

Desarrollo de un software útil para la enseñanza de predisociación molecular

Claudia Juliana Villabona García

Director

Jhon Fredy Pérez Torres

Doctor en Química Teórica

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ciencias

Escuela de Química

Bucaramanga

2020

### **Dedicatoria**

A mis padres y hermana por darme todo lo que tengo y soy; por brindarme siempre su infinito amor. A la vida por permitirme ser.

*Muy cerca de mi ocaso, yo te bendigo, vida,  
porque nunca me diste ni esperanza fallida,  
ni trabajos injustos, ni pena inmerecida;  
  
porque veo al final de mi rudo camino  
que yo fui el arquitecto de mi propio destino;  
  
que si extraje las mieles o la hiel de las cosas,  
fue porque en ellas puse hiel o mieles sabrosas:  
cuando planté rosales, coseché siempre rosas.  
  
...Cierto, a mis lozanías va a seguir el invierno:  
¡mas tú no me dijiste que mayo fuese eterno!  
  
Hallé sin duda largas las noches de mis penas;  
mas no me prometiste tan solo noches buenas;  
y en cambio tuve algunas santamente serenas...  
  
Amé, fui amado, el sol acarició mi faz.  
¡Vida, nada me debes!  
¡Vida, estamos en paz!*

*En Paz. Amado Nervo*

### **Agradecimientos**

Deseo agradecer a la Universidad Industrial de Santander, a la Escuela de Química y al Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM) por permitirme desarrollar este proyecto de investigación en sus instalaciones y proporcionarme las condiciones necesarias para la finalización exitosa del mismo.

A los diferentes profesores que han intervenido en mi desarrollo académico y especialmente al profesor Jhon Fredy Pérez Torres por su aporte y dirección; por motivar en mí el amor a la ciencia y la docencia.

**Tabla de contenido**

<b>Introducción</b>	<b>14</b>
<b>1 Hipótesis</b>	<b>19</b>
<b>2 Justificación</b>	<b>19</b>
<b>3 Objetivos</b>	<b>22</b>
3.1 Objetivo general . . . . .	22
3.2 Objetivos específicos . . . . .	22
<b>4 Marco teórico</b>	<b>23</b>
4.1 Estados electrónicos del ion nitrógeno molecular . . . . .	23
4.2 Predisociación del $N_2^+$ . . . . .	25
4.2.1 Efectos isotópicos . . . . .	26
4.3 Tratamiento mecanocuántico de la predisociación . . . . .	27
4.4 Constantes de velocidad . . . . .	28
4.5 Estadística Maxwell-Boltzmann . . . . .	29
4.6 Condiciones iniciales . . . . .	32
<b>5 Metodología</b>	<b>33</b>
<b>6 Resultados y análisis</b>	<b>34</b>
6.1 Energías y funciones de onda en los estados final e inicial de la transición . . . . .	34
6.2 Constantes de predisociación . . . . .	40

DESARROLLO DE UN SOFTWARE ÚTIL PARA LA ENSEÑANZA	7
6.2.1 Constantes de predisociación dependientes de la temperatura .....	47
6.3 Software pedagógico .....	52
<b>7 Conclusiones</b>	<b>54</b>
<b>Referencias Bibliográficas</b>	<b>55</b>
<b>Apéndices</b>	<b>59</b>

**Lista de Tablas**

Tabla	1. <i>Isómeros de espín en los núcleos homonucleares</i> .....	32
Tabla	2. <i>Energías rotovibracionales del ion molecular <math>^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+</math></i> .....	35
Tabla	3. <i>Energías rotovibracionales del ion molecular <math>^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+</math></i> .....	36
Tabla	4. <i>Energías rotovibracionales del ion molecular <math>^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+</math></i> .....	39
Tabla	5. <i>Constantes de predisociación <math>k_{\text{CV}J \rightarrow \text{BV}'J'}</math> (<math>10^8 \text{s}^{-1}</math>) en función del estado rotovibracional.</i> .....	40

### Lista de figuras

Figura	1. Diagrama de orbitales moleculares del ion nitrógeno $N_2^+$ en el estado basal $X^2\Sigma_u^+$ .	24
Figura	2. Representación del proceso de predisiociación vs decaimiento radiativo. ....	25
Figura	3. Energías rotovibracionales para cada isotópomo del ion molecular $N_2^+$ . ....	37
Figura	4. Funciones de onda de los primero cinco estados vibracionales en el estado rotacional basal para el ion molecular nitrógeno $^{28}N_2^+$ . ....	38
Figura	5. Energías de los estados rotovibracionales para el ion molecular nitrógeno $^{28}N_2^+$ .	38
Figura	6. Constantes de predisiociación del isotópomo $^{14}N^{14}N^+$ .....	41
Figura	7. Constantes de predisiociación del isotópomo $^{14}N^{15}N^+$ .....	42
Figura	8. Constantes de predisiociación del isotópomo $^{15}N^{15}N^+$ .....	43
Figura	9. Constantes de predisiociación $^{14}N^{14}N^+$ comparadas con valores teóricos y experimentales reportados. ....	44
Figura	10. Constantes de predisiociación $^{14}N^{15}N^+$ comparadas con valores teóricos y experimentales reportados. ....	44
Figura	11. Constantes de predisiociación $^{15}N^{15}N^+$ comparadas con valores teóricos y experimentales reportados. ....	45
Figura	12. Dependencia isotópica constantes de predisiociación. ....	45
Figura	13. Dependencia rotacional constantes de predisiociación $^{14}N^{14}N^+$ . ....	46
Figura	14. Dependencia rotacional constantes de predisiociación $^{14}N^{15}N^+$ . ....	46
Figura	15. Dependencia rotacional constantes de predisiociación $^{15}N^{15}N^+$ . ....	47
Figura	16. Fracciones molares para cada isotópomo a la temperatura ambiente 293 K. ...	48
Figura	17. Fracciones molares para cada isotópomo a 77K. ....	49

