

$$V_2(r) = \frac{h^2\alpha^2}{8\pi^2\mu} \left[\frac{\kappa(\kappa-1)}{\sinh^2 \alpha(r-r_o)} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2 \alpha(r-r_o)} \right], \quad 0 \leq \alpha(r-r_o) < \infty \quad (2.17)$$

donde μ es la masa reducida de una molécula diatómica, r es la separación internuclear, h es la constante de Planck y κ, λ, α y r_o son cuatro parámetros reales ajustables (Jia et al., 2017), teniendo la condición $\kappa > 1$ y $\lambda > 1$ (Pöschl & Teller, 1933). La ecuación (2.16) es conocida como el primer potencial de Pöschl-Teller (Ma & Xu, 2005) y la ecuación (2.17) como el segundo potencial de Pöschl-Teller (You et al., 2013).

Un potencial para sistemas diatómicos debe satisfacer tres criterios, los cuales son:

$$\left. \frac{dV(r)}{dr} \right|_{r=r_e} = 0, \quad V(\infty) - V(r_e) = D_e \quad \text{y} \quad \left. \frac{d^2V(r)}{dr^2} \right|_{r=r_e} = K_e = 4\pi^2\mu c^2\omega_e^2 \quad (2.18)$$

Se realizó el procedimiento matemático utilizando la ecuación (2.17) y los tres criterios dados por las ecuaciones (2.18), los detalles se encuentran en el artículo de Jia et al. (2017). Se obtuvo la expresión del potencial central mejorado de Pöschl-Teller (PCMPT) para moléculas diatómicas (Jia et al., 2017), su ecuación es

$$V(r) = D_e + D_e \left(\frac{\sinh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\sinh^2 \alpha(r - r_0)} - \frac{\cosh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\cosh^2 \alpha(r - r_0)} \right) \quad (2.19)$$

La palabra “mejorado” significa una reparametrización del potencial original de Pöschl-Teller (2.17), cuyos parámetros matemáticos coincide con los parámetros moleculares reales (Jia et al.,

2017), que incluye la energía de disociación (D_e), frecuencia angular de equilibrio (ω_e), la distancia internuclear de equilibrio (r_e) y la constante de acoplamiento de rotación - vibración (α_e) para moléculas diatómicas (Jia et al., 2017). Estos parámetros moleculares son determinados experimentalmente por mediciones espectroscópicas (Jia et al., 2017).

Donde α y r_0 son los parámetros del potencial (2.19), dados como:

$$\alpha = \pi c \omega_e \sqrt{\frac{\mu}{2D_e}} \quad (2.20)$$

donde c es la velocidad de la luz.

Eyube et al. (2021) encontró la ecuación correcta para r_0 , dado como:

$$r_0 = r_e - \frac{1}{2\alpha} \coth^{-1} \left(\frac{1}{2\alpha r_e} + \frac{16\pi^4 c^2 \mu^2 r_e^3 \alpha_e \omega_e}{3\alpha h^2} \right) \quad (2.21)$$

2.6. Moléculas diatómicas

2.6.1. Estados electrónicos de las moléculas diatómicas

Existen diferentes estados electrónicos para la misma molécula diatómica, debido a que la distancia de separación o distancia internuclear entre los dos átomos pueden tomar distintos valores, resolviendo para cada una de ellas la ecuación de Schrödinger electrónica y obtener un conjunto de funciones de onda electrónica con sus respectivas energías electrónicas, donde cada miembro de ese conjunto corresponde a un estado electrónico molecular diferente (Levine, 2001). Así, los estados electrónicos de las moléculas muestran cómo están distribuidos los electrones alrededor de los núcleos, cuando los núcleos de la molécula se encuentran a una cierta distancia.

Los estados electrónicos de las moléculas son descritas por los símbolos de los términos moleculares.

2.6.2. Símbolos de los términos moleculares

$\Lambda = |M_L|$, es el valor absoluto de la proyección del momento angular orbital total de los electrones sobre el eje internuclear (Bransden & Joachain, 1983). Se designa el estado electrónico de

las moléculas diatómicas con los símbolos $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \dots$, según que $\Lambda = 0, 1, 2, 3, \dots$ (Alonso & Finn, 1971).

La reflexión en un plano que pasa por el eje internuclear cambia el signo del momento angular orbital respecto de este eje. Los estados electrónicos con valores $\Lambda \neq 0$ (esos son Π, Δ, Φ, \dots) son doblemente degenerados. A cada valor de energía le corresponde dos estados que difieren en la dirección de la proyección del momento angular orbital sobre el eje internuclear. Para el caso $\Lambda = 0$ los estados electrónicos Σ son no degenerados (Landau & Lifshitz, 1983), dividiendo este estado en dos estados Σ^+ y Σ^- .

Para distinguir Σ^+ y Σ^- se requiere considerar la función de onda electrónica. En una molécula diatómica cualquier plano que contenga al eje internuclear es un plano de simetría y la función de onda electrónica del estado Σ permanece inalterado cuando se refleja a través de dicho plano, cuyo caso es el estado Σ^+ , o si cambia de signo, es el estado Σ^- (Brown & Carrington, 2003).

Una molécula diatómica formada por dos núcleos iguales tiene un centro de simetría que coincide con el punto medio del segmento que une a los dos núcleos (Landau & Lifshitz, 1983). La distribución de probabilidad de un electrón debe ser la misma en puntos situados simétricamente respecto al centro de simetría, por lo tanto la función de onda de un electrón en puntos simétricos tiene el mismo valor o tiene el mismo valor pero signos opuestos (Alonso & Finn, 1971). Entonces, podemos clasificar los estados electrónicos según su paridad: Los estados pares (*g*), cuya función de onda no cambia de signo al cambiar las coordenadas de los electrones con respecto al centro de simetría, y los estados impares (*u*), cuya función de onda cambia de signo al cambiar el signo de las coordenadas de los electrones con respecto al centro de simetría (Landau & Lifshitz, 1983). Los subíndices *g* o *u* se añaden a los estados electrónicos, teniendo para las moléculas diatómicas homonucleares los estados $\Sigma_g, \Sigma_u, \Pi_g, \Pi_u, \dots$ (Bransden & Joachain, 1983).

S es el espín resultante de los electrones de la molécula, cuando *S* es distinto de cero se produce la degeneración asociada a las direcciones posibles del espín total, cuya multiplicidad es $2S + 1$. Entonces, el símbolo de un estado electrónico es $^{2S+1}\Lambda$ (Alonso & Finn, 1971).

El estado fundamental es a menudo etiquetado con el símbolo *X* (Bransden & Joachain, 1983). En la mayoría de los casos, esto es un estado $X^1\Sigma_g^+$ para una molécula homonuclear y un estado $X^1\Sigma^+$ para la molécula heteronuclear (Bransden & Joachain, 1983).

2.6.3. Parámetros moleculares experimentales

1. Masa reducida μ .- La masa reducida es la masa que tiene una cuasipartícula (De La Peña, 2014). La cuasipartícula es un fenómeno físico que se da en sistemas de partículas que interactúan, donde los grupo de partículas empiezan a comportarse como partículas individuales (FLEET, 2020).

Su ecuación es:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (2.22)$$

donde m_1 y m_2 son las masas atómicas de los dos átomos, respectivamente.

2. Energía de disociación (D_e).- Es la energía necesaria para separar a los dos átomos que forman la molécula diatómica (Alonso & Finn, 1971).
3. Distancia internuclear de equilibrio (r_e).- Es la distancia entre los núcleos en la que fuerza de atracción y repulsión se encuentran equilibradas (Fernández Rodríguez & Ríos, 1998).
4. Frecuencia angular de equilibrio (ω_e).- Mide qué tan rápido oscilan los átomos de la molécula diatómica en torno de su posición de equilibrio (Serway & Jewett, 2008), siendo su ecuación

$$\omega_e = \left(\frac{k_e}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{E_e''(r_e)}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.23)$$

donde k_e es la constante de fuerza de equilibrio y E_e'' la segunda derivada de la energía electrónica (Levine, 2004).

5. Constante de acoplamiento de rotación - vibración (α_e).- Esto explica la interacción entre el movimiento rotacional y vibracional de la molécula, ya que α_e se encuentra dentro de la ecuación relacionada a la constante rotacional media (B_ν) con número cuántico vibracional ν (Levine, 2004), siendo su ecuación:

$$B_\nu = B_e - \alpha_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \quad (2.24)$$

donde α_e es un número positivo mucho menor que la constante rotacional de equilibrio (B_e)

(Levine, 2004), con ecuación:

$$B_e = \frac{h}{8\pi^2 I_e}, \text{ donde } I_e = \mu r_e^2 \text{ es el momento de inercia de equilibrio} \quad (2.25)$$

2.6.4. Descripción de las moléculas diatómicas a estudiar:

Dinitrógeno ionizado (N_2^+)

La emisión de N_2^+ son producidas por el bombardeo de electrones en el aire y las explosiones nucleares a gran altitud (Andreazza & Singh, 1997). Algunos cometas presentan líneas de emisión de N_2^+ en sus espectros ópticos, uno de ellos es C/2016 R2 que presenta una alta abundancia de N_2^+ reportada en el año de 2018, con 12 líneas de emisión brillantes (Rousselot et al., 2022).

El N_2^+ en el estado electrónico fundamental $X^2\Sigma_g^+$, tiene los siguientes parámetros moleculares experimentales:

$$\mu(g) = 1,171 \times 10^{-23} \text{ (Kunc \& Gordillo-Vázquez, 1997)}$$

$$D_e(cm^{-1}) = 71365 \text{ (Kunc \& Gordillo-Vázquez, 1997)}$$

$$\alpha_e(cm^{-1}) = 0,02 \text{ (Singh \& Rai, 1966)}$$

$$\omega_e(cm^{-1}) = 2207,19 \text{ (Singh \& Rai, 1966)}$$

$$r_e(\text{Å}) = 1,116 \text{ (Singh \& Rai, 1966)}$$

Dioxígeno ionizado (O_2^+)

Se producen una cantidad significativa de iones O_2^+ debido a los rayos X tenues que ionizan a grupos de CO_2 formados por unas pocas 100 moléculas en la atmósfera de Marte. Además, las observaciones muestran que O_2^+ es la especie iónica dominante en la baja ionosfera de Marte (Smita et al., 2022).

El O_2^+ en el estado electrónico fundamental $X^2\Pi_g$, tiene los siguientes parámetros moleculares experimentales:

$$\mu(g) = 1,337 \times 10^{-23} \text{ (Kunc \& Gordillo-Vázquez, 1997)}$$

$$D_e(cm^{-1}) = 54688 \text{ (Kunc \& Gordillo-Vázquez, 1997)}$$

$$\alpha_e(cm^{-1}) = 0,01984 \text{ (Singh \& Rai, 1966)}$$

$$\omega_e(cm^{-1}) = 1876,40 \text{ (Singh \& Rai, 1966)}$$

$$r_e(\text{\AA}) = 1,123 \text{ (Singh \& Rai, 1966)}$$

Cloro diatómico (Cl₂)

El Cloro diatómico (Cl₂) es un producto químico importante en los desinfectantes, la purificación del agua y la lejía, pero también es muy tóxico, ya que provoca intoxicaciones graves cuando se inhala (Deng & Zhang, 2016).

El Cl₂ en el estado electrónico fundamental $X^2\Sigma_g^+$, tiene los siguientes parámetros moleculares experimentales:

$$\mu(\text{amu}) = 17,4844 \text{ (Kaur \& Mahajan, 1999)}$$

$$D_e(\text{cm}^{-1}) = 20276,440 \text{ (Kaur \& Mahajan, 1999)}$$

$$\alpha_e(\text{cm}^{-1}) = 1,516 \times 10^{-3} \text{ (Kaur \& Mahajan, 1999)}$$

$$\omega_e(\text{cm}^{-1}) = 559,751 \text{ (Kaur \& Mahajan, 1999)}$$

$$r_e(\text{\AA}) = 1,9872 \text{ (Kaur \& Mahajan, 1999)}$$

Para facilitar el uso de los parámetros moleculares experimentales de cada una de las moléculas a estudiar, se escribe de forma compacta en la siguiente tabla 2.1:

Tabla 2.1. Los parámetros moleculares experimentales de las moléculas usadas en este estudio

Moléculas	Estado	Parámetros Moleculares				
		μ	$D_e(\text{cm}^{-1})$	$r_e(\text{\AA})$	$\omega_e(\text{cm}^{-1})$	$\alpha_e(\text{cm}^{-1})$
N ₂ ⁺	$X^2\Sigma_g^+$	$1,171 \times 10^{-23}$ (g)	71365	1,116	2207,19	0,02
O ₂ ⁺	$X^2\Pi_g$	$1,337 \times 10^{-23}$ (g)	54688	1,123	1876,40	0,01984
Cl ₂	$X^2\Sigma_g^+$	17,4844 (uma)	20276,440	1,9872	559,751	$1,516 \times 10^{-3}$

2.7. Aproximación de Pekeris al término centrífugo

El término centrífugo del potencial efectivo se escribe como:

$$V_c = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \quad (2.26)$$

La idea básica del modelo de aproximación de Pekeris (Pekeris, 1934) es expresar el término centrífugo por una expresión equivalente (\tilde{V}_c), la cual prácticamente tiene la misma forma que la

energía potencial del sistema (Eyube et al., 2021).

Eyube et al. (2021) obtuvo la aproximación de Pekeris al término centrífugo del potencial efectivo para el potencial central mejorado de Pöschl-Teller, siguiendo los siguientes pasos:

Se realiza la expansión en series de Taylor de la ecuación (2.26) alrededor de $r = r_e$ o equivalentemente alrededor del punto $x = 0$, donde $x = \frac{r}{r_e} - 1$, obteniendo

$$V_c = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} (1+x)^{-2} \simeq \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} (1 - 2x + 3x^2 + O(x^3)) \quad (2.27)$$

El siguiente paso consiste en considerar la forma equivalente de la ecuación (2.27); en este caso, se adopta la forma del potencial mejorado de Pöschl-Teller para representar a \tilde{V}_c .

$$\tilde{V}_c = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(d_0 + \frac{d_1}{\sinh^2 \alpha(r-r_o)} + \frac{d_2}{\cosh^2 \alpha(r-r_o)} \right) \quad (2.28)$$

donde d_0 , d_1 y d_2 son coeficientes constantes a determinar.

