

Estructura 3

Aplicaciones Prácticas: Colisiones y Polarizabilidad

Parte A: Colisión Hidrógeno–Kriptón

El objetivo de esta aplicación es calcular la sección eficaz total de la colisión entre un átomo de Hidrógeno con un átomo de Kriptón. Esta colisión ha sido estudiada por Toennies *et al.* (J. Chem. Phys. **71**, 614 (1979)), por lo cual podremos comparar nuestros resultados con el experimento.

Los pasos a seguir son:

1. Suponemos que el potencial de interacción H–Kr se puede modelar con un potencial de *Lennard–Jones*

$$V(r) = \epsilon \left[\left(\frac{\rho}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\rho}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

donde $\epsilon = 5,9$ meV y $\rho = 3,57$ Å.

2. Solucionamos la ecuación de Schrödinger para $l = 0$ desde el origen hasta un punto en el cual el potencial es despreciable.
3. Con la solución radial calculamos el corrimiento de fase δ_0 .
4. Se repite el mismo procedimiento para diferentes l .
5. Una vez obtenidos los δ_l , se obtiene la sección eficaz total.
6. El experimento citado muestra resonancias correspondientes a $l = 4, 5$ y 6 . Debemos realizar los cálculos en las energías correspondientes, de manera de poder comparar nuestros resultados.

Parte B: Polarizabilidad del Estado Fundamental del H

El objetivo de esta aplicación es calcular la polarizabilidad dipolar del estado $1s$ del Hidrógeno. La polarizabilidad es la magnitud del momento dipolar \mathbf{D} . Este dipolo, en presencia de un campo eléctrico \mathbf{E} , experimenta una energía $\Delta = -\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}$. El plan entonces es perturbar el Hamiltoniano atómico con un campo eléctrico (con lo cual la interacción es $H' = eEz$). Una vez calculado el cambio en la energía del estado (Δ) debido a la perturbación, calculamos el dipolo haciendo

$$\mathbf{D} = -\frac{\partial \Delta}{\partial \mathbf{E}}. \quad (2)$$

El procedimiento sugerido es el siguiente:

1. Comprobar que a primer orden la perturbación no produce ningún cambio energético en el estado fundamental.
2. Estimar un límite máximo del cambio de energía haciendo segundo orden de teoría de perturbaciones.
3. Calcular los elementos de matriz y las energías correspondientes para poder evaluar la corrección del segundo orden. Si está todo bien, los resultados deberían converger a un valor cercano al límite obtenido en el paso anterior. Si se obtiene convergencia a un valor diferente, es probable que exista un error numérico, pero también es posible que el error sea conceptual.
4. Una vez que se obtiene la corrección de energía Δ , se obtiene la polarizabilidad dipolar \mathbf{D} . Tener en cuenta que esta es proporcional al campo eléctrico, por lo que se trata de un momento dipolar *inducido*.
5. El cálculo detallado fue realizado por A. Dalgarno, y se encuentra detallado en los libros de Schiff y de Merzbacher.