DESARROLLO DE UN SOFTWARE ÚTIL PARA LA ENSEÑANZA	10
Figura 18. Constantes ponderadas por la fracción molar para cada isotópomo a 293K. . . .	50
Figura 19. Constantes pesadas para cada isotópomo a 77K. . . . .	51
Figura 20. Interfaz principal del software pedagógico Predisociación . . . . .	53
Figura 21. Interfaz de inicio del quiz incluido en el software pedagógico . . . . .	53

**Lista de Apéndices**

**Apéndice A. Fourier Grid Hamiltonian Method**

**59**

**Apéndice B. Fermi's Golden Rule**

**70**

**Apéndice C. Software pedagógico sobre predisociación molecular**

**75**

### Resumen

**Título:** Desarrollo de un software útil para la enseñanza de la predisociación molecular\*.

**Autor:** Claudia Juliana Villabona García\*\*.

**Palabras clave:** Predisociación, nitrógeno software pedagógico, estado rotovibracional.

**Descripción:** La predisociación molecular es un tema de gran interés actual que involucra diferentes conceptos estudiados en el pregrado de Química: Distribución de Maxwell-Boltzmann, números cuánticos, curvas de energía potencial, energías de disociación y Ecuación de Schrödinger, entre otros. El estudio teórico de este fenómeno químico permite realizar un análisis completo del mismo en el que se incluyen el cálculo de las constantes de predisociación, a una temperatura dada, así como la dependencia isotópica; fue abordado usando el ion molecular  $N_2^+$ , como sistema prototipo por sus antecedentes en la literatura. Sin embargo el grado de dificultad de esta temática y los procesos erróneos de memorización por parte de los estudiantes motivaron la presentación de este nuevo concepto en un software como herramienta pedagógica, que brinda una ruta eficaz para su integración en el esquema cognitivo del estudiante; siguiendo la teoría de aprendizaje significativo que permite la apropiación del concepto y otorga la facilidad de observar los conocimientos ya existentes como la matriz para anclar los nuevos conocimientos de quien desee aprender sobre predisociación molecular. Finalmente se obtuvieron resultados relevantes respecto a la predisociación que permiten observar las tendencias y cambios en las constantes de reacción respecto al número cuántico rotovibracional y a la temperatura del sistema.

---

\* Trabajo de grado

\*\* Facultad de Ciencias. Escuela de Química. Director: Jhon Fredy Pérez Tórres. Doctor en Química.

### Abstract

**Title:** Development of useful software for teaching molecular predissociation\*.

**Autor:** Claudia Juliana Villabona García\*\*.

**Keywords:** Predissociation, nitrogen, educational software, rovibronic state.

**Description:** Molecular predissociation is a topic of great current interest that involves different concepts studied in undergraduate chemistry: Maxwell-Boltzmann distribution, quantum numbers, potential energy curves, dissociation energies and Schrödinger equation, among others. The theoretical study of this chemical phenomenon allows a complete analysis of it, including the calculation of the predissociation rates, at a given temperature, as well as the isotopic dependence, which has been approached using the molecular ion  $N_2^+$ , as a prototype system due to its background in the literature. However the degree of difficulty of this subject and the erroneous processes of memorization on the part of the students led to the presentation of this new concept in a software as a pedagogical tool, which provides an effective route for its integration into the cognitive scheme of the student, following the theory of significant learning that allows the appropriation of the concept and gives the facility to observe the existing knowledge as the matrix to anchor the new knowledge of whoever wants to learn about molecular predissociation. Finally, relevant results were obtained with respect to predissociation that allow observing the trends and changes in the rates with respect to the rovibrational quantum number and the temperature of the system.

---

\* Investigation Project

\*\* Faculty of Science. Chemistry School. Advisor: Ph. D. Jhon Fredy Pérez Tórres

## Introducción

El capital cultural se impone como una hipótesis indispensable para dar cuenta de las diferencias en los resultados académicos entre un estudiante y otro (Bourdieu, 2015) mediante su definición podemos remitirnos a los “beneficios” o expresado en palabras más acordes, a las herramientas específicas que un estudiante, sin importar a que fracción de la sociedad pertenezca, puede tener a su disposición para el desarrollo de sus habilidades cognitivas. El capital cultural es la especie de capital más eficiente en el mundo de la cultura y la educación (Bourdieu, Nice, y cols., 1977). No basta con tener riquezas económicas, que brindan la oportunidad de acceder a las herramientas, si estas no son utilizadas de forma adecuada o no existe el interés en hacerlo. Es necesario que el estudiante muestre, desarrolle y fortalezca conocimientos, habilidades precisas, sensibilidades artísticas y criterios estéticos como formas de comportamiento que normalmente provienen de hábitos de vida y de trabajos interiorizados que solo se adquieren e incorporan al individuo después de largos procesos (Bourdieu y Wacquant, 1995) pero que pueden ser incentivados y motivados por herramientas bien estructuradas y orientadas hacia el desarrollo de estas habilidades, y en este caso en específico, hacia el aprendizaje de la ciencia.