Se utiliza la transformación $x = \frac{r}{r_e} - 1$ y para simplificar se asume $a = \alpha(r_e - r_o)$ y $b = \alpha r_e$, para expresar la ecuación (2.28) en términos de la variable x como:

$$\tilde{V}_c = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} (d_0 + d_1 h_1(x) + d_2 h_2(x)) \quad (2.29)$$

Se realiza la expansión en series de Taylor de las funciones $h_1(x) = \sinh^{-2}(a + b x)$ y $h_2(x) = \cosh^{-2}(a + b x)$ alrededor del punto $x = 0$, obteniendo:

$$h_1(x) = \sinh^{-2}(a + b x) \cong \frac{1}{\sinh^2 a} - \frac{2b \cosh a}{\sinh^3 a} x + \frac{b^2(1 + 2 \cosh^2 a)}{\sinh^4 a} x^2 + O(x^3) \quad (2.30)$$

$$h_2(x) = \cosh^{-2}(a + b x) \cong \frac{1}{\cosh^2 a} - \frac{2b \sinh a}{\cosh^3 a} x - \frac{b^2(1 - 2 \sinh^2 a)}{\cosh^4 a} x^2 + O(x^3) \quad (2.31)$$

Se sustituyen las ecuaciones (2.30) y (2.31) en (2.29):

$$\tilde{V}_c = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left\{ \begin{aligned} & d_0 + \frac{1}{\sinh^2 a} d_1 + \frac{1}{\cosh^2 a} d_2 - 2b \left(\frac{\cosh a}{\sinh^3 a} d_1 + \frac{\sinh a}{\cosh^3 a} d_2 \right) x \\ & + b^2 \left(\frac{1+2 \cosh^2 a}{\sinh^4 a} d_1 - \frac{1-2 \sinh^2 a}{\cosh^4 a} d_2 \right) x^2 + O(x^3) \end{aligned} \right\}. \quad (2.32)$$

Se comparan las ecuaciones (2.27) y (2.32), lo que lleva a

$$d_0 + \frac{1}{\sinh^2 a} d_1 + \frac{1}{\cosh^2 a} d_2 = 1 \quad (2.33)$$

$$\frac{\cosh a}{\sinh^3 a} d_1 + \frac{\sinh a}{\cosh^3 a} d_2 = \frac{1}{b} \quad (2.34)$$

$$\frac{1 + 2 \cosh^2 a}{\sinh^4 a} d_1 - \frac{1 - 2 \sinh^2 a}{\cosh^4 a} d_2 = \frac{3}{b^2} \quad (2.35)$$

Se resuelve las tres ecuaciones, para obtener:

$$d_0 = 0 \quad (2.36)$$

$$d_1 = \frac{\sinh^3 a}{4b \cosh a} (1 - 2 \sinh^2 a) + \frac{3}{4b^2} \sinh^4 a \quad (2.37)$$

$$d_2 = \frac{\cosh^3 a}{4b \sinh a} (1 + 2 \cosh^2 a) - \frac{3}{4b^2} \cosh^4 a \quad (2.38)$$

Por lo tanto, la aproximación al término centrífugo resulta:

$$V_c = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \simeq \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(\frac{d_1}{\sinh^2 \alpha(r-r_o)} + \frac{d_2}{\cosh^2 \alpha(r-r_o)} \right) \quad (2.39)$$

donde:

$$d_1 = \frac{\sinh^3 \alpha(r_e - r_0)}{4\alpha r_e \cosh \alpha(r_e - r_0)} (1 - 2 \sinh^2 \alpha(r_e - r_0)) + \frac{3}{4(\alpha r_e)^2} \sinh^4 \alpha(r_e - r_0) \quad (2.40)$$

$$d_2 = \frac{\cosh^3 \alpha(r_e - r_0)}{4\alpha r_e \sinh \alpha(r_e - r_0)} (1 + 2 \cosh^2 \alpha(r_e - r_0)) - \frac{3}{4(\alpha r_e)^2} \cosh^4 \alpha(r_e - r_0) \quad (2.41)$$

2.8. Método de Nikiforov-Uvarov (N-U)

El método de Nikiforov - Uvarov es usada para resolver la ecuación diferencial de segundo orden de la forma (Nikiforov & Uvarov, 1988):

$$u'' + \frac{\tilde{\tau}(s)}{\sigma(s)} u' + \frac{\tilde{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)} u = 0 \quad (2.42)$$

donde $\sigma(s)$ y $\tilde{\sigma}(s)$ son polinomios de grado máximo 2 y $\tilde{\tau}(s)$ es un polinomio de grado máximo 1. Siempre se supone que s y los coeficientes $\sigma(s)$, $\tilde{\sigma}(s)$ y $\tilde{\tau}(s)$ pueden tener cualquier valor real o complejo.

El objetivo es reducir la ecuación (2.42) a una forma más simple tomando $u(s) = \phi(s)y(s)$ y eligiendo una $\phi(s)$ apropiada, entonces, se tiene:

$$y'' + \left(2\frac{\phi'}{\phi} + \frac{\tilde{\tau}}{\sigma}\right)y' + \left(\frac{\phi''}{\phi} + \frac{\phi'\tilde{\tau}}{\phi\sigma} + \frac{\tilde{\sigma}}{\sigma^2}\right)y = 0 \quad (2.43)$$

Para evitar que la ecuación (2.43) sea más complicada que la ecuación original (2.42), se supone que el coeficiente de y' tiene la forma $\tau(s)/\sigma(s)$, donde $\tau(s)$ es un polinomio de grado máximo 1. Entonces, para la función $\phi(s)$ se obtiene la ecuación:

$$\frac{\phi(s)'}{\phi(s)} = \frac{\pi(s)}{\sigma(s)}, \quad (2.44)$$

donde

$$\pi(s) = \frac{1}{2}(\tau(s) - \tilde{\tau}(s)) \quad (2.45)$$

$\pi(s)$ es un polinomio de grado máximo 1.

Ya que $\frac{\phi''}{\phi} = \left(\frac{\phi'}{\phi}\right)' + \left(\frac{\phi'}{\phi}\right)^2 = \left(\frac{\pi}{\sigma}\right)' + \left(\frac{\pi}{\sigma}\right)^2$, la ecuación (2.43) toma la forma

$$y'' + \frac{\tau(s)}{\sigma(s)}y' + \frac{\bar{\sigma}(s)}{\sigma^2(s)}y = 0 \quad (2.46)$$

donde:

$$\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s) \quad (2.47)$$

y

$$\bar{\sigma}(s) = \tilde{\sigma}(s) + \pi^2(s) + \pi(s)[\tilde{\tau}(s) - \sigma'(s)] + \pi'(s)\sigma(s) \quad (2.48)$$

de modo que $\tau(s)$ y $\bar{\sigma}(s)$ son polinomios de grado máximo 1 y 2, respectivamente. En pocas palabras, las transformaciones inducidas por la sustitución de $u(s) = \phi(s)y(s)$, han hecho que la ecuación (2.46) tenga la forma de la ecuación original (2.42).

Seleccionando al polinomio $\pi(s)$ más apropiado, se puede reducir (2.46) a la forma más simple,

asumiendo que

$$\bar{\sigma}(s) = \lambda\sigma(s) \quad (2.49)$$

donde λ es una constante. La ecuación (2.46) se reduce a la forma

$$\sigma(s)y'' + \tau(s)y' + \lambda y = 0 \quad (2.50)$$

Se denomina la ecuación (2.50) como ecuación de tipo hipergeométrica y a sus soluciones como funciones de tipo hipergeométrica, en consecuencia, es natural llamar a la ecuación (2.42) como ecuación del tipo hipergeométrico generalizado.

Para determinar $\pi(s)$ y λ , se reescribe (2.49) en la forma

$$\pi^2 + (\tilde{\tau} - \sigma')\pi + \tilde{\sigma} - k\sigma = 0$$

donde

$$k = \lambda - \pi'(s) \quad (2.51)$$

Si se asume que k es conocida, al resolver la ecuación cuadrática de $\pi(s)$, se obtiene:

$$\pi(s) = \frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma' - \tilde{\tau}}{2}\right)^2 - \tilde{\sigma} + k\sigma} \quad (2.52)$$

Dado que $\pi(s)$ es un polinomio de grado 1, el discriminante dentro de la raíz cuadrada debe ser cero, tal que la expresión sea un cuadrado perfecto y, por tanto, su raíz exacta. Por lo tanto, se obtendrá una ecuación cuadrática para k .

Al determinar k obtenemos π , después ϕ , τ y λ . Debido a las diferentes elecciones de k y dada la ambigüedad de los signos en la ecuación de $\pi(s)$, se puede reducir de muchas maneras la ecuación original a la ecuación del tipo hipergeométrico (2.50).

La transformación nos permite reemplazar el estudio de la ecuación original por el estudio de la ecuación simple (2.50).

Pasamos al estudio de las propiedades de las soluciones de la ecuación de tipo hipergeométrico (2.50).

Se prueba que todas las derivadas de funciones de tipo hipergeométrico son también de tipo hiper-

geométrico. Se deriva la ecuación (2.50) y se denota $v_1(s) = y'(s)$, con lo que

$$\sigma(s)v_1'' + \tau(s)v_1' + \mu_1v_1 = 0 \quad (2.53)$$

donde:

$$\tau_1(s) = \tau(s) + \sigma'(s) \text{ y } \mu_1 = \lambda + \tau'(s)$$

$\tau_1(s)$ es un polinomio de grado no mayor que 1 y μ_1 es independiente de s , la ecuación (2.53) es del tipo hipergeométrica. La inversa es también cierta: toda solución de la ecuación (2.53) con $\lambda \neq 0$ es la derivada de alguna solución de (2.50).

Sea $v_1(s)$ una solución de (2.53). Si $v_1(s)$ es la derivada de alguna solución de $y(s)$ de (2.50), estas funciones deberán estar relacionadas de la forma siguiente:

$$y(s) = -\frac{1}{\lambda} (\sigma(s)v_1' + \tau(s)v_1)$$

Derivando,

$$\lambda y' = -[\sigma(s)v_1'' + \tau_1(s)v_1' + \tau'(s)v_1] = \lambda v_1$$

Por inducción, derivando n veces la ecuación (2.50), se puede obtener una ecuación de tipo hipergeométrico haciendo $v_n(s) = y^{(n)}(s)$:

$$\sigma(s)v_n'' + \tau_n(s)v_n' + \mu_n v_n = 0 \quad (2.54)$$

donde:

$$\tau_n(s) = \tau(s) + n\sigma'(s)$$

y

$$\mu_n = \lambda + n\tau'(s) + \frac{n(n-1)}{2}\sigma''(s)$$

Cualquier solución de la ecuación (2.54) para $\mu_k \neq 0$ ($k = 0, 1, \dots, n-1$), puede representarse en la forma $v_n(s) = y^n(s)$, donde $y(s)$ es alguna solución de la ecuación (2.50).

Esta propiedad permite construir una familia de soluciones particulares de la ecuación (2.50) correspondientes a determinados valores de λ . En efecto, cuando $\mu_n = 0$, en la ecuación (2.54) se

tiene la solución particular $v_n(s) = \text{constante}$. Dado que $v_n(s) = y^{(n)}(s)$, significa que cuando

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2}\sigma''$$

la ecuación del tipo hipergeométrico tiene una solución particular de la forma $y(s) = y_n(s)$, que es un polinomio de grado n . Se llamarán a tales soluciones polinomios de tipo hipergeométrico. Los polinomios $y_n(s)$, son las ecuaciones más sencillas de (2.50).

Para obtener la expresión explícita de los polinomios $y_n(s)$, multiplicamos las ecuaciones (2.50) y (2.54) por las funciones apropiadas $\rho(s)$ y $\rho_n(s)$, tal que pueden ser escritas como:

$$(\sigma\rho y')' + \lambda\rho y = 0 \quad (2.55)$$

$$(\sigma\rho_n v_n')' + \mu_n\rho_n v_n = 0 \quad (2.56)$$

Aquí, las funciones $\rho(s)$ y $\rho_n(s)$ cumplen las ecuaciones diferenciales

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho \quad (2.57)$$

$$(\sigma\rho_n)' = \tau_n\rho_n \quad (2.58)$$

Utilizando la expresión explícita de $\tau_n(s)$, podemos establecer la relación entre las funciones $\rho_n(s)$ y $\rho_0(s) = \rho(s)$.

$$\frac{(\sigma\rho_n)'}{\rho_n} = \tau + n\sigma' = \frac{(\sigma\rho)'}{\rho} + n\sigma'$$

donde

$$\frac{\rho_n'}{\rho_n} = \frac{\rho'}{\rho} + \frac{n\sigma'}{\sigma}$$

Resolviendo para $\rho_n(s)$, se tiene

$$\rho_n(s) = \sigma^n(s)\rho(s), \quad (n = 0, 1, \dots) \quad (2.59)$$

Dado que $\sigma\rho_n = \rho_{n+1}$ y $v'_n(s) = v_{n+1}(s)$, se puede reescribir la ecuación (2.56) en la forma

$$\rho_n v_n = -\frac{1}{\mu_n} (\rho_{n+1} v_{n+1})'$$

Cuando $m < n$, se obtiene progresivamente:

$$\rho_m v_m = -\frac{1}{\mu_m} (\rho_{m+1} v_{m+1})' = \left(-\frac{1}{\mu_m}\right) \left(-\frac{1}{\mu_{m+1}}\right) (\rho_{m+2} v_{m+2})'' = \dots = \frac{A_m}{A_n} (\rho_n v_n)^{n-m}$$

donde

$$A_n = (-1)^n \prod_{k=0}^{n-1} \mu_k, \quad A_0 = 1 \quad (2.60)$$

Si $y(s)$ es un polinomio de grado n , es decir, $y = y_n(s)$, entonces

$$v_m(s) = y_n^{(m)}(s), \quad v_n(s) = y^{(n)}(s) = \text{constante}$$

se obtiene para $y_n^{(m)}(s)$ la expresión siguiente:

$$y_n^{(m)}(s) = \frac{A_{mn} B_n}{\rho_m(s)} [\rho_n(s)]^{n-m} \quad (2.61)$$

donde:

$$A_{mn} = A_m(\lambda)|_{\lambda=\lambda_n} \text{ y } B_n = \frac{1}{A_{nn}} y_n^{(n)}(s) \quad (2.62)$$

Cuando $m = 0$, se puede expresar explícitamente los polinomios de tipo hipergeométrico $y_n(s)$ como una fórmula de Rodrigues

$$y_n(s) = \frac{B_n}{\rho(s)} \frac{d^n}{ds^n} [\sigma^n(s) \rho(s)] \quad (n = 0, 1, \dots) \quad (2.63)$$

habiendo encontrado $y_n(s)$ y $\phi(s)$, se tiene la función $u(s)$; B_n es un factor de normalización.

Estas soluciones $y_n(s)$ corresponden a los valores

$$\lambda = \lambda_n = -n\tau' - \frac{n(n-1)}{2} \sigma'' \quad (n = 0, 1, \dots) \quad (2.64)$$

Por otro lado, la derivada de $\tau(s)$ tiene que ser negativa.

2.9. Desviación porcentual absoluta media (MAPD)

La desviación porcentual absoluta media (MAPD) (Yanar et al., 2020), es utilizada para evaluar cuantitativamente la precisión de los datos de energía calculados con los datos experimentales. La ecuación es:

$$MAPD = \frac{100}{N} \sum_{n=0}^N \left| \frac{E_{RKR} - E_{ca}}{E_{RKR}} \right| \quad (2.65)$$

donde N es el número de datos experimentales, E_{RKR} y E_{calc} las energías de RKR y las energías calculadas, respectivamente. Además, MAPD calculado es inferior al 1 % lo que se encuentra dentro del requisito de error (Bitrus et al., 2021).

Capítulo III

Material y métodos

3.1. Solución del potencial central mejorado de Pöschl-Teller.

La ecuación radial de Schrödinger (2.11) con el potencial central mejorado de Pöschl-Teller, es:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_{\nu J}(r)}{dr^2} + \left(D_e + D_e \left(\frac{\sinh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\sinh^2 \alpha(r - r_0)} - \frac{\cosh^4 \alpha(r_e - r_0)}{\cosh^2 \alpha(r - r_0)} \right) + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right) u_{\nu J}(r) = E_{\nu J} u_{\nu J}(r) \quad (3.1)$$

Esta ecuación no tiene solución exacta cuando $J \neq 0$, por lo que es necesario utilizar una aproximación al término centrífugo.

