

Física Teórica II: Práctica Computacional 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.