Frente a la consecución de objetivos educativos es necesario entender y exaltar el papel desarrollado por el mediador, cuyo rol es insustituible y su trabajo requiere la regulación de los procesos de aprendizaje teniendo como principal objetivo una mediación realmente pedagógica que promueva el aprendizaje de los estudiantes mediante el acompañamiento de la construcción de si mismo, el descubrimiento de sus potencialidades y la construcción de conocimientos que le permitan aprovechar las posibilidades que le ofrecen el mundo y la cultura (Aguilar y cols., 2008) el papel del docente no se reemplaza con las nuevas herramientas, no obstante cambia de forma sustancial y pasa de ser la fuente de toda la información a ser un acompañante del estudiante en el proceso

pedagógico de enseñanza, esto es: el estudiante empieza a ser el agente principal de su aprendizaje y para esto utiliza las herramientas que tiene a su disposición; a consecuencia de esto es importante contar con herramientas bien estructuradas que aporten y conduzcan al aprendizaje.

Las tecnologías de información y comunicación (TIC) definen el mundo en la actualidad, tal como ocurrió con la agricultura en la Edad Media. Nos encontramos en la denominada sociedad de la información y el conocimiento. Basta con mirar alrededor para notar que vivimos en un tiempo en el que se presta especial atención a una serie de dispositivos que permiten y ayudan al intercambio de información. En esta misma línea podemos situar la educación del siglo XXI la cual está llamada a avanzar en dirección y a la velocidad adecuada para enfrentar los diversos desafíos que se presentan a diario en las aulas. Por todo lo anterior se puede postular que debe existir una estrecha relación entre la generación del conocimiento y el uso de las nuevas tecnologías de la información (Romaní, 2009).

En el área cognitiva el éxito y el fracaso están cada vez más asociados con los diferentes grados de dominio tecnológico (Martinell y Alvarado, 2000). Cada estudiante debe escoger un método de estudio que se adapte de forma eficaz a sus objetivos académicos, es decir, debe construir el conocimiento a partir de su forma de pensar e interpretar la información.

La forma de aprendizaje ha sido definida por diferentes modelos pedagógicos que establecen los lineamientos a partir de los cuales se definen los propósitos y fines educativos, así como los contenidos y la jerarquía de los conceptos que delimitan la función de los medios que se necesitan para hacer realidad esta construcción teórico-formal en la acción educativa. Se pueden reconocer cuatro modelos principales (Aguilar y cols., 2008): Tradicional, tecnológico, espontaneísta y constructivista. Respecto a la integración de las TIC en el aprendizaje y el modelo a seguir cabe

resaltar, primero que en la realidad el proceso pedagógico no se lleva a través de un solo modelo sino que es una mezcla, y principalmente debe hacerse el reconocimiento del modelo que caracterice las prácticas educativas de los estudiantes a los que va dirigida la propuesta para así brindar una herramienta realmente beneficiosa que contribuya en el desarrollo cognitivo del estudiante.

Este proyecto de investigación centró la mirada en la teoría constructivista que a su vez define el aprendizaje significativo, planteado por (Ausubel, 1983) como la forma de aprendizaje en la que se utilizan los conocimientos previos que tiene el estudiante para elaborar el conocimiento a partir de estos y al mismo tiempo se define como la contraparte del aprendizaje mecánico. Tener conciencia de los conocimientos previos del estudiante y del mismo modo que el estudiante sea consciente de cuáles son estos presaberes, es el primer paso para implementar nuevos conocimientos. La interacción y no la simple asociación, entre los conocimientos más relevantes de la estructura cognitiva y las nuevas informaciones es la característica más importante en el aprendizaje significativo; de este modo los nuevos conocimientos adquieren significado y son integrados a la estructura cognitiva de manera no arbitraria y sustancial, favoreciendo la diferenciación, evolución y estabilidad de los conceptos previos y consecuentemente de toda la estructura cognitiva del estudiante (Ausubel, 1983). En conclusión, los conocimientos ya existentes son la matriz para anclar los nuevos conocimientos, finalmente y como consecuencia, cada nuevo conocimiento debe tener un punto de anclaje para entrar en la estructura cognitiva de cada persona. Con el objetivo de guiar al estudiante por este camino de aprendizaje se desarrolló una aplicación que busca incluir el conocimiento de predisociación molecular siguiendo los lineamientos del aprendizaje significativo y con la cual se podría implementar el aula invertida como forma de enseñanza en la asignatura Dinámica Cuántica Molecular ofrecida por la Escuela de Química de la Universidad Industrial de Santander.