Se utilizó la aproximación de Pekeris al término centrífugo del potencial efectivo que fue obtenido por Eyube et al. (2021), dada por la ecuación:

$$\frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \simeq \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(\frac{d_1}{\sinh^2 \alpha(r - r_0)} + \frac{d_2}{\cosh^2 \alpha(r - r_0)} \right) \quad (3.2)$$

donde:

$$d_1 = \frac{\sinh^3 \alpha(r_e - r_0)}{4\alpha r_e \cosh \alpha(r_e - r_0)} (1 - 2 \sinh^2 \alpha(r_e - r_0)) + \frac{3}{4\alpha^2 r_e^2} \sinh^4 \alpha(r_e - r_0)$$
$$d_2 = \frac{\cosh^3 \alpha(r_e - r_0)}{4\alpha r_e \sinh \alpha(r_e - r_0)} (1 + 2 \cosh^2 \alpha(r_e - r_0)) - \frac{3}{4\alpha^2 r_e^2} \cosh^4 \alpha(r_e - r_0)$$

Sustituimos la ecuación (3.2) en (3.1), obteniendo:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u_{\nu J}(r)}{dr^2} + \left(D_e + D_e \left(\frac{\sinh^4 \alpha(r_e - r_o)}{\sinh^2 \alpha(r - r_o)} - \frac{\cosh^4 \alpha(r_e - r_o)}{\cosh^2 \alpha(r - r_o)} \right) \right) u_{\nu J}(r) + \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu r_e^2} \left(\frac{d_1}{\sinh^2 \alpha(r - r_o)} + \frac{d_2}{\cosh^2 \alpha(r - r_o)} \right) u_{\nu J}(r) = E_{\nu J} u_{\nu J}(r) \quad (3.3)$$

La ecuación de Schrödinger con un potencial del tipo dado, es reducida a una ecuación del tipo hipergeométrico generalizado a partir de una apropiada transformación de coordenadas $s = s(r)$ (Berkdemir et al., 2006).

En este trabajo se optó por la transformación de coordenadas $s = \tanh^2 \alpha(r - r_o)$. Por lo tanto, la ecuación (3.3) toma la forma:

$$\frac{d^2 u_{\nu J}(s)}{ds^2} + \frac{1-3s}{2s(1-s)} \frac{du_{\nu J}(s)}{ds} + \frac{(-\beta_0 s^2 + \beta_1 s - \beta_2)}{4s^2(1-s)^2} u_{\nu J}(s) = 0 \quad (3.4)$$

donde $\beta_1 = \beta_0 + \beta_2 - \beta_{\nu J}$ y las cantidades reducidas vienen dadas como:

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

En este trabajo sólo nos ocuparemos de los niveles de energía de estados ligados, por lo que se requiere considerar $D_e > E_{\nu J}$, es decir, $\beta_{\nu J} > 0$.

Comparando la ecuación (3.4) con la ecuación (2.42), se obtienen los polinomios siguientes:

$$\sigma(s) = 2s(1-s), \quad \tilde{\sigma}(s) = -\beta_0 s^2 + \beta_1 s - \beta_2 \quad \text{y} \quad \tilde{\tau}(s) = 1 - 3s \quad (3.5)$$

Reemplazando los polinomios en la ecuación (2.52), se obtiene $\pi(s)$:

$$\pi(s) = \frac{(1-s) \pm \sqrt{(1+4\beta_0-8k)s^2 + (-2-4\beta_1+8k)s + (1+4\beta_2)}}{2} \quad (3.6)$$

Recordando el método de N-U, para determinar k la discriminante de la expresión bajo la raíz cuadrada tiene que ser cero:

$$\Delta = (-2 - 4\beta_1 + 8k)^2 - 4(1 + 4\beta_0 - 8k)(1 + 4\beta_2) = 0$$

Resolviendo se obtiene:

$$k_{\pm} = \frac{\beta_0 - \beta_2 - \beta_{\nu J} \pm \sqrt{\beta_{\nu J} + 4\beta_{\nu J}\beta_2}}{2} \quad (3.7)$$

Los dos valores de k dadas en la ecuación (3.7) son sustituidas en la ecuación (3.6), obteniendo:

$$\pi(s) = \begin{cases} \frac{1-s}{2} \pm \frac{1}{2} |(\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1+4\beta_2})s + \sqrt{1+4\beta_2}|, & \text{para } k_+ \\ \frac{1-s}{2} \pm \frac{1}{2} |(\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1+4\beta_2})s - \sqrt{1+4\beta_2}|, & \text{para } k_- \end{cases}$$

Analizando:

- $|(\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1+4\beta_2})s + \sqrt{1+4\beta_2}| = (\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1+4\beta_2})s + \sqrt{1+4\beta_2}$,
ya que $(\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1+4\beta_2})s + \sqrt{1+4\beta_2} = \sqrt{4\beta_{\nu J}}s + \sqrt{1+4\beta_2}(1-s) > 0$.
- $|(\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1+4\beta_2})s - \sqrt{1+4\beta_2}| = (\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1+4\beta_2})s - \sqrt{1+4\beta_2}$,
ya que $(\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1+4\beta_2})s - \sqrt{1+4\beta_2} > 0$.

Por lo tanto, se tendrá:

$$\pi(s) = \begin{cases} \frac{1-s}{2} \pm \frac{1}{2} ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1+4\beta_2})s + \sqrt{1+4\beta_2}), & \text{para } k_+ \\ \frac{1-s}{2} \pm \frac{1}{2} ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1+4\beta_2})s - \sqrt{1+4\beta_2}), & \text{para } k_- \end{cases}$$

De las cuatro posibles formas del polinomio $\pi(s)$, se seleccionará únicamente aquella que cumpla con que $\tau(s)$ ($\tau(s) = \tilde{\tau}(s) + 2\pi(s)$) tenga derivada negativa (Berkdemir & Han, 2005), es decir, que satisfaga $\frac{d\tau(s)}{ds} < 0$, condición necesaria para la existencia de estados ligados (Okon et al., 2017). Analizando:

- El $\pi(s)_{++} = \frac{1-s}{2} + \frac{1}{2} ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1+4\beta_2})s + \sqrt{1+4\beta_2})$ para k_+ ,
entonces:

$$\tau_{++}(s) = (1 - 3s) + (1 - s) + ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1 + 4\beta_2})s + \sqrt{1 + 4\beta_2})$$

Por lo tanto:

$$\tau'_{++}(s) = -4 + (\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1 + 4\beta_2})$$

- El $\pi(s)_{-+} = \frac{1-s}{2} - \frac{1}{2} ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1 + 4\beta_2})s + \sqrt{1 + 4\beta_2})$ para k_+ , entonces:

$$\tau_{-+}(s) = (1 - 3s) + (1 - s) - ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1 + 4\beta_2})s + \sqrt{1 + 4\beta_2})$$

Por lo tanto:

$$\tau'_{-+}(s) = -4 - (\sqrt{4\beta_{\nu J}} - \sqrt{1 + 4\beta_2})$$

- El $\pi(s)_{--} = \frac{1-s}{2} - \frac{1}{2} ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})s - \sqrt{1 + 4\beta_2})$ para k_- , entonces:

$$\tau_{--}(s) = (1 - 3s) + (1 - s) - ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})s - \sqrt{1 + 4\beta_2})$$

Por lo tanto:

$$\tau'_{--}(s) = -4 - \underbrace{(\sqrt{4\beta_{\nu J}})}_{>0} + \underbrace{(\sqrt{1 + 4\beta_2})}_{>0} < 0$$

- El $\pi(s)_{+-} = \frac{1-s}{2} + \frac{1}{2} ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})s - \sqrt{1 + 4\beta_2})$ para k_- , entonces:

$$\tau_{+-}(s) = (1 - 3s) + (1 - s) + ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})s - \sqrt{1 + 4\beta_2})$$

Por lo tanto:

$$\tau'_{+-}(s) = -4 + (\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})$$

Por lo tanto, como resultado del análisis anterior, se eligieron los siguientes valores para $\pi(s)$ y k :

$$\pi(s)_{--} = \frac{1-s}{2} - \frac{1}{2} ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})s - \sqrt{1 + 4\beta_2}) \quad (3.8)$$

$$k_- = \frac{\beta_0 - \beta_2 - \beta_{\nu J} - \sqrt{\beta_{\nu J} + 4\beta_{\nu J}\beta_2}}{2} \quad (3.9)$$

De aquí en adelante se utiliza las ecuaciones (3.8) y (3.9).

Para λ dada por la ecuación (2.51), se obtiene

$$\lambda = \frac{\beta_0 - \beta_2 - \beta_{\nu J} - \sqrt{\beta_{\nu J} + 4\beta_{\nu J}\beta_2}}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})) \quad (3.10)$$

Además, λ_n dada por la ecuación (2.64), se obtiene

$$\lambda_n = -n(-4 - (\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})) - \frac{n(n-1)}{2}(-4)$$

Teniendo en cuenta que $n = \nu$ es el número cuántico de vibración, se reescribe la ecuación:

$$\lambda_\nu = -\nu(-4 - (\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})) - \frac{\nu(\nu-1)}{2}(-4) \quad (3.11)$$

Comparamos estas expresiones, $\lambda = \lambda_\nu$, obtenemos la ecuación de energía.

$$\beta_{\nu J} = \left(-1 - 2\nu \mp \sqrt{\beta_0 + \frac{1}{4}} - \sqrt{\beta_2 + \frac{1}{4}} \right)^2$$

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

Entonces:

$$E_{\nu J} = D_e - \frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu} \left(-1 - 2\nu \mp \sqrt{\beta_0 + \frac{1}{4}} - \sqrt{\beta_2 + \frac{1}{4}} \right)^2 \quad (3.12)$$

Por lo tanto, consideramos que nuestra ecuación de energía de rotación - vibración del potencial central mejorado de Pöschl-Teller, es:

$$E_{\nu J} = D_e - \frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu} \left(-1 - 2\nu + \sqrt{\beta_0 + \frac{1}{4}} - \sqrt{\beta_2 + \frac{1}{4}} \right)^2 \quad (3.13)$$

Comparando la ecuación de energía obtenida (3.13) con las ecuaciones que fueron obtenidos por nuestros antecedentes, se concluye que es la misma ecuación de energía de rotación - vibración que fue obtenido por Eyube et al. (2021) que solucionó el potencial mejorado de Pöschl-Teller con la regla de cuantización mejorada.

Hallamos la ecuación de función de onda radial normalizada.

Por el método de N-U toma que $u_{\nu J}(s) = \phi(s)y(s)$, entonces reemplacemos $\sigma(s)$ dada en (3.5) y $\pi(s)$ dada en (3.8) en la ecuación (2.44) para obtener $\phi(s)$:

$$\frac{\phi(s)'}{\phi(s)} = \frac{\frac{1-s}{2} - \frac{1}{2} ((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1 + 4\beta_2})s - \sqrt{1 + 4\beta_2})}{2s(1-s)}$$

$$\int \frac{d\phi(s)}{\phi(s)} = \int \frac{\frac{1-s}{2} - \frac{1}{2} \left((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1+4\beta_2})s - \sqrt{1+4\beta_2} \right)}{2s(1-s)} ds$$

$$\phi(s) = s^{\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{4}} (1-s)^{\frac{\sqrt{\beta_{\nu J}}}{2}} c_3, \quad c_3 = \text{constante} \quad (3.14)$$

Por otro lado, $y(s) = y_n(s)$ está dada por la ecuación (2.63) pero primeramente determinemos la función de peso ($\rho(s)$), la cual satisface la condición:

$$(\sigma\rho)' = \tau\rho$$

$$\frac{\rho'(s)}{\rho(s)} = \frac{\tau(s) - \sigma'(s)}{\sigma(s)}$$

$$\frac{\rho'(s)}{\rho(s)} = \frac{(1-3s+2\left(\frac{1-s}{2} - \frac{1}{2} \left((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1+4\beta_2})s - \sqrt{1+4\beta_2} \right) \right)) - (2-4s)}{2s(1-s)}$$

$$\int \frac{d\rho(s)}{\rho(s)} = \int \frac{(1-3s+2\left(\frac{1-s}{2} - \frac{1}{2} \left((\sqrt{4\beta_{\nu J}} + \sqrt{1+4\beta_2})s - \sqrt{1+4\beta_2} \right) \right)) - (2-4s)}{2s(1-s)} ds$$

$$\rho(s) = (1-s)^{\sqrt{\beta_{\nu J}}} s^{\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}} c_4, \quad c_4 = \text{constante} \quad (3.15)$$

Por lo tanto, $y = y_n(s)$ es:

$$y_n(s) = B_n 2^n s^{-\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}} (1-s)^{-\sqrt{\beta_{\nu J}}} \frac{d^n}{ds^n} \left[(1-s)^{n+\sqrt{\beta_{\nu J}}} s^{n+\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}} \right] \quad (3.16)$$

La definición del Polinomio de Jacobi (Gradshteyn & Ryzhik, 2007), es dada como:

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(z) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-z)^{-\alpha} (1+z)^{-\beta} \frac{d^n}{dz^n} \left[(1-z)^{\alpha+n} (1+z)^{\beta+n} \right] \quad (3.17)$$

Si $z = 1 - 2s$, $\alpha = \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}$ y $\beta = \sqrt{\beta_{\nu J}}$, sustituyendo en la ecuación (3.17) se obtiene

$$P_n^{\left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}, \sqrt{\beta_{\nu J}}\right)}(1-2s) = \frac{1}{n!} s^{-\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}} (1-s)^{-\sqrt{\beta_{\nu J}}} \frac{d^n}{ds^n} \left[s^{n+\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}} (1-s)^{n+\sqrt{\beta_{\nu J}}} \right] \quad (3.18)$$

Entonces, $y_n(s) \equiv P_n^{\left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}, \sqrt{\beta_{\nu J}}\right)}(1-2s)$, donde $B_n = 1/(2^n n!)$. Por el método de N-U, la función $u_{\nu J}(s) = \phi(s)y(s)$, esto es expresada como

$$u_{\nu J}(s) = N s^{\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{4}} (1-s)^{\frac{\sqrt{\beta_{\nu J}}}{2}} P_n^{\left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}, \sqrt{\beta_{\nu J}}\right)}(1-2s) \quad (3.19)$$

donde N es la constante de normalización.

Teniendo en cuenta que $s = \tanh^2 \alpha(r - r_0)$, entonces:

$$u_{\nu J}(r) = N (\tanh^2 \alpha(r-r_0))^{\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{4}} (1 - (\tanh^2 \alpha(r-r_0)))^{\frac{\sqrt{\beta_{\nu J}}}{2}} P_n^{\left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}, \sqrt{\beta_{\nu J}}\right)}(1 - 2(\tanh^2 \alpha(r-r_0))) \quad (3.20)$$

La función de onda radial no normalizada es:

$$R_{\nu J}(r) = N \frac{1}{r} (\tanh^2 \alpha(r-r_0))^{\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{4}} (1 - (\tanh^2 \alpha(r-r_0)))^{\frac{\sqrt{\beta_{\nu J}}}{2}} P_n^{\left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}, \sqrt{\beta_{\nu J}}\right)}(1 - 2(\tanh^2 \alpha(r-r_0))) \quad (3.21)$$

El potencial con funciones hipérbolicas de Pöschl-Teller (2.17), las funciones de onda permanecen finitas en el intervalo $0 \leq \alpha(r - r_0) < \infty$ (Pöschl & Teller, 1933), siendo PCMPT una reparametrización del potencial (2.17), donde sus parámetros matemáticos coinciden con los parámetros moleculares reales. Así, el intervalo sigue presente en el PCMPT.

Ahora calculamos la constante de Normalización:

$$\int_0^\infty |rR(r)|^2 dr = \int_0^\infty |u_{\nu J}(r)|^2 dr = \int_0^1 |u_{\nu J}(s)|^2 \frac{ds}{2\alpha\sqrt{s}(1-s)} = 1 \quad (3.22)$$

Dado que $0 \leq \alpha(r - r_0) < \infty$, se tiene que $0 \leq s < 1$, donde $s = \tanh^2 \alpha(r - r_0)$. Además, se utiliza el polinomio de Jacobi, el cual se expresa en términos de la función hipergeométrica (Gradshteyn & Ryzhik, 2007).

$$P_\nu^{\alpha, \beta}(x) = \frac{\Gamma(\nu + 1 + \alpha)}{\nu! \Gamma(1 + \alpha)} F\left(-\nu, \nu + \alpha + \beta + 1; 1 + \alpha; \frac{1-x}{2}\right) \quad (3.23)$$

entonces:

$$\int_0^1 s^{\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}} (1-s)^{\sqrt{\beta_{\nu J}}-1} ({}_2F_1(-\nu, \nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1; 1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}; s))^2 ds$$

$$\frac{|N|^2}{2\alpha} \left(\frac{\Gamma(n+1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})}{n! \Gamma(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})} \right)^2 = 1 \quad (3.24)$$

Usamos la serie hipergeométrica generalizada (Gradshteyn & Ryzhik, 2007)

$${}_pF_q(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p; \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_q; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1)_k (\alpha_2)_k \dots (\alpha_p)_k z^k}{(\beta_1)_k (\beta_2)_k \dots (\beta_q)_k k!} \quad (3.25)$$

se tiene

$$\frac{|N|^2}{2\alpha} \left(\frac{\Gamma(\nu+1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})}{\nu! \Gamma(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})} \right)^2 \sum_{k=0}^{\nu} \sum_{m=0}^{\nu} \frac{(-\nu)_k (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (-\nu)_m (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_m}{k! (1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_k m! (1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m}$$

$$\int_0^1 s^{\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + k + m} (1-s)^{\sqrt{\beta_{\nu J}}-1} ds = 1 \quad (3.26)$$

Usamos la definición de la función beta (Andrews, 1998) y la relación $\beta(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$, obteniendo

$$\frac{|N|^2}{2\alpha} \left(\frac{\Gamma(\nu+1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})}{\nu! \Gamma(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})} \right)^2 \sum_{k=0}^{\nu} \sum_{m=0}^{\nu} \frac{(-\nu)_k (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (-\nu)_m (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_m}{k! (1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_k m! (1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m}$$

$$\beta\left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + k + m + 1, \sqrt{\beta_{\nu J}}\right) = 1 \quad (3.27)$$

$$\frac{|N|^2}{2\alpha} \left(\frac{\Gamma(\nu+1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})}{\nu! \Gamma(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})} \right)^2 \sum_{k=0}^{\nu} \sum_{m=0}^{\nu} \frac{(-\nu)_k (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (-\nu)_m (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_m}{k! (1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_k m! (1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m}$$

$$\frac{\Gamma(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + k + m + 1) \Gamma(\sqrt{\beta_{\nu J}})}{\Gamma(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + k + m + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)} = 1 \quad (3.28)$$

Ahora utilizamos la definición del símbolo de Pochhammer (Andrews, 1998), $(a)_n = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}$.

Entonces:

$$\sum_{m=0}^{\nu} \sum_{k=0}^{\nu} \frac{(-\nu)_k (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + 1)_k (-\nu)_m (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_m (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + k + 1)_m}{(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_k k! (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m m! (1 + k + \sqrt{\beta_{\nu J}} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m} \frac{|N|^2}{2\alpha} \left(\frac{\Gamma(\nu + 1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})}{\nu! \Gamma(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})} \right)^2 \beta \left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + 1, \sqrt{\beta_{\nu J}} \right) = 1 \quad (3.29)$$

La constante de normalización es

$$N = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\sqrt{\left(\sum_{k=0}^{\nu} \sum_{m=0}^{\nu} \frac{(-\nu)_k (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + 1)_k (-\nu)_m (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_m (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + k + 1)_m}{(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_k k! (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m m! (1 + k + \sqrt{\beta_{\nu J}} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m} \right)} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\Gamma(\nu+1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})}{\nu! \Gamma(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})} \right)^2 \beta \left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + 1, \sqrt{\beta_{\nu J}} \right)}} \quad (3.30)$$

Por lo tanto, la ecuación de la función de onda radial normalizada es:

$$R_{\nu J}(r) = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\sqrt{\left(\sum_{k=0}^{\nu} \sum_{m=0}^{\nu} \frac{(-\nu)_k (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + 1)_k (-\nu)_m (\nu + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_m (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + k + 1)_m}{(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_k k! (\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + \sqrt{\beta_{\nu J}} + 1)_k (1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m m! (1 + k + \sqrt{\beta_{\nu J}} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})_m} \right)} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{\Gamma(\nu+1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})}{\nu! \Gamma(1 + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2})} \right)^2 \beta \left(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2} + 1, \sqrt{\beta_{\nu J}} \right)}}} \frac{1}{r} (\tanh^2 \alpha(r - r_0))^{\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{4}} (1 - (\tanh^2 \alpha(r - r_0)))^{\frac{\sqrt{\beta_{\nu J}}}{2}} P_n^{(\frac{\sqrt{1+4\beta_2}}{2}, \sqrt{\beta_{\nu J}})}(1 - 2(\tanh^2 \alpha(r - r_0))) \quad (3.31)$$

3.2. Obtención de valores de energía para las moléculas N_2^+ , O_2^+ y Cl_2

Primero se comenzó hallando los parámetros del PCMPT, los cuales son: α ($1/\text{\AA}$) y r_0 (\AA), dadas por las ecuaciones (2.20) y (2.21), para ello se usaron los parámetros moleculares de las moléculas dadas en la tabla 2.1 y los factores de conversión $1\text{cm}^{-1} = 1.239841875 \times 10^{-4} \text{eV}$, $1\text{uma} = 931.494028 \text{MeV}/c^2$, $hc = 12398.5 \text{eV}\text{\AA}$, $\hbar c = 1973.29 \text{eV}\text{\AA}$, $1\text{uma} = 1.66053892 \times 10^{-24} \text{g}$ y

$$1\text{\AA} = 10^{-8}\text{cm}.$$

En la ecuación de energía de rotación-vibración (3.13) se reemplazaron los valores de α y r_0 hallados para las moléculas de N_2^+ , O_2^+ y Cl_2 dadas en la tabla 4.1 y los valores de los parámetros moleculares experimentales de las moléculas dadas en la tabla 2.1. Se obtuvieron las energías de vibración (cuando $J = 0$) en unidades de cm^{-1} son mostrados en las tablas 4.2, 4.3 y 4.4. Posteriormente, se obtuvieron las energías de rotación - vibración en unidades de cm^{-1} , variando el número cuántico de vibración y rotación, son mostrados en las figuras 4.8, 4.7 y 4.9.

3.3. Obtención de las funciones de onda radiales y densidades de probabilidad radiales para las moléculas N_2^+ , O_2^+ y Cl_2

En la ecuación de la función de onda radial (3.31), se reemplazan los valores de α y r_0 hallados para las moléculas de N_2^+ , O_2^+ y Cl_2 dadas en la tabla 4.1 y los valores de los parámetros moleculares experimentales de las moléculas dadas en la tabla 2.1. En las figuras 4.10, 4.13 y 4.16 se muestran las gráficas de las funciones de onda radial y densidad de probabilidad radial vibracionales (cuando $J = 0$) en unidades $\text{cm}^{-3/2}$ y cm^{-1} , respectivamente. Además, en las figuras 4.11, 4.12, 4.14, 4.15, 4.17 y 4.18 se muestran las gráficas de las funciones de onda radial y densidad de probabilidad radial cuando el número cuántico vibracional toma valores 0,1,2 y 3, y el número cuántico rotacional toma valores 2 y 5.

3.4. Datos de otros trabajos usados para las discusiones del presente trabajo

Las energías experimentales de Rydberg-Klein-Rees (RKR) para las moléculas de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$) y O_2^+ ($X^2\Pi_g$)

Tabla 3.1: Las energías vibracionales experimentales RKR (E_{RKR}) para la molécula de N_2^+ en el estado $X^2\Sigma_g^+$ y O_2^+ en el estado $X^2\Pi_g$:

$N_2^+ (X^2\Sigma_g^+)$				$O_2^+ (X^2\Pi_g)$			
ν	$E_{RKR} (cm^{-1})$	ν	$E_{RKR} (cm^{-1})$	ν	$E_{RKR} (cm^{-1})$	ν	$E_{RKR} (cm^{-1})$
0	1099,6	11	23180,9	0	934	11	19381
1	3285,9	12	24981,5	1	2777	12	20869
2	5417,7	13	26746,2	2	4585	13	22307
3	7536,5	14	28479,7	3	6364	14	23723
4	9590,5	15	30164,0	4	8105		
5	11648,2	16	31819,8	5	9812		
6	13651,8	17	33436,1	6	11489		
7	15629,7	18	35012,9	7	13133		
8	17570,4	19	36550,2	8	14745		
9	19474,2	20	38048,0	9	16323		
10	21345,1			10	17868		

Fuente: Obtenido en el artículo de Singh y Rai (1966).

Las energías experimentales de Rydberg-Klein-Rees (RKR) para la molécula de $Cl_2 (X^2\Sigma_g^+)$:

Tabla 3.2: Las energías vibracionales RKR (E_{RKR}) para la molécula de Cl_2 en el estado $X^2\Sigma_g^+$.

ν	$E_{RKR} (cm^{-1})$	ν	$E_{RKR} (cm^{-1})$	ν	$E_{RKR} (cm^{-1})$	ν	$E_{RKR} (cm^{-1})$
0	279.15	16	8475.6	32	15053.8	48	19433
1	833.43	17	8937.7	33	15401.8	49	19597.9
2	1382.33	18	9393.5	34	15741.4		
3	1925.79	19	9843	35	16072.4		
4	2463.8	20	10286.1	36	16394.5		
5	2996.28	21	10722.7	37	16707.4		
6	3523.4	22	11152.6	38	17010.8		
7	4044.8	23	11575.6	39	17304.4		
8	4560.5	24	11991.5	40	17587.9		
9	5070.5	25	12400.2	41	17860.8		
10	5574.7	26	12801.7	42	18122.8		
11	6073.1	27	13195.9	43	18373.5		
12	6565.6	28	13582.7	44	18612.4		
13	7052.2	29	13962	45	18838.9		
14	7532.8	30	14333.7	46	19052		
15	8007.3	31	14697.7	47	19250.5		

Fuente: Obtenido en el artículo de Coxon (1971).

3.5. Herramientas utilizadas

- Lenguaje de programación Python

Python se utilizó para programar la ecuación de energía, con la finalidad de poder introducir los parámetros moleculares experimentales de las moléculas diatómicas en la ecuación de energía y variar el número cuántico de vibración (ν) y el número cuántico de rotación (J), así obtener la energía de vibración y energía de rotación - vibración para las distintas moléculas diatómicas.

- Software Mathematica

El Software Mathematica se utilizó para programar la ecuación de la función de onda radial normalizada, debido a que el Software Mathematica me facilitó el manejo de las funciones especiales. Posteriormente, se introdujeron los parámetros moleculares experimentales de las moléculas diatómicas en la ecuación de función de onda radial normalizada y se varió el número cuántico vibracional (ν) y el número cuántico rotacional (J), para obtener las funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para las distintas moléculas diatómicas.

Capítulo IV

Resultados y Discusiones

4.1. Los α y r_0 calculados para las molécula diatómicas N_2^+ , O_2^+ y Cl_2

Se encontraron los valores de los parámetros del PCMPT (α y r_0) para cada molécula; estos se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 4.1: Los valores de los parámetros del potencial central mejorado de Pöschl-Teller para las moléculas N_2^+ , O_2^+ y Cl_2 .

Moléculas	Estado	α (1/Å)	r_0 (Å)
N_2^+	$X^2\Sigma_g^+$	1,3359578767656066	0,830164760471413
O_2^+	$X^2\Pi_g$	1,3863163330711625	0,841851625348013
Cl_2	$X^2\Sigma_g^+$	1,0008434553058858	1,64251882490065

4.2. Las energías de vibración de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)

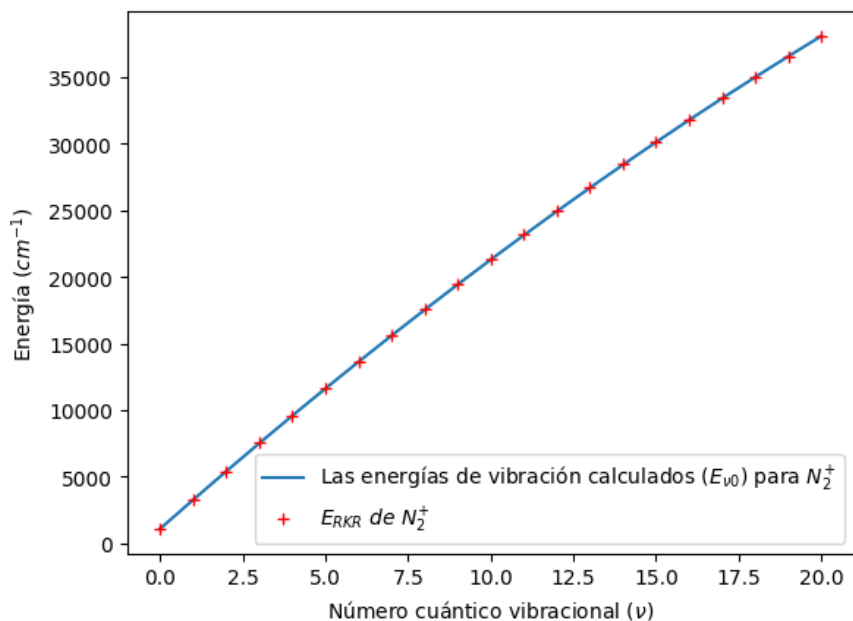
Las energías de vibración (cuando $J = 0$) calculados para la molécula de N_2^+ por la ecuación de energía (3.13), son mostradas en la tabla 4.2:

Tabla 4.2: Las energías de vibración calculados para la molécula N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$).

ν	$E_{\nu 0} (cm^{-1})$	ν	$E_{\nu 0} (cm^{-1})$
0	1105,3	11	23130,9
1	3278,3	12	24928,4
2	5417,2	13	26691,8
3	7521,9	14	28421,1
4	9592,5	15	30116,2
5	11628,9	16	31777,2
6	13631,3	17	33404,0
7	15599,5	18	34996,8
8	17533,5	19	36555,4
9	19433,4	20	38079,8
10	21299,2		

La comparación de las energías de vibración calculados para la molécula de N_2^+ dadas en la tabla 4.2 con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de N_2^+ dadas en la tabla 3.1, se muestra en la figura 4.1:

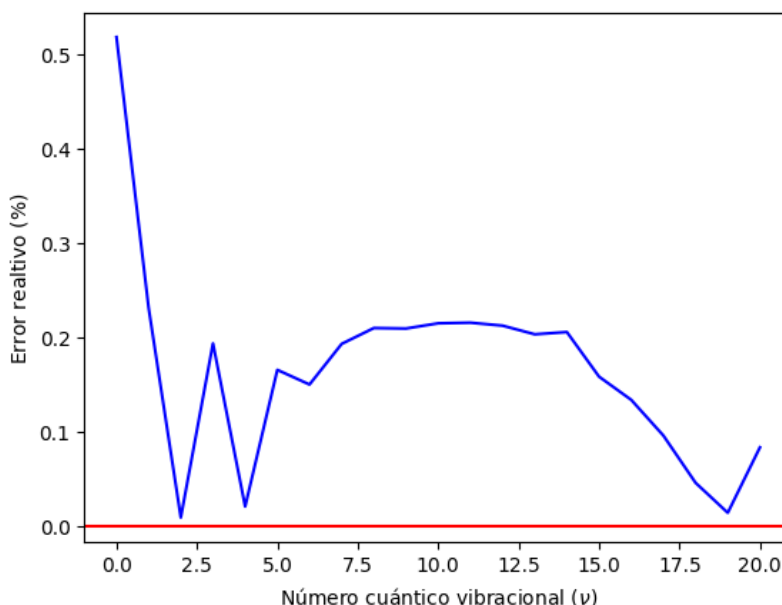
Figura 4.1: Gráfica de las energías de vibración calculados ($E_{\nu 0}$) y de las energías vibracionales experimentales RKR (E_{RKR}) para la molécula diatómica de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$), en función del número cuántico vibracional.