La predisociación molecular de un nivel rotovibrónico en una molécula diatómica es un fenómeno muy estudiado y bien conocido en la espectroscopia electrónica molecular (Raquena, 1981); el estudio de la predisociación permite obtener conclusiones muy valiosas concernientes a la estructura molecular, permite explicar algunos procesos fotoquímicos y su observación experimental permite determinar con precisión las energías de disociación (Hill, 1965). La predisociación molecular es el entrecruzamiento de dos estados electrónicos de una molécula en donde existe un estado rotovibrónico perteneciente a ambos estados. El paso radiativo de un estado a otro es posible así como la disociación. Las primeras observaciones sobre el fenómeno de predisociación fueron descritas por Henri y Col en 1923 (A. Requena, 1978). Inicialmente se utilizó el término para dar explicación a las líneas difusas rotacionales del espectro de la molécula disulfuro al trabajar con estados vibracionales altos. Estas estructuras difusas no eran exhibidas en niveles vibracionales bajos pertenecientes al estado electrónico superior o excitado. Los primeros desarrollos teóricos se atribuyen a Kronig y Herzberg (Raquena, 1981), los cuales proponían la no cuantización de la energía rotacional dentro de una transición entre dos niveles electrónicos, uno estable y uno inestable de igual energía de la molécula; lo que conllevaría a la aparición de bandas difusas en el espectro infrarrojo. La predisociación también es la causa del fenómeno de ruptura de la estructura de bandas de emisión. Al excitar una molécula esta pasará a un estado electrónico poco estable por encima de la energía de disociación, existirán dos posibilidades: el decaimiento radiativo y no radiativo (Paulus, Pérez-Torres, y Stemmler, 2016). Este último conlleva a la disociación de la molécula.

En este trabajo de investigación se estudió la predisociación molecular del  $N_2^+$  en el estado electrónico  $C^2\Sigma_u^+$ , resultado de la interacción con el estado  $B^2\Sigma_u^+$ . El desarrollo implicó el cálculo teórico de las constantes de velocidad de predisociación en función de los números cuánticos

rotacionales y vibracionales. Para ello se implementó un algoritmo matemático que calculó las fracciones molares empleando la distribución de Maxwell-Boltzmann a diferentes temperaturas combinado con el cálculo de los niveles rotovibracionales del estado electrónico  $C^2\Sigma_u^+$  y  $B^2\Sigma_u^+$  del ion molecular en estudio. La finalidad de estos cálculos fue realizar el estudio completo del proceso de predisiociación y asimismo dar énfasis a los conceptos previos que este fenómeno químico conlleva. Con el fin de reunir el material potencialmente significativo, es decir, el material cognitivo relacionable con cada uno de los conocimientos previos del estudiante. Finalmente el acoplamiento de cada uno de los conceptos anteriormente mencionados se plasmó en un software orientado a la enseñanza, utilizando el lenguaje de programación Python. El software desarrollado cuenta con una interfaz amigable con el fin de brindar al estudiante que se encuentre en el proceso de aprendizaje de la predisiociación molecular, una herramienta útil pedagógica y bien estructurada.

## 1. Hipótesis

Es posible construir un software que permita a estudiantes de química y física aprender sobre el fenómeno de predisociación molecular empleando el ion molecular  $N_2^+$  como sistema prototipo.

## 2. Justificación

Desde la aparición del hombre este ha demostrado el interés por comunicarse y hacer llegar de manera efectiva a sus descendientes las herramientas y técnicas necesarias para actuar sobre el mundo y las situaciones circundantes. En el aprendizaje significativo, el aprendiz no es un receptor pasivo; por el contrario, debe hacer uso de los significados que ya internalizó, para poder captar los significados de los nuevos materiales educativos. En ese proceso, al mismo tiempo que se está, progresivamente, diferenciando su estructura cognitiva, se está también haciendo reconciliación integradora para poder identificar semejanzas y diferencias y de esta forma reorganizar su conocimiento. Por consiguiente, el aprendiz construye conocimiento, produce su propio conocimiento. El aprendizaje es un proceso dinámico, amplio, integral y continuo que se incorpora en el ser humano desde el nacimiento hasta la muerte. Dada la importancia que tiene la educación en el desarrollo integral de los habitantes de un territorio, el Estado está en la obligación de brindar, respetar, proteger y cumplir la educación del pueblo (*Ley General de Educación*, 1994) resaltando que proteger abarca el deber de los Estados de tomar medidas positivas que faciliten y ayuden a los particulares y a las comunidades a disfrutar del derecho a la educación.