El error relativo porcentual de las energías de vibración calculados para la molécula de N_2^+ dadas en la tabla 4.2 con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de N_2^+

dadas en la tabla 3.1, se muestra en la figura 4.2:

Figura 4.2: Gráfica del error relativo porcentual de las energías de vibración calculados con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de N_2^+ en función del número cuántico vibracional.



Se observa en la figura 4.1 que las energías de vibración calculados ($E_{\nu 0}$) se hacen próximas a los valores de energías vibracionales experimentales RKR (E_{RKR}) de la molécula de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$). Una forma de comparar cuantitativamente los resultados es utilizar el MAPD.

Utilizando los valores de energía de vibración calculados de la tabla 4.2 y las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de N_2^+ dadas en la tabla 3.1 en la ecuación (2.65), se obtiene el valor de MAPD igual a 0,16603 %. Este resultado revela que las energías de vibración calculados se encuentran muy próximos a las energías experimentales RKR de la molécula N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$). Además, MAPD calculado es menor al 1 % lo cual se encuentra dentro del requisito de error.

En la figura 4.2, se observa que para el número cuántico vibracional cero el error relativo es aproximadamente 0,52 % y para los demás números cuánticos vibracionales sus errores relativo son menores al 0,22 %, teniendo en cuenta que para los números cuánticos vibracionales 2, 4 y 19 sus errores relativos son cercanos a cero, lo que significa que sus energías de vibración calculados son casi idénticos a sus energías experimentales RKR.

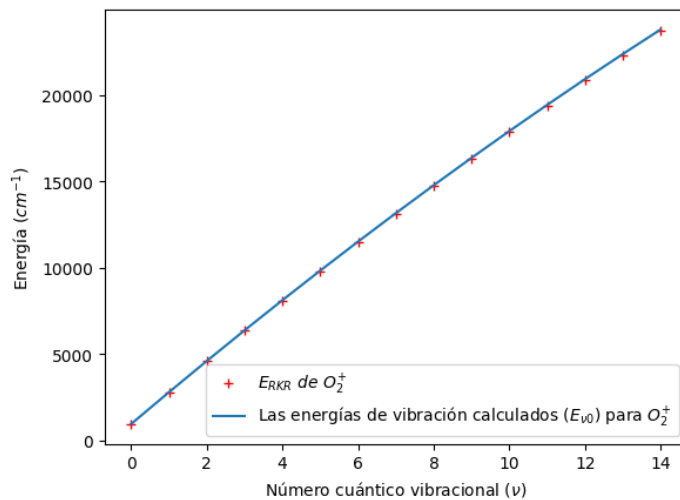
4.3. Las energías de vibración de O_2^+ ($X^2\Pi_g$)

Las energías de vibración (cuando $J = 0$) calculados para la molécula de O_2^+ por la ecuación de energía (3.13), son mostradas en la tabla 4.3:

Tabla 4.3: Las energías de vibración calculados para la molécula O_2^+ ($X^2\Pi_g$).

ν	$E_{\nu 0}$ (cm^{-1})
0	939,6
1	2783,7
2	4595,6
3	6375,4
4	8123,0
5	9838,3
6	11521,5
7	13172,5
8	14791,3
9	16377,9
10	17932,3
11	19454,5
12	20944,6
13	22402,4
14	23828,1

Figura 4.3: Gráfica de las energías de vibración calculados ($E_{\nu 0}$) y de las energías vibratorias experimentales RKR (E_{RKR}) para la molécula diatómica O_2^+ ($X^2\Pi_g$) en función del número cuántico vibracional.

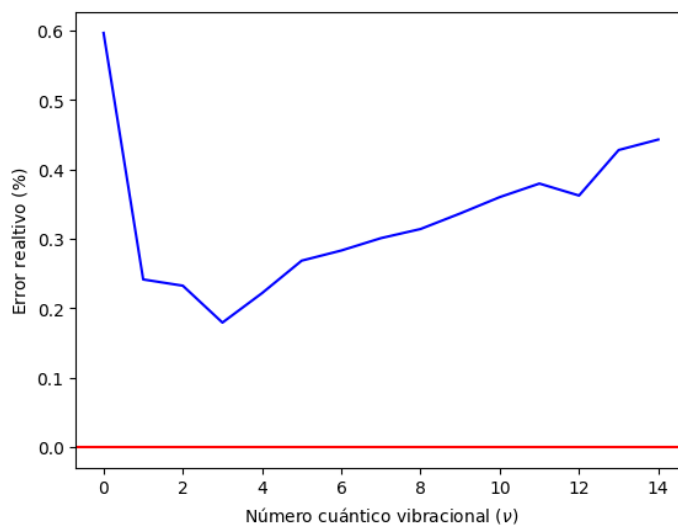


Comparación de las energías de vibración calculados para la molécula de O_2^+ dadas en la tabla

4.3 con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula O_2^+ dadas en la tabla 3.1, se muestra en la figura 4.3.

El error relativo porcentual de las energías de vibración calculados para la molécula O_2^+ dadas en la tabla 4.3 con las energías vibracionales experimentales RKR dadas en la tabla 3.1, se muestra en la figura 4.4.

Figura 4.4: Gráfica del error relativo porcentual de las energías de vibración calculados con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de O_2^+ ($X^2\Pi_g$) en función del número cuántico vibracional.



Se observa en la figura 4.3, que los valores de energía de vibración calculados son un poco más grandes que las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula O_2^+ . Una forma de comparar cuantitativamente los resultados es utilizar el MAPD.

Utilizando los valores de energía de vibración calculados ($E_{\nu 0}$) de la tabla 4.3 y las energías experimentales RKR (E_{RKR}) de la molécula de O_2^+ dadas en la tabla 3.1 en la ecuación (2.65), se obtiene el valor del MAPD igual a 0,32982 %. Este resultado revela que las energías de vibración calculados se encuentran próximos a las energías experimentales RKR de la molécula O_2^+ ($X^2\Pi_g$). Además, MAPD calculado es menor al 1 % lo cual se encuentra dentro del requisito de error.

En la figura 4.2, se observa que para el número cuántico vibracional cero el error relativo es aproximadamente 0,6 % y en el número cuántico 3 tenemos el error relativo más pequeño, que es aproximadamente de 0,18 %. A partir del número cuántico 3 aumenta el error relativo pero son menores a 0,45 %.

4.4. Las energías de vibración de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)

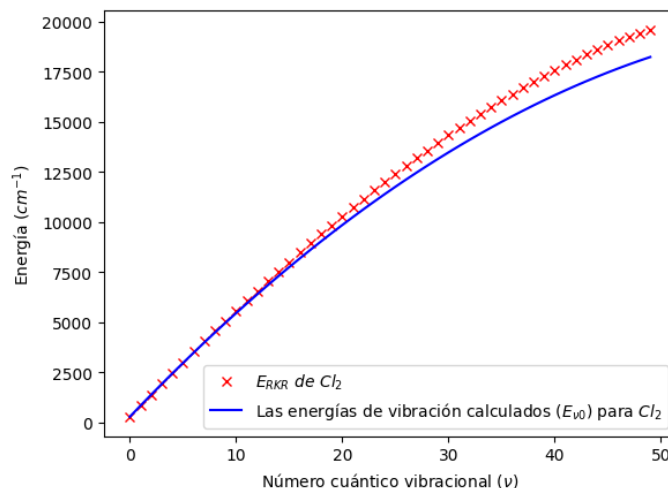
Las energías de vibración (cuando $J = 0$) calculados para la molécula de Cl_2 por la ecuación de energía (3.13), son mostradas en la tabla siguiente:

Tabla 4.4: Las energías de vibración calculados para la molécula Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)

ν	$E_{\nu 0}$ (cm^{-1})	ν	$E_{\nu 0}$ (cm^{-1})	ν	$E_{\nu 0}$ (cm^{-1})	ν	$E_{\nu 0}$ (cm^{-1})
0	280,64	13	6854,06	26	12121,72	39	16083,63
1	832,64	14	7305,62	27	12472,84	40	16334,30
2	1376,92	15	7749,46	28	12816,24	41	16577,25
3	1913,48	16	8185,57	29	13151,90	42	16812,48
4	2442,30	17	8613,95	30	13479,85	43	17039,98
5	2963,40	18	9034,61	31	13800,06	44	17259,75
6	3476,78	19	9447,54	32	14112,55	45	17471,79
7	3982,43	20	9852,75	33	14417,31	46	17676,11
8	4480,35	21	10250,23	34	14714,35	47	17872,70
9	4970,54	22	10639,98	35	15003,65	48	18061,57
10	5453,01	23	11022,01	36	15285,24	49	18242,71
11	5927,75	24	11396,30	37	15559,09		
12	6394,77	25	11762,88	38	15825,22		

La comparación de las energías de vibración calculados para la molécula de Cl_2 dadas en la tabla 4.4 con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de Cl_2 dadas en la tabla 3.2, se muestra en la figura 4.5:

Figura 4.5: Gráfica de las energías de vibración calculados ($E_{\nu 0}$) y de las energías vibracionales experimentales RKR (E_{RKR}) de la molécula diatómica de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$) en función del número cuántico vibracional.

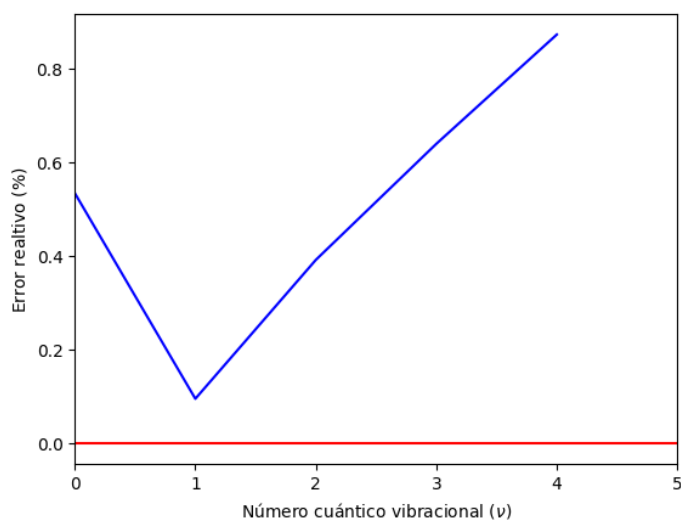


Utilizando los valores de energía de vibración calculados de Cl_2 de la tabla 4.4 y sus energías experimentales RKR de Cl_2 dadas en la tabla 3.2 en la ecuación (2.65), se obtiene el valor del MAPD igual a 4,57781 % este no cumple con el requisito de error de que sea menor al 1 %.

Por otro lado, se utilizaron los valores de energía correspondientes a los números cuánticos de 0 hasta 4 de la molécula de Cl_2 de la tabla 4.4 y las energías experimentales RKR de la molécula de Cl_2 dadas en la tabla 3.2, en la ecuación (2.65) se obtiene el valor de MAPD igual a 0.50635 %, que cumple con el requisito de error de ser menor al 1 %. Por lo tanto, las energías de vibración calculadas son casi próximas a las energías experimentales RKR de la molécula de Cl_2 , correspondientes a los números cuánticos de 0 hasta 4.

El error relativo porcentual de las energías de vibración calculados correspondientes a los números cuánticos de 0 hasta 4 para la molécula Cl_2 dadas en la tabla 4.4 con las energías experimentales RKR dadas en la tabla 3.2, se muestra en la figura 4.6:

Figura 4.6: Gráfica del error relativo porcentual de las energías de vibración calculadas correspondientes a los números cuánticos de 0 hasta 4 con las energías vibracionales experimentales RKR de la molécula de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$) en función del número cuántico vibracional.



Se observa en la figura 4.6, que para el número cuántico vibracional uno tiene un error relativo más pequeño que es aproximado a 0,09 % y el error relativo más alto es aproximadamente 0.9 % correspondiente al número cuántico cuatro.

4.5. Energía de rotación-vibración de la molécula de O_2^+ ($X^2\Pi_g$)

En la figura 4.7, se muestra las gráficas de las energías de rotación-vibración cuando el número cuántico de vibración toma valores de 0 a 14 y el número cuántico de rotación (J) varía de 0 a 187. Se observa que en cada una de las gráficas llega a un valor máximo de energía, las cuales pueden ser observadas en la tabla 4.5. También se observa que las gráficas de energía decrecen, dando lugar a niveles de energía degenerados de la molécula de O_2^+ ($X^2\Pi_g$).

Cuando J toma valores mayores que 187, los valores de energía son números complejos.

Figura 4.7: Energías de rotación-vibración de la molécula de O_2^+ ($X^2\Pi_g$) en función del número cuántico rotacional (J).

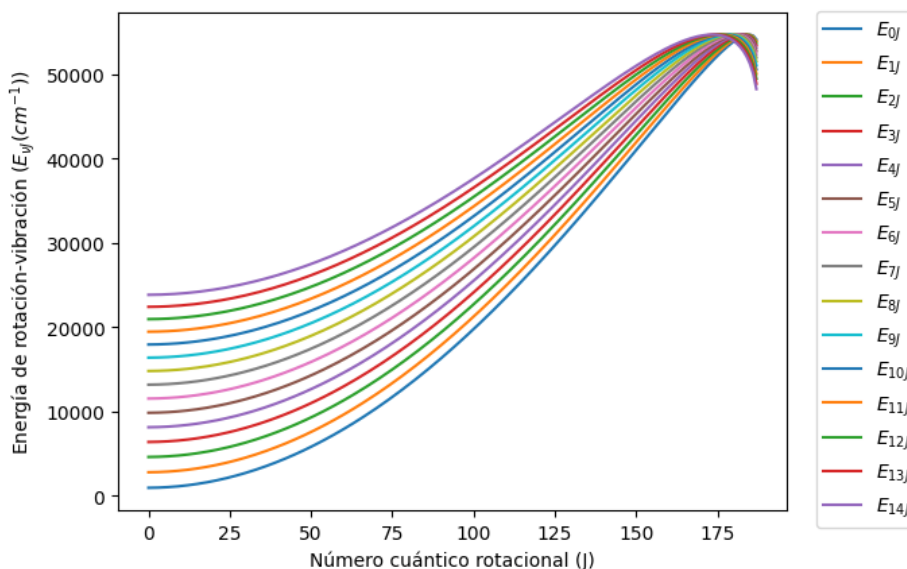


Tabla 4.5: Las energías de rotación-vibración máximas de cada una de las gráficas.

ν	J	$E_{\nu J} (cm^{-1})$	ν	J	$E_{\nu J} (cm^{-1})$
0	185	54682,2	8	179	54686,2
1	184	54686,4	9	178	54684,6
2	184	54680,5	10	177	54683,6
3	183	54688,0	11	177	54684,3
4	182	54684,0	12	176	54684,5
5	182	54683,9	13	174	54685,1
6	181	54687,7	14	173	54686,4
7	180	54687,7			

4.6. Energías de rotación-vibración de la molécula de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)

En la figura 4.8, se muestra las gráficas de las energías de rotación-vibración cuando el número cuántico de vibración toma valores de 0 a 20 y el número cuántico de rotación (J) varía de 0 a 194. Se observa que en cada una de las gráficas llega a un valor máximo de energía, las cuales pueden ser observadas en la tabla 4.6. También se observa que las gráficas de energía decrecen, dando lugar a niveles de energía degenerados de la molécula N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$).

Cuando J toma valores mayores que 194, los valores de energía son números complejos.

Figura 4.8: Energías de rotación-vibración de la molécula de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$) en función del número cuántico rotacional (J).

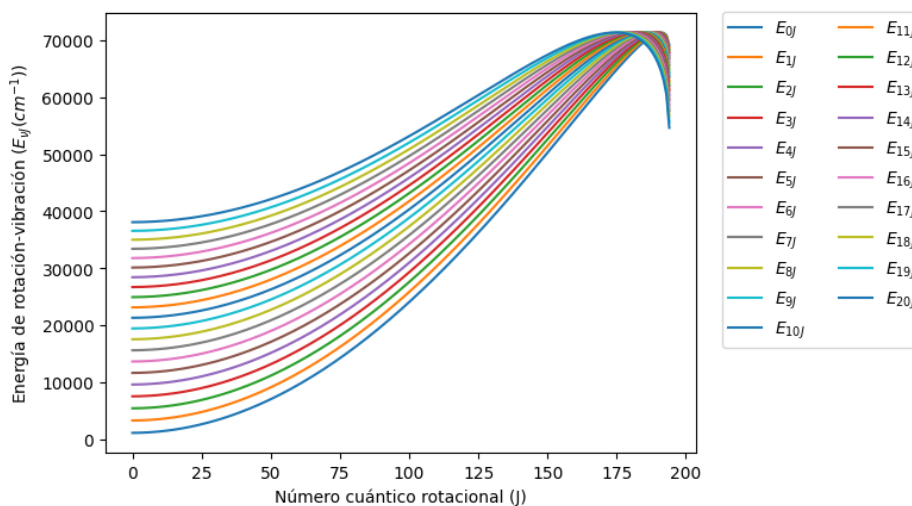


Tabla 4.6: Las energías de rotación-vibración máximas de cada una de las gráficas.

ν	J	$E_{\nu,J} (cm^{-1})$	ν	J	$E_{\nu,J} (cm^{-1})$
0	191	71364,7	11	184	71364,2
1	191	71351,9	12	183	71364,9
2	190	71364,7	13	182	71365,0
3	190	71352,1	14	181	71364,9
4	189	71364,8	15	180	71365,0
5	188	71360,9	16	179	71365,0
6	188	71360,6	17	178	71364,9
7	187	71365,0	18	177	71364,5
8	186	71363,3	19	176	71363,3
9	185	71359,1	20	174	71363,1
10	185	71362,1			

4.7. Energías de rotación-vibración de la molécula de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)

En las figuras 4.9, se muestra las gráficas de las energías de rotación-vibración cuando el número cuántico de vibración toma valores de 0 a 15 y el número cuántico de rotación (J) varía de 0 a 302. Se observa que en cada una de las gráficas llega a un valor máximo de energía, las cuales pueden ser observadas en la tabla 4.7. También se observa que las gráficas de energía decrecen, dando lugar a niveles de energía degenerados de la molécula Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$).

Cuando J toma valores mayores que 302, los valores de energía son números complejos.

Figura 4.9: Gráficas de las energías de rotación-vibración de la molécula de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$) en función del número cuántico rotacional (J).

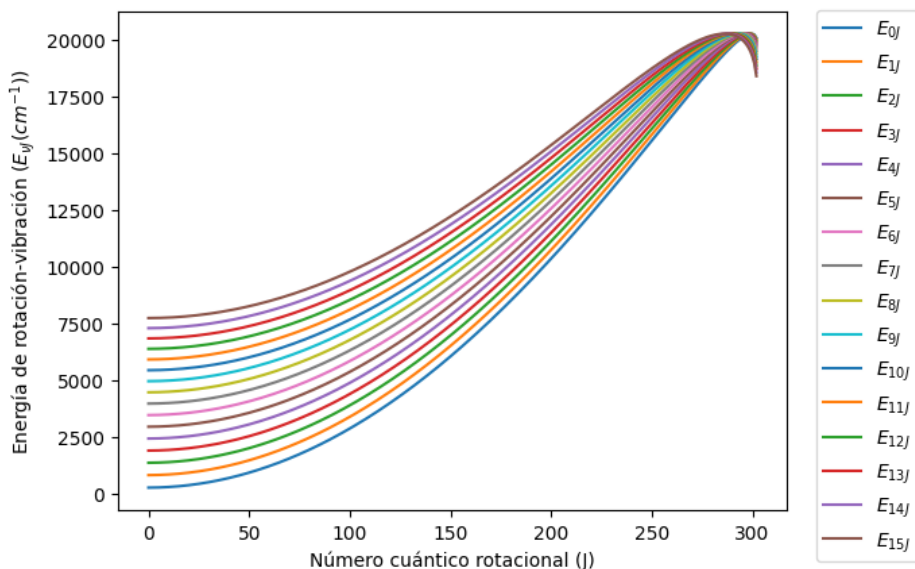


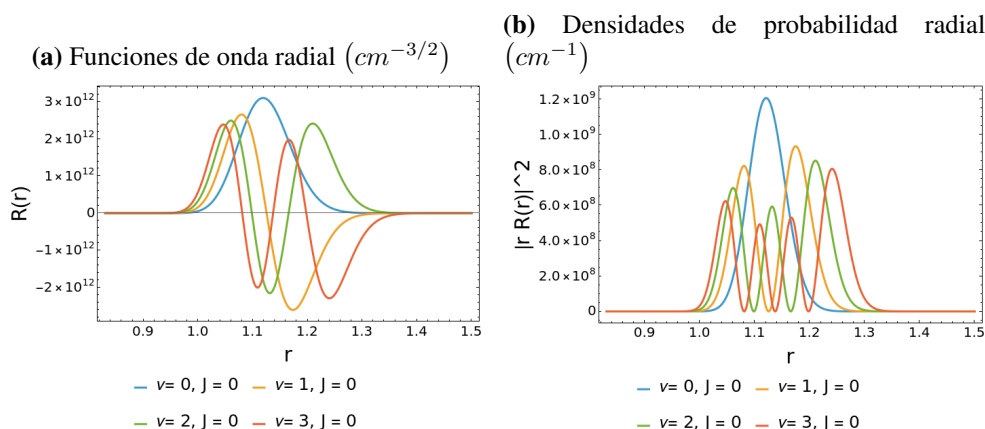
Tabla 4.7: Las energías de rotación-vibración máximas de cada una de las gráficas.

ν	J	$E_{\nu J} (cm^{-1})$	ν	J	$E_{\nu J} (cm^{-1})$
0	299	20273.6	9	293	20276.3
1	299	20276.4	10	292	20276.4
2	298	20275.4	11	291	20276.4
3	298	20275.5	12	290	20276.3
4	297	20276.4	13	289	20276.1
5	296	20276.0	14	287	20275.8
6	295	20275.1	15	286	20276.3
7	295	20275.8			
8	294	20276.2			

4.8. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para la molécula de N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)

Dado que $0 \leq \alpha(r - r_0) < \infty$, se puede reescribir como $r_0 \leq r < \infty$, donde r_0 para la molécula N_2^+ es igual a $0,830164760471413 \text{ \AA}$. Por tanto, las gráficas correspondientes a las funciones de onda radiales y a las densidades de probabilidad radial se representan en el intervalo $r \in [r_0, 1,45]$. En la figura 4.10, se presentan las gráficas de las funciones de onda radiales y de las densidades de

Figura 4.10: Funciones de onda radiales y densidades de probabilidad radial vibracionales del PCMPT para la molécula diatómica N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)



probabilidad radial vibracionales del PCMPT para la molécula N_2^+ . Las distancias internucleares más probables para la molécula diatómica N_2^+ correspondientes al punto más alto de cada onda, son: para $\nu = 0$ es $1,12054 \text{ \AA}$; $\nu = 1$ son $1,08023$ y $1,17428 \text{ \AA}$; $\nu = 2$ son $1,06039$; $1,13126$ y $1,21014 \text{ \AA}$ y $\nu = 3$ son $1,04653$; $1,10885$; $1,16643$ y $1,24053 \text{ \AA}$.

En la figura 4.11, se presentan las gráficas de las funciones de onda radiales y de las densidades de probabilidad radial cuando $J = 2$ del PCMPT para la molécula N_2^+ . Las distancias internucleares más probables para la molécula diatómica N_2^+ correspondientes al punto más alto de cada onda, son: para $\nu = 0$ es $1,12056 \text{ \AA}$; $\nu = 1$ son $1,08025$ y $1,17429 \text{ \AA}$; $\nu = 2$ son $1,06041$; $1,13128$ y $1,21017 \text{ \AA}$ y $\nu = 3$ son $1,04655$; $1,10887$; $1,16645$ y $1,24056 \text{ \AA}$.

En la figura 4.12, se presentan las gráficas de las funciones de onda radiales y de las densidades de probabilidad radial cuando $J = 5$ del PCMPT para la molécula N_2^+ . Las distancias internucleares más probables para la molécula diatómica N_2^+ correspondientes al punto más alto de cada onda,

son: para $\nu = 0$ es 1,12064 Å; $\nu = 1$ son 1,08032 y 1,17439 Å; $\nu = 2$ son 1,06048; 1,13136 y 1,21027 Å y $\nu = 3$ son 1,04662; 1,10895; 1,16654 y 1,24066 Å.

Se observa que las funciones de onda radiales y las densidades de probabilidad radial presentan nodos a medida que el número cuántico vibracional (ν) aumenta, y la probabilidad de las distancias internucleares correspondientes al nodo es cero. También se observa que hay distancias internucleares mínimas y máximas que puede tomar la molécula cuando el número cuántico rotacional (J) aumenta, el cual es debido a la asociación de J con el término centrífugo o llamado potencial repulsivo lo que hace que separe más a los dos átomos que conforman a la molécula N_2^+ .

Figura 4.11: Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 2$ del PCMPT para la molécula diatómica N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)

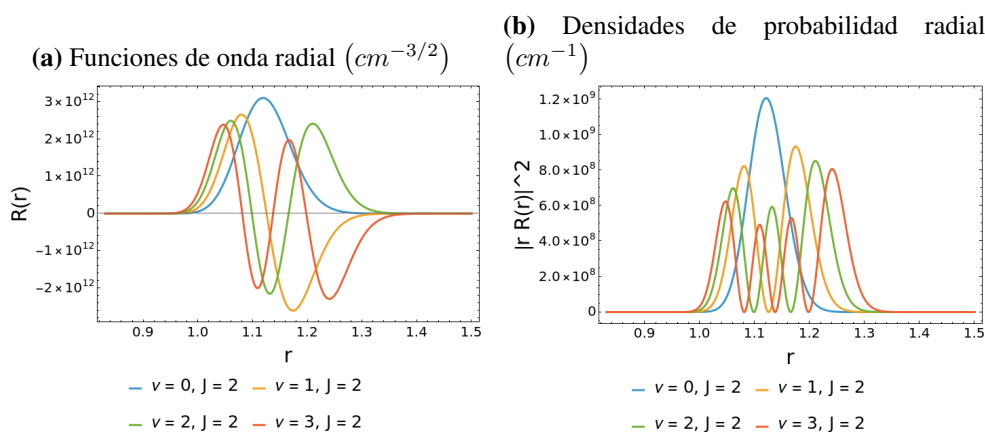
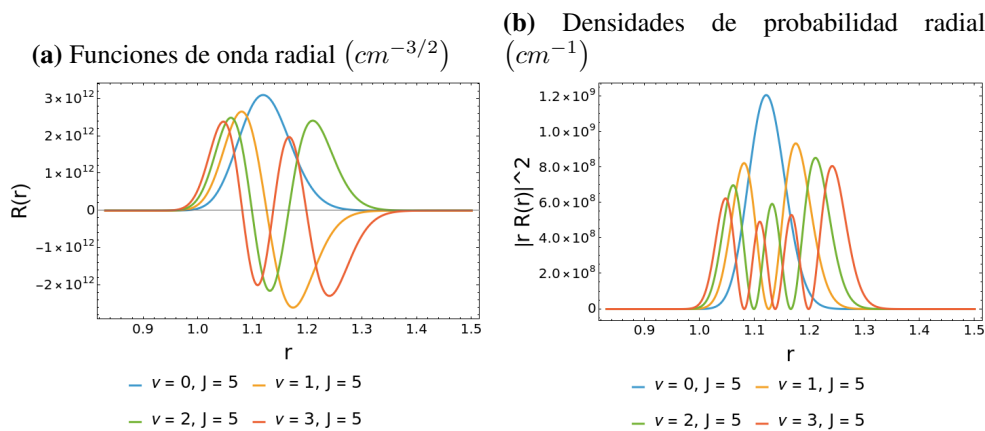


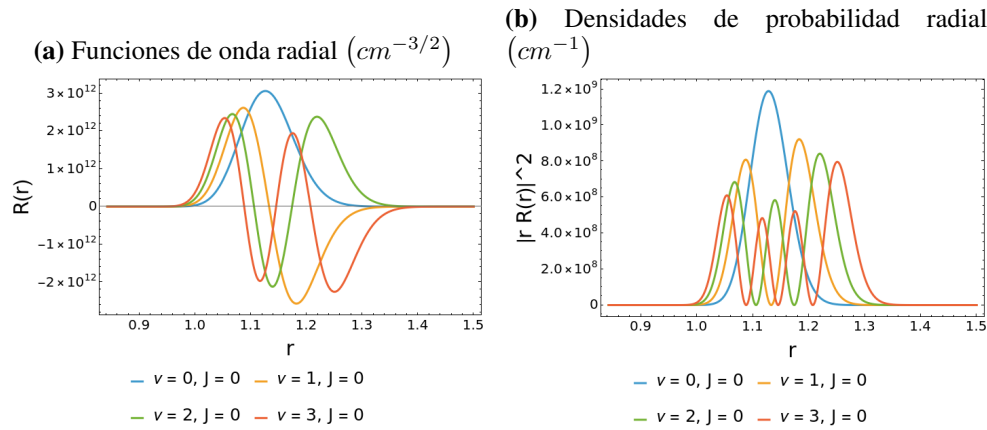
Figura 4.12: Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 5$ del PCMPT para la molécula diatómica N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$)



4.9. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para la molécula de O_2^+ ($X^2\Pi_g$)

Dado que $0 \leq \alpha(r - r_0) < \infty$, se puede reescribir como $r_0 \leq r < \infty$, donde r_0 para la molécula O_2^+ es igual a $0,841851625348013\text{\AA}$. Por tanto, las gráficas correspondientes a las funciones de onda radiales y a las densidades de probabilidad radial se representan en el intervalo $r \in [r_0, 1,5]$. En la figura 4.13, se presentan las gráficas de las funciones de onda radiales y de las densidades de

Figura 4.13: Funciones de onda radiales y densidades de probabilidad radial vibracionales del PCMPT para la molécula diatómica O_2^+ ($X^2\Pi_g$)



probabilidad radial vibracionales del PCMPT para la molécula O_2^+ . Las distancias internucleares más probables para la molécula diatómica O_2^+ correspondientes al punto más alto de cada onda, son: para $\nu = 0$ es $1,12779 \text{\AA}$; $\nu = 1$ son $1,08709$ y $1,18265 \text{\AA}$; $\nu = 2$ son $1,06719$; $1,13909$ y $1,21947 \text{\AA}$ y $\nu = 3$ son $1,05334$; $1,11653$; $1,17512$ y $1,25076 \text{\AA}$.