A continuación se hace una breve descripción del proceso de integración de las TIC con la educación en Colombia a lo largo de los últimos cincuenta años. Estudios de las políticas educativas de Colombia del siglo XX (Rojas, 2007) focalizan la conferencia internacional en 1967 sobre la

“Crisis de la Educación Mundial” realizada en Virginia, Estados Unidos como el antecedente más importante de la introducción de la tecnología educativa. Las recomendaciones dadas incluían el uso de medios tecnológicos y fueron rápidamente recogidas. El paso de inicio se dio con la llegada de los microcomputadores a finales de los años setenta a Colombia; desde este momento se inicia el desarrollo e inclusión de las TIC, pero no fue hasta principios de los años noventa que se trazaron nuevas metas y se mencionó formalmente la intervención de las TIC en diferentes comunidades nacionales académicas. En el transcurso de esta década se desarrollaron tres factores claves para la integración de las TIC y la educación (Mosquera, 2012): Primero, movimientos políticos desencadenaron la segunda generación más grande de reformas educativas en el país evidenciadas en La Ley general 115 de 1994 y el Plan de Apertura Educativa de 1991 dirigido por el Departamento Nacional de Planeación. Segundo, la aparición del internet y la multimedia en el país permitieron la utilización homogénea y sin costos significativos de los recursos tecnológicos que anteriormente tenían acceso limitado y afirmaban la condición ventajosa de quienes poseían estos saberes especializados. Por último la reacomodación del sector empresarial permitió la entrada de nuevas empresas al campo de la producción de software educativos y como consecuencia favoreció el desarrollo tecnológico.

Avanzaremos en esta línea de tiempo hasta la última década donde oficialmente hay más aplicaciones tecnológicas que personas en el mundo, con una cifra de 7.400 millones de aplicaciones aproximadamente (Alonso-Arévalo, 2017). Lo anterior permite ver la viabilidad, en Colombia y el mundo, de la integración de las TIC en el aula de clase como herramienta de mediación del aprendizaje, paralelo a los resultados obtenidos en diferentes estudios donde se relaciona la interacción de los estudiantes y las nuevas tecnologías con el desarrollo cognitivo y el constructivismo (S. H. Requena, 2008). Con la incursión de las TIC en la vida cotidiana de todos los ciudadanos el gobierno adquirió la responsabilidad de impulsar el aprovechamiento eficaz de dichas tecnologías

en todas las áreas educativas; como resultado de este planteamiento en el 2014 el Ministerio de Educación define los contenidos propicios para la mejora del proceso de enseñanza y aprendizaje, no obstante se destacan inequidades en el uso de las tecnologías de información especialmente en las zonas rurales. Finalmente en 2014 como resultado de diferentes programas gubernamentales Colombia se posiciona como el país 7 de la región y 63 del mundo en aprovechamiento y uso de las TIC según el Foro Económico Mundial (Hernández y Arenas, 2014).

Actualmente se encuentra en vigencia el Plan Estratégico de Tecnologías de la Información 2019-2022 propuesto por el Ministerio de Educación, el cual busca generar condiciones y oportunidades que favorezcan al desarrollo educativo, dicho en otras palabras, el objetivo planteado obedece al cierre de brechas de acceso y calidad a las TIC, especialmente en el entorno rural.

Este trabajo de investigación buscó continuar y aportar a la investigación de la predisociación del  $N_2^+$ , en donde se considerarán los efectos isotópicos del fenómeno que son normalmente desestimados, pero que actualmente representan un tema de interés (Hrodmarsson y cols., 2019)(Inhester, Greenman, Rudenko, Rolles, y Santra, 2019) y se complementaron con el desarrollo de un software pedagógico que finalmente quiso contribuir a la elaboración de estrategias de enseñanza y educación de la Química.

El Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM) cuenta ya con experiencia en la generación de material dirigido para el mejoramiento de la enseñanza de la Química (Pérez, 2019). Una inmediata aplicación de los resultados de este trabajo es su uso en la asignatura Dinámica Cuántica Molecular que ofrece la escuela de Química de la Universidad Industrial de Santander.

### 3. Objetivos

#### 3.1. Objetivo general

Diseñar un software útil para la enseñanza de la predissociación molecular empleando  $N_2^+$  como sistema prototipo.

#### 3.2. Objetivos específicos

Implementar un programa computacional que resuelva la ecuación de Schrödinger para el movimiento rotovibracional de una molécula diatómica.

Calcular las funciones de onda y las energías de los niveles rotovibracionales de los estados electrónicos  $C^2\Sigma_u^+$  y  $B^2\Sigma_u^+$  del ion molecular  $N_2^+$ .

Calcular las constantes de predissociación del estado electrónico  $C^2\Sigma_u^+$  del  $N_2^+$  en función del número cuántico vibracional  $v$  y el número cuántico rotacional  $J$ .

Implementar un algoritmo que calcule las fracciones molares  $\chi_{v,J}$  del  $N_2^+$  para cada  $J$ , empleando la distribución de Maxwell-Boltzmann a una temperatura  $T$ .

Calcular la velocidad de predissociación del  $N_2^+$  para una temperatura  $T$ .

## 4. Marco teórico

### 4.1. Estados electrónicos del ion nitrógeno molecular

Al ion molecular  $N_2^+$  se le conocen aproximadamente 106 estados electrónicos que surgen de 6 de los límites más bajos de su disociación (Cartwright y Dunning Jr, 1975). Se han realizado estudios teóricos (Paulus y cols., 2016) y experimentales (Van de Runstraat, De Heer, y Govers, 1974) en los cuales se les da reconocimiento especial a cinco estados:  $X^2\Sigma_g^+$ ,  $A^2\Pi_u$ ,  $B^2\Sigma_u^+$ ,  $C^2\Sigma_u^+$ ,  $D^2\Pi_g$ . Para la descripción de la predisiociación es necesario traer a colación el estado basal X y los primeros estados excitados B y C, de esta forma los estados electrónicos relevantes para este estudio son: el estado electrónico basal que corresponde al estado  $X^2\Sigma_g^+$  y los dos siguientes estados electrónicos excitados, el  $B^2\Sigma_u^+$  y el  $C^2\Sigma_u^+$ . Las configuraciones electrónicas dominantes de estos estados en la predisiociación (Paulus y cols., 2016) se enlistan a continuación:

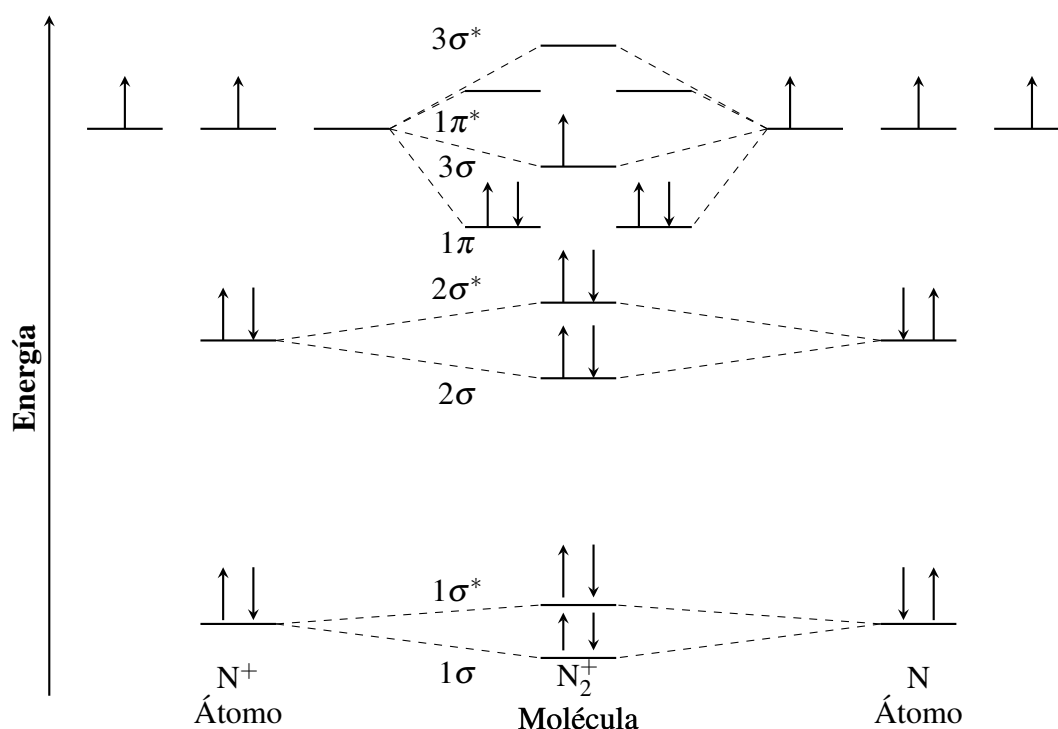
$$\checkmark X^2\Sigma_g^+: (1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(3\sigma_g)^1(1\pi_u)^4$$

$$\checkmark B^2\Sigma_u^+: (1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^1(3\sigma_g)^2(1\pi_u)^4$$

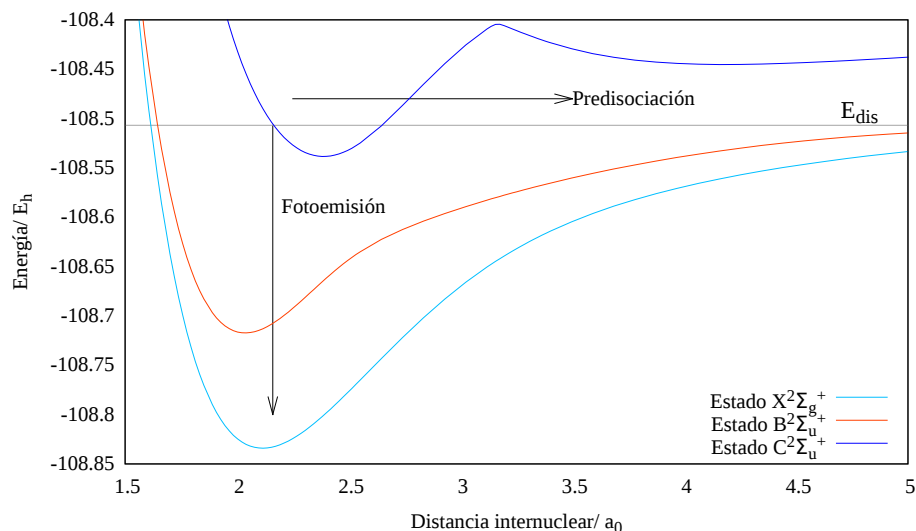
$$\checkmark C^2\Sigma_u^+: (1\sigma_g)^2(1\sigma_u)^2(2\sigma_g)^2(2\sigma_u)^2(3\sigma_g)^1(1\pi_u)^3(1\pi_g)^1$$

Asimismo la configuración electrónica del estado basal del ion molecular se puede representar en un diagrama de orbitales moleculares (Figura 1) donde los estados excitados corresponderán a la promoción de electrones hacia niveles electrónicos con energía superior. En la Figura 2 se muestran las curvas de energía potencial de los estados electrónicos X, B, C en función de la distancia internuclear. El paquete de onda en el estado  $C^2\Sigma_u^+$  que se forma a partir de la ionización de  $N_2$ , se transfiere continuamente al estado  $B^2\Sigma_u^+$  a través del operador de energía cinética de los núcleos.

Los niveles rotovibracionales pueden ser definidos al tomar un sistema en el que ocurren cambios asociados a la energía vibracional de una molécula, a su vez esto conlleva a cambios en la energía rotacional. Un cambio entre dos niveles rotacionales pertenecientes a dos estados electrónicos diferentes se le denomina transición rotovibrónica, por otro lado, la referencia de nivel rotovibrónico indica un estado correspondiente a un subnivel rotacional específico en un nivel vibracional específico dentro de un estado electrónico a su vez específico.



**Figura 1.** Diagrama de orbitales moleculares del ion nitrógeno  $N_2^+$  en el estado basal  $X^2\Sigma_u^+$ . Los espines se encuentran representados por flechas y su orientación ilustra su respectivo signo, la transición electrónica a un estado excitado se mostraría como la promoción de los últimos electrones a un orbital molecular de mayor energía.



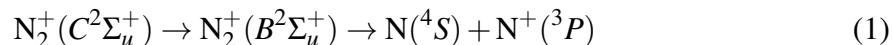
**Figura 2.** Representación del proceso de predisiociación vs decaimiento radiativo. La línea azul oscuro representa el estado excitado  $C^2\Sigma_u^+$  el cual corresponde al estado electrónico que se alcanza en la preparación del sistema; formado a partir de la ionización del  $N_2$  este debe superar la energía de ionización, ilustrada en gris, para que ocurra predisiociación. Si la energía no es superada entonces la forma exclusiva de relajación del sistema es la emisión, de lo contrario habrá competencia entre los dos procesos de decaimiento.

#### 4.2. Predisiociación del $N_2^+$

Una vez se prepara el sistema molecular  $N_2^+$  en el estado electrónico  $C^2\Sigma_u^+$ , línea azul oscuro en la Figura 2, este puede presentar dos procesos:

1. Decaimiento radiativo: este camino de decaimiento es el único posible en los niveles vibracionales más bajos ( $v \leq 2$ ); en este caso, el estado  $C^2\Sigma_u^+$  emite radiación electromagnética (fotones) terminando en el estado  $X^2\Sigma_g^+$  ( $C^2\Sigma_u^+, v \rightarrow X^2\Sigma_g^+, v'$ ) (Ver Figura 2), esta emisión ocurre hacia longitudes de onda entre 127 y 223 nm (Hrodmarsson y cols., 2019).
2. Decaimiento no radiativo: los electrones intercambian momento, es decir, energía cinética con los núcleos produciéndose así una transición desde el estado  $C^2\Sigma_u^+$  hacia el estado  $B^2\Sigma_u^+$  ( $C^2\Sigma_u^+, v \rightarrow B^2\Sigma_u^+, v'$ ). Observe la flecha horizontal en la Figura 2, en este caso existe la

posibilidad de terminar en el pozo de energía potencial del estado  $B^2\Sigma_u^+$  y por tanto no se presentará una ruptura de la molécula. La otra posibilidad es terminar con una energía superior a la profundidad del pozo de energía potencial del estado  $B^2\Sigma_u^+$ , en este caso se presentará la ruptura del enlace molecular dejando como productos  $N(^4S) + N^+(^3P)$  (Van de Runstraat y cols., 1974), es decir un átomo de nitrógeno y un catión nitrógeno. Este último proceso se conoce como predisociación molecular, es posible para los niveles  $v \geq 3$  y corresponde a una reacción de orden cero (Baer y Hase, 1996). La reacción se define como:



La predisociación del  $N_2^+$  se ha observado experimentalmente preparando el estado  $C^2\Sigma_u^+$  a partir de la ionización del  $N_2$  con un bombardeo de un haz de fotones (Singh y Rai, 1966) de energía  $h\nu = 25 \text{ eV}$  ( $\lambda = 49.6 \text{ nm}$ ). Otra forma de preparar el estado  $C$  del  $N_2^+$  es por medio de la colisión de moléculas de  $N_2$  con iones  $He^+$  (Govers, Fehsenfeld, Albritton, Fournier, y Fournier, 1974).

#### 4.2.1. Efectos isotópicos

En investigaciones experimentales recientes (Hrodmarsson y cols., 2019) se han evaluado los efectos isotópicos en la predisociación de los estados excitados del ion molecular  $N_2^+$  mediante el uso de la fotoionización de moléculas homo y hetero nucleares y se han podido establecer las siguientes afirmaciones:

- ✓ La predisociación en el estado  $C^2\Sigma_u^+$  del  $^{14}N_2^+$  es aproximadamente 10 veces más rápida que la emisión radiativa al estado electrónico basal, para todos los niveles vibracionales  $v \geq 3$ .
- ✓ Para el isótopo heteronuclear  $^{14}N^{15}N^+$  en los niveles  $v \geq 3$ , la predisociación es predominante como camino de decaimiento pero es al menos 6 veces menor comparado con el  $^{14}N_2^+$  (Van de

Runstraat y cols., 1974; Govers y cols., 1974).

- ✓ Tanto la predisociación como el decaimiento radiativo presentan probabilidades semejantes en el isótopo  $^{15}\text{N}_2^+$  para los niveles  $v=3, 4$  y  $5$ .
- ✓ No hay un efecto isotópico significativo observado para los otros niveles vibracionales  $v \leq 3$ .

### 4.3. Tratamiento mecanocuántico de la predisociación

Para describir la predisociación, es necesario tener en cuenta la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que describe el movimiento nuclear en cada una de las curvas de energía potencial.

$$\left[ -\frac{\hbar^2 d^2}{2\mu dR^2} + V_\alpha(R) + \frac{J(J+1)}{2\mu R^2} \right] \Psi_{\alpha v J}(R) = E_{\alpha v J} \Psi_{\alpha v J}(R) \quad (2)$$

La masa reducida ( $\mu$ ) es utilizada con el fin de abordar un problema de dos cuerpos con masa 1 y 2 respectivamente; en este caso, dos átomos de nitrógeno, como un problema de un solo cuerpo que se encuentra en el baricentro de masa y se define como:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (3)$$

El primer término del Hamiltoniano (ecuación 2, términos entre corchetes) corresponde a la energía cinética de los núcleos, el segundo término corresponde a la curva de energía potencial  $V_\alpha(R)$ , es decir, hace referencia a la curva de energía potencial  $\alpha = C$  o  $\alpha = B$ , y el último término hace referencia a la rotación de la molécula. Observe que el segundo y tercer término se pueden agrupar en uno solo como sigue:

$$W_{\alpha J}(R) = V_\alpha(R) + \frac{J(J+1)}{2\mu R^2} \quad (4)$$

#### 4.4. Constantes de velocidad

La regla de oro de Fermi permite determinar la probabilidad de que se produzca una transición dada por unidad de tiempo (Paulus y cols., 2016), y depende directamente del acoplamiento entre los estados final e inicial de la transición y del número de formas en los que la transición puede ocurrir, es decir, la densidad de estos estados.

$$k_{CvJ \rightarrow Bv'J'} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_{Bv'J'}) |H_{CvJ, Bv'J'}|^2 \delta(E_{CvJ} - E_{Bv'J'}) \quad (5)$$

En este caso  $J'=J$ . Definimos el elemento de matriz de transición entre estados vibrónicos,  $H_{CvJ, Bv'J'}$ , como se muestra a continuación:

$$H_{CvJ, Bv'J'} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \Psi_{CvJ}(R) dR \left[ 2T_{CB}^{(1)}(R) \frac{\partial}{\partial R} + T_{CB}^{(2)}(R) \right] \Psi_{Bv'J'}(R) \quad (6)$$

Y la densidad de estados:

$$\rho(E_{Bv'J'}) = \frac{2}{E_{B(v'+1)J'} - E_{B(v'-1)J'}} \quad (7)$$

Note que la transición entre estados vibrónicos T está mediada por los acoplamientos no adiabáticos entre el movimiento nuclear y el movimiento electrónico de la molécula, es decir, la variación de las funciones de onda electrónicas con respecto a la distancia internuclear  $R$ :

$$T_{CB}^{(1)}(R) = \int \Phi_C(\mathbf{x}; R) \frac{\partial}{\partial R} \Phi_B(\mathbf{x}; \mathbf{R}) d\mathbf{x} \quad (8)$$

$$T_{CB}^{(2)}(R) = \int \Phi_C(\mathbf{x}; R) \frac{\partial^2}{\partial^2 R} \Phi_B(\mathbf{x}; \mathbf{R}) d\mathbf{x} \quad (9)$$

Las funciones de onda multielectrónicas  $\Phi_\alpha(\mathbf{x}; R)$ , con  $\alpha = C, B$  resultan de la solución numérica

de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el movimiento electrónico, que en unidades atómicas ( $\hbar = e = m_e = 1/4\pi\epsilon_0 = 1$ ) toma la siguiente forma:

$$\left[ -\sum_{i=1}^{13} \frac{\nabla_i^2}{2} + \sum_{i<j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{A=1}^2 \sum_{i=1}^{13} \frac{Z_A}{|\mathbf{R}_A - \mathbf{r}_i|} + \frac{Z_A Z_B}{R} \right] \Phi_\alpha(\mathbf{x}; R) = V_\alpha(R) \Phi_\alpha(\mathbf{x}; R) \quad (10)$$

#### 4.5. Estadística Maxwell-Boltzmann

La estadística planteada por J.C. Maxwell y L. Boltzmann (Tame, 2019) establece la conexión entre las propiedades macroscópicas de un sistema y las propiedades microscópicas de cada uno de sus componentes. Un sistema puede representarse o definirse por medio de los valores de los observables de su macroestado y esto se lleva a cabo con la aplicación de las denominadas funciones de estado. Las funciones de estado relacionan el volumen, la presión y la cantidad química; por otro lado es posible representar un sistema de forma cuántica, por medio de las funciones de onda que provienen de la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger. Adicionalmente, podemos