En la figura 4.14, se presentan las gráficas de las funciones de onda radiales y de las densidades de probabilidad radial cuando $J = 2$ del PCMPT para la molécula O_2^+ . Las distancias internucleares más probables para la molécula diatómica O_2^+ correspondientes al punto más alto de cada onda, son: para $\nu = 0$ es $1,12781 \text{\AA}$; $\nu = 1$ son $1,08711$ y $1,18267 \text{\AA}$; $\nu = 2$ son $1,06720$; $1,13911$ y $1,21949 \text{\AA}$ y $\nu = 3$ son $1,05336$; $1,11655$; $1,17515$ y $1,25079 \text{\AA}$.

En la figura 4.15, se presentan las gráficas de las funciones de onda radiales y de las densidades de probabilidad radial cuando $J = 5$ del PCMPT para la molécula O_2^+ . Las distancias internucleares más probables para la molécula diatómica O_2^+ correspondientes al punto más alto de cada onda,

son: para $\nu = 0$ es 1,12789 Å; $\nu = 1$ son 1,08718 y 1,18277 Å; $\nu = 2$ son 1,06728; 1,13920 y 1,21959 Å y $\nu = 3$ son 1,05343; 1,11663; 1,17524 y 1,25090 Å.

Se observa que las funciones de onda radiales y las densidades de probabilidad radial presentan nodos a medida que el número cuántico vibracional (ν) aumenta, y la probabilidad de las distancias internucleares correspondientes al nodo es cero. También se observa que hay distancias internucleares mínimas y máximas que puede tomar la molécula cuando el número cuántico rotacional (J) aumenta, el cual es debido a la asociación de J con el término centrífugo o llamado potencial repulsivo lo que hace que separe más a los dos átomos que conforman a la molécula O_2^+ .

Figura 4.14: Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibratoriales y $J = 2$ del PCMPT para la molécula diatómica O_2^+ ($X^2\Pi_g$)

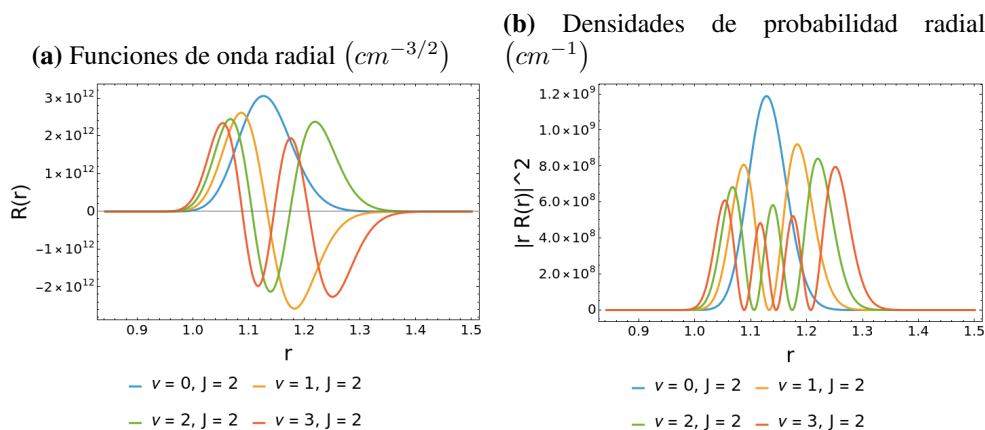
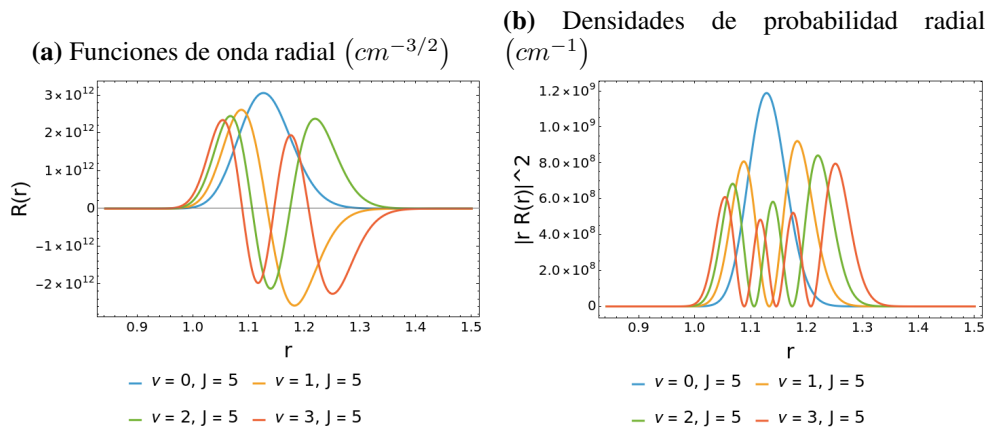


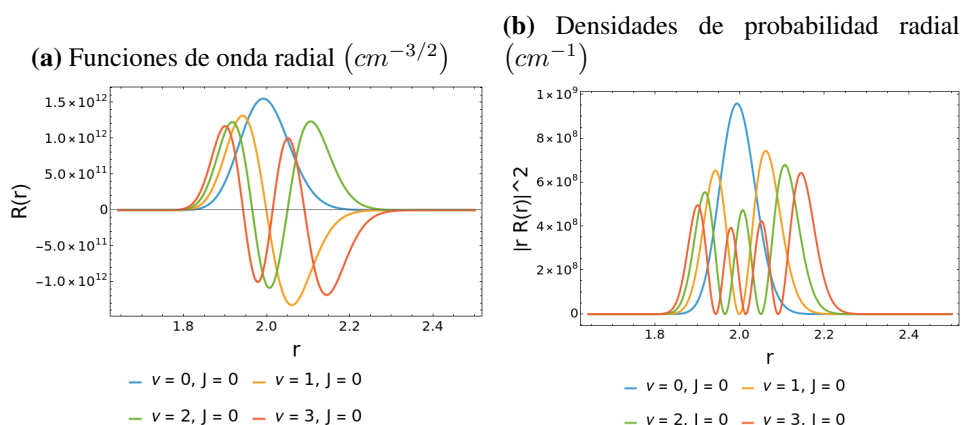
Figura 4.15: Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibratoriales y $J = 5$ del PCMPT para la molécula diatómica O_2^+ ($X^2\Pi_g$)



4.10. Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para la molécula de Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)

Dado que $0 \leq \alpha(r - r_0) < \infty$, se puede reescribir como $r_0 \leq r < \infty$, donde r_0 para la molécula Cl_2 es igual a $1,64251882490065 \text{ \AA}$. Por tanto, las gráficas correspondientes a las funciones de onda radiales y a las densidades de probabilidad radial se representan en el intervalo $r \in [r_0, 2,45]$. En la figura 4.16, se presentan las gráficas de las funciones de onda radiales y de las densidades de

Figura 4.16: Funciones de onda radiales y densidades de probabilidad radial vibracionales del PCMPT para la molécula diatómica Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$)



probabilidad radial vibracionales del PCMPT para la molécula Cl_2 . Las distancias internucleares más probables para la molécula diatómica Cl_2 correspondientes al punto más alto de cada onda, son: para $\nu = 0$ es $1,99302 \text{ \AA}$; $\nu = 1$ son $1,94235$ y $2,06083 \text{ \AA}$; $\nu = 2$ son $1,91750$; $2,00668$ y $2,10606 \text{ \AA}$ y $\nu = 3$ son $1,90019$; $1,97853$; $2,05104$ y $2,14431 \text{ \AA}$.

En la figura 4.17, se presentan las gráficas de las funciones de onda radiales y de las densidades de probabilidad radial cuando $J = 2$ del PCMPT para la molécula Cl_2 . Las distancias internucleares más probables para la molécula diatómica Cl_2 correspondientes al punto más alto de cada onda, son: para $\nu = 0$ es $1,99303 \text{ \AA}$; $\nu = 1$ son $1,94235$ y $2,06084 \text{ \AA}$; $\nu = 2$ son $1,91751$; $2,00669$ y $2,10608 \text{ \AA}$ y $\nu = 3$ son $1,90020$; $1,97854$; $2,05105$ y $2,14432 \text{ \AA}$.

En la figura 4.18, se presentan las gráficas de las funciones de onda radiales y de las densidades de probabilidad radial cuando $J = 5$ del PCMPT para la molécula Cl_2 . Las distancias internucleares más probables para la molécula diatómica Cl_2 correspondientes al punto más alto de cada onda,

son: para $\nu = 0$ es 1,99307 Å; $\nu = 1$ son 1,94239 y 2,06089 Å; $\nu = 2$ son 1,91754; 2,00673 y 2,10612 Å y $\nu = 3$ son 1,90023; 1,97858; 2,05109 y 2,14437 Å.

Se observa que las funciones de onda radiales y las densidades de probabilidad radial presentan nodos a medida que el número cuántico vibracional (ν) aumenta, y la probabilidad de las distancias internucleares correspondientes al nodo es cero. También se observa que hay distancias internucleares mínimas y máximas que puede tomar la molécula cuando el número cuántico rotacional (J) aumenta, el cual es debido a la asociación de J con el término centrífugo o llamado potencial repulsivo lo que hace que separe más a los dos átomos que conforman a la molécula Cl_2 .

Figura 4.17: Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 2$ del PCMPT para la molécula diatómica $\text{Cl}_2 (X^2\Sigma_g^+)$

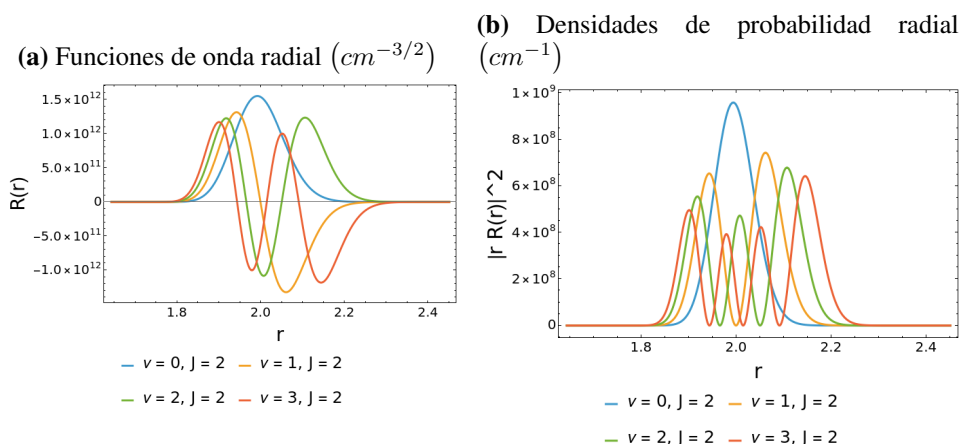
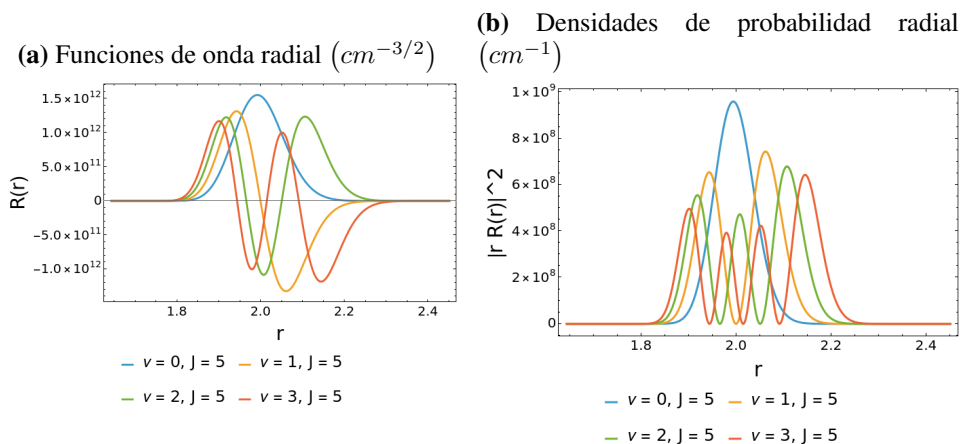


Figura 4.18: Funciones de onda radial y densidades de probabilidad radial para diferentes números cuánticos vibracionales y $J = 5$ del PCMPT para la molécula diatómica $\text{Cl}_2 (X^2\Sigma_g^+)$



Capítulo V

Conclusiones y Recomendaciones

5.1. Conclusiones

- Se ha resuelto la ecuación radial de Schrödinger con el potencial central mejorado de Pöschl-Teller, por el método de Nikiforov-Uvarov y la aproximación de Pekeris al término centrífugo. Se obtienen la ecuación energía rotacional-vibracional y la ecuación de la función de onda radial normalizada.
- En las gráficas de energía de rotación-vibración para las moléculas N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$), O_2^+ ($X^2\Pi_g$) y Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$) se observan que llegan a un máximo valor de energía y luego decrecen, dando lugar a niveles de energía degenerados. Además, se obtienen las gráficas de las funciones de onda radiales normalizadas y densidades de probabilidad radiales para cada molécula, donde se observa que las distancias internucleares aumentan a medida en que aumenta el número cuántico rotacional (J). Debido a que J está asociado al término centrífugo o llamado potencial repulsivo, ocurre que se separen más los dos átomos que conforman a las moléculas diatómicas.

5.2. Recomendaciones

- Se recomienda utilizar la ecuación de energía y función de onda obtenidas para determinar nuevos resultados, como el valor esperado de la posición, valor esperado del momento,

valor esperado de la energía y otros y así, aplicarlos para las moléculas N_2^+ ($X^2\Sigma_g^+$), O_2^+ ($X^2\Pi_g$) y Cl_2 ($X^2\Sigma_g^+$).

- Buscar otros métodos para resolver la ecuación radial de Schrödinger con el potencial central mejorado de Pöschl-Teller y aplicar los resultados a las mismas o diferentes moléculas diatómicas.

Bibliografía

- Agboola, D. (2009). Solutions to the modified Pöschl-Teller Potential in D-dimensions. *Chinese Physics Letters*, 27(4), 040301. <http://arxiv.org/abs/0811.3613>
- Alonso, M., & Finn, E. (1971). *Fundamentos cuánticos y estadísticos, vol. 3 de Física*. Fondo Educativo Interamericano S.A.
- Andreazza, C. M., & Singh, P. D. (1997). Formation of Si₂, C₂, C₂⁺ and N₂⁺ by radiative association. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 287(2), 287-292. <https://doi.org/10.1093/mnras/287.2.287>
- Andrews, L. C. (1998). *Special functions of mathematics for engineers* (2nd, Vol. 49). Spie Press.
- Barut, A. O., Inomata, A., & Wilson, R. (1987). Algebraic treatment of second Pöschl-teller, Morse-Rosen and Eckart equations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 20(13), 4083.
- Berkdemir, C., Berkdemir, A., & Han, J. (2006). Bound state solutions of the schrödinger equation for modified kratzer's molecular potential. *Chemical Physics Letters*, 417(4), 326-329. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.10.039>

- Berkdemir, C., & Han, J. (2005). Any 1-state solutions of the Morse potential through the Pekeris approximation and Nikiforov–Uvarov method. *Chemical Physics Letters*, 409(4–6), 203-207. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.05.021>
- Bitrus, B. M., Nwabueze, C. M., Ojar, J. U., & Eyube, E. S. (2021). RO-VIBRATIONAL PARTITION FUNCTION AND MEAN THERMAL ENERGY OF THE IMPROVED WEI OSCILLATOR. *FUDMA JOURNAL OF SCIENCES*, 5(1), 261-270. <https://doi.org/10.33003/fjs-2021-0501-564>
- Bransden, B. H., & Joachain, C. J. (1983). *Physics of Atoms and Molecules*. Longman Scientific & Technical.
- Brown, J. M., & Carrington, A. (2003). *Rotational spectroscopy of diatomic molecules*. Cambridge University Press.
- Chen, C.-Y., Fa-Lin, L., & You, Y. (2012). Scattering states of modified Pöschl-Teller potential in D-dimension. *Chinese Physics B - CHIN PHYS B*, 21(3), 030302. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/21/3/030302>
- Coxon, J. A. (1971). The calculation of potential energy curves of diatomic molecules: application to halogen molecules. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 11(5), 443-462. [https://doi.org/10.1016/0022-4073\(71\)90083-5](https://doi.org/10.1016/0022-4073(71)90083-5)
- De La Peña, L. (2014). *Introducción a la mecánica cuántica*. México: Fondo de Cultura Económica.
- Deng, Z. Y., & Zhang, J. M. (2016). First-principles study of O₂ and Cl₂ molecule adsorption on pristine doped boron nitride nanotubes. *Canadian Journal of Physics*, 94(10), 1071-1079. <https://doi.org/10.1139/cjp-2016-0326>

- Dong, S. H. (2009). A new quantization rule to the energy spectra for modified hyperbolic-type potentials. *International Journal of Quantum Chemistry*, 109(4), 701-707. <https://doi.org/10.1002/qua.21862>
- Eisberg, R. M., & Resnick, R. (2000). *Física cuántica: átomos, moléculas, sólidos y partículas*. Limusa.
- Engel, T., & Reid, P. (2006). *Química Física*. PEARSON EDUCACIÓN S.A. https://www.academia.edu/35633943/Quimica_Fisica_Thomas_Engel_y_Philip_Reid_2_pdf
- Eyube, E. S., Notani, P. P., Nyam, G. G., Jabil, Y. Y., & Izam, M. M. (2023). Pure vibrational state energies and statistical-mechanical models for the reparameterized scarf oscillator. *Frontiers in Physics*, 11. <https://doi.org/10.3389/fphy.2023.978347>
- 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>
- Fernández Rodríguez, M., & Ríus, P. (1998). *Elementos de mecánica cuántica molecular*. Servicio de Publicaciones de la Universidad de Cádiz. <http://hdl.handle.net/10498/26385>
- FLEET. (2020, 28 de septiembre). *To kill a quasiparticle: A quantum whodunit*. <https://phys.org/news/2020-09-quasiparticle-quantum-whodunit.html>
- Frost, A. A., & Musulin, B. (1954). Semiempirical Potential Energy Functions. I. The H₂ and H₂⁺ Diatomic Molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 22(6), 1017-1020. <https://doi.org/10.1063/1.1740254>
- Gordillo-Vázquez, F. J., & Kunc, J. A. (1998). Radial probability distributions of atoms in diatomic molecules represented by the rotating Morse and Tietz-Hua oscillators. *Journal of*

- Molecular Structure: THEOCHEM*, 425(3), 263-270. [https://doi.org/10.1016/S0166-1280\(97\)00258-3](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(97)00258-3)
- Gradshteyn, I. S., & Ryzhik, I. M. (2007). *Table of integrals, series, and products* (7th ed). Academic Press.
- Ikhdaïr, S. M. (2009). An improved approximation scheme for the centrifugal term and the Hulthén potential. *The European Physical Journal A*, 39(3), 307-314. <https://doi.org/10.1140/epja/i2008-10715-2>
- 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>
- Kaur, S., & Mahajan, C. G. (1999). Some new four-parameter potentials and their use in the study of vibrational thermodynamical quantities of diatomic molecules. *Pramana*, 52(5), 459-477. <https://doi.org/10.1007/BF02830093>
- Kunc, J. A., & Gordillo-Vázquez, F. J. (1997). Rotational-vibrational levels of diatomic molecules represented by the Tietz-Hua rotating oscillator. *The Journal of Physical Chemistry A*, 101(8), 1595-1602. <https://doi.org/10.1021/jp962817d>
- Landau, L. D., & Lifshitz, E. M. (1983). *Mecánica cuántica no-relativista*. Reverte.
- Levine, I. N. (2004). *Fisicoquímica* (5.^a ed., Vol. 2). MADRID: MCGRAW-HILL INTERAMERICANA.
- Levine, I. N. (2001). *Química Cuántica* (5.^a ed.). Pearson Educación: Madrid.
- Liu, J. Z., & Jia, C. S. (2022). Prediction of vibrational energy levels for the CO molecule and 7Li_2 dimer. *Chemical Physics Letters*, 803, 139791. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2022.139791>

- Ma, Z. Q., & Xu, B. W. (2005). Quantum Correction in Exact Quantization Rules. *Europhysics Letters (EPL)*, 69(5), 685-691. <https://doi.org/10.1209/epl/i2004-10418-8>
- Morse, P. M. (1929). Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels. *Physical Review*, 34(1), 57-64. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.34.57>
- Nikiforov, A., & Uvarov, V. (1988). *Special Functions of Mathematical Physics*. Birkhäuser, Basel.
- Okon, I. B., Popoola, O., & Isonguyo, C. N. (2017). Approximate solutions of Schrodinger equation with some diatomic molecular interactions using Nikiforov-Uvarov method. *Advances in High Energy Physics*, 2017. <https://doi.org/10.1155/2017/9671816>
- 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>
- Pöschl, G., & Teller, E. (1933). Bemerkungen zur Quantenmechanik des anharmonischen Oszillators. *Zeitschrift für Physik*, 83(3), 143-151. <https://doi.org/10.1007/BF01331132>
- Rey Lara, P. (2021). *Estudio teórico de la adición electrofílica de halogenuros de hidrógeno a propeno: regla de Markownikoff* [Tesis de fin de grado]. Universidad de Valladolid. <https://uvadoc.uva.es/handle/10324/49778>
- Rosen, N., & Morse, P. M. (1932). On the Vibrations of Polyatomic Molecules. *Physical Review*, 42(2), 210-217. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.42.210>
- Rousselot, P., Anderson, S. E., Alijah, A., Noyelles, B., Opitom, C., Jehin, E., Hutsemékers, D., & Manfroid, J. (2022). N₂⁺ fluorescence spectrum of comet C/2016 R2 (PanSTARRS). *Astronomy & Astrophysics*, 661. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202142829>
- Schiöberg, D. (1986). The energy eigenvalues of hyperbolic potential functions. *Molecular Physics*, 59(5), 1123-1137. <https://doi.org/10.1080/00268978600102631>
- Serway, R. A., Moses, C. J., & Moyer, C. A. (2006). *Física Moderna* (3^a ed). Thomson.

- Serway, R. A., & Jewett, J. W. (2008). *Física para ciencias e ingeniería*. Cengage Learning. https://www.academia.edu/51088637/Fi_sica_para_Ciencias_e_Ingenieri_a_Vol_1_Serway_7_Ed
- Singh, R. B., & Rai, D. K. (1966). Potential-energy curves for O₂⁺, N₂⁺, and CO⁺. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 19(1-4), 424-434. [https://doi.org/10.1016/0022-2852\(66\)90265-7](https://doi.org/10.1016/0022-2852(66)90265-7)
- Smita, G., Barreiro-Lage, D., Walsh, N., Bart, O., Sorensen, S. L., Díaz-Tendero, S., & Mathieu, G. (2022). The origin of enhanced O₂⁺ production from photoionized CO₂ clusters. *Communications Chemistry*, 5(1). <https://doi.org/10.1038/s42004-022-00629-z>
- Stanek, J. (2011). Approximate analytical solutions for arbitrary l-state of the Hulthén potential with an improved approximation of the centrifugal term. *Central European Journal of Chemistry*, 9(4), 737-742. <https://doi.org/10.2478/s11532-011-0050-6>
- Sun, Y., He, S., & Jia, C.-S. (2013). Equivalence of the deformed modified Rosen–Morse potential energy model and the Tietz potential energy model. *Physica Scripta*, 87(2), 025301. <https://doi.org/10.1088/0031-8949/87/02/025301>
- Tang, H. M., Liang, G. C., Zhang, L. H., Zhao, F., & Jia, C. S. (2014). Molecular energies of the improved Tietz potential energy model. *Canadian Journal of Chemistry*, 92(3), 201-205. <https://doi.org/10.1139/cjc-2013-0466>
- Tezcan, C., Aktas, M., & Sever, O. Y. R. (2008). Exact solution of Schrodinger equation for Pseudoharmonic potential. *Journal of Mathematical Chemistry*, 43(2), 845-851. <https://doi.org/10.1007/s10910-007-9233-y>
- Tietz, T. (1963). Potential-Energy Function for Diatomic Molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 38(12), 3036-3037. <https://doi.org/10.1063/1.1733648>

- Yanar, H., Taş, A., Salti, M., & Aydogdu, O. (2020). Ro-vibrational energies of CO molecule via improved generalized pöschl–teller potential and pekeris-type approximation. *The European Physical Journal Plus*, 135(3), 292. <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-020-00297-9>
- You, Y., Fa-Lin, L., Sun, D.-S., Chen, C.-Y., & Dong, S. (2013). Solutions of the Second Pöschl–Teller Potential Solved by an Improved Scheme to the Centrifugal Term. *Few-Body Systems*, 54. <https://doi.org/10.1007/s00601-013-0725-y>
- Zettili, N. (2009). *Quantum mechanics: Concepts and applications* (2nd ed). Wiley.

Capítulo VI

Anexo

6.1. Código Python y Wolfram Mathematica

- **URL de la carpeta en Drive:** <https://drive.google.com/drive/folders/1ePggUVENrpWyHWqSrSiEsTbzAAjOtYEf?usp=sharing>
- **URL del repositorio en GitHub:** <https://github.com/Marcio26Mallqui/Calculos-numericos-de-las-energias-y-funciones-de-onda-de-distintas-moleculas>

Nota: Para acceder al código, copie las URL y péguelo en su navegador web.



ACTA DE SUSTENTACIÓN DE TESIS N° 007-2025-FIMGC

**PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE LICENCIADO EN CIENCIAS FÍSICO
MATEMÁTICAS EN LA ESPECIALIDAD DE FÍSICA**

En la Universidad Nacional de San Cristóbal de Huamanga de la ciudad de Ayacucho, en cumplimiento a la **RESOLUCIÓN DECANAL No 054-2025-FIMGC-D**, a los **diez días del mes de abril de 2025**, siendo las **10:00 a.m.**, reunidos en el **Auditorio de la Escuela Profesional de Ingeniería de Minas**, bajo la presidencia del **Mg. Oswaldo MORALES MORALES** y los miembros: **Lic. Raúl CONDORI TIJERA** y **Mg. Walter Mario SOLANO REYNOSO**, actuando como secretario docente el **MSc. Ing. Saul Walter RETAMOZO FERNÁNDEZ**, para proceder a la sustentación de tesis para optar el **Título Profesional de Licenciado en Ciencias Físico Matemáticas en la especialidad de Física**, del bachiller:

Marcio Olwyn MALLQUI PEREZ

Quien presentó la tesis denominada:

**SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN RADIAL DE SCHRÖDINGER UTILIZANDO EL
POTENCIAL CENTRAL MEJORADO DE PÖSCHL-TELLER APLICADAS A
MOLÉCULAS DIATÓMICAS**

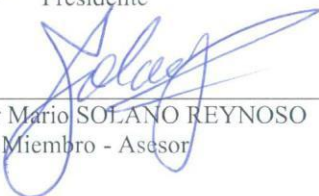
Los señores miembros del jurado, luego de expuesta la tesis y absueltas las preguntas, deliberaron y declararon:

Aprobado con diecinueve (19)

Siendo las **11:30 a.m.** del día **10 de abril de 2025**, culmina el acto de sustentación de tesis, y en conformidad con lo actuado, los miembros del jurado firman al pie del presente.


Mg. Oswaldo MORALES MORALES
Presidente


Lic. Raul CONDORI TIJERA
Miembro


Mg. Walter Mario SOLANO REYNOSO
Miembro - Asesor


MSc. Saul Walter RETAMOZO FERNÁNDEZ
Secretario docente de la FIMGC



UNSCH

FACULTAD DE
INGENIERÍA
DE MINAS, GEOLOGÍA Y CIVIL



CONSTANCIA DE ORIGINALIDAD DE TRABAJO DE INVESTIGACIÓN

CONSTANCIA N° 004-2025-JAHQ-FIMGC/UNSCH

El que suscribe; responsable verificador de originalidad de trabajos de tesis de pregrado con el software Turnitin, en segunda instancia para las **Escuelas Profesionales** de la **Facultad de Ingeniería de Minas, Geología y Civil**; en cumplimiento a la **Resolución de Consejo Universitario N° 039-2021-UNSCH-CU**, reglamento de Originalidad de Trabajos de Investigación de la Universidad Nacional San Cristóbal de Huamanga y **Resolución Decanal N° 697-2024-FIMGC -D**, deja constancia de originalidad de trabajo de investigación, que el/la Sr./Srta.

Nombres y Apellidos : MALLQUI PEREZ, MARCIO OLWYN.
Escuela Profesional : CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS.
Título de la Tesis : SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN RADIAL DE SCHRÖDINGER UTILIZANDO EL POTENCIAL CENTRAL MEJORADO DE PÖSCHL-TELLER APLICADAS A MOLÉCULAS DIATÓMICAS
Evaluación de la Originalidad : 4% Índice de Similitud.
Identificador de la entrega : 2688003597.

por tanto, según los Artículos 12, 13 y 17 del Reglamento de Originalidad de Trabajos de Investigación, es **PROCEDENTE** otorgar la **Constancia de Originalidad** para los fines que crea conveniente.

En señal de conformidad y verificación se firma la presente constancia

Ayacucho, 4 de junio del 2025.

Dr. JUAN ALFREDO HUAMANCHAQUI QUISPE
DNI N°: 41764585

SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN RADIAL DE SCHRÖDINGER UTILIZANDO EL POTENCIAL CENTRAL MEJORADO DE PÖSCHL-TELLER APLICADAS A MOLÉCULAS DIATÓMICAS

por MARCIO OLWYN MALLQUI PEREZ

Fecha de entrega: 04-jun-2025 06:53a.m. (UTC-0500)

Identificador de la entrega: 2688003597

Nombre del archivo: Tesis_de_Marcio_Olwyn_Mallqui_P_rez.pdf (1.98M)

Total de palabras: 16203

Total de caracteres: 74754

SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN RADIAL DE SCHRÖDINGER UTILIZANDO EL POTENCIAL CENTRAL MEJORADO DE PÖSCHL- TELLER APLICADAS A MOLÉCULAS DIATÓMICAS

INFORME DE ORIGINALIDAD

4%

INDICE DE SIMILITUD

4%

FUENTES DE INTERNET

1%

PUBLICACIONES

1%

TRABAJOS DEL
ESTUDIANTE

FUENTES PRIMARIAS

1

qdoc.tips

Fuente de Internet

1%

2

uvadoc.uva.es

Fuente de Internet

<1%

3

documentop.com

Fuente de Internet

<1%

4

zaguan.unizar.es

Fuente de Internet

<1%

5

www.uclm.es

Fuente de Internet

<1%

6

kupdf.net

Fuente de Internet

<1%

7

euler.us.es

Fuente de Internet

<1%

8

www.intechopen.com

Fuente de Internet

<1%

9

Submitted to Tikrit University

Trabajo del estudiante

<1%

10

Edwin Samson Eyube, B. M. Bitrus, Y. Y. Jabil.
"Thermodynamic relations and ro-vibrational

<1%

energy levels of the improved Pöschl-Teller oscillator for diatomic molecules", Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2021

Publicación

11

Submitted to ipn

Trabajo del estudiante

<1%

Excluir citas

Activo

Excluir coincidencias < 30 words

Excluir bibliografía

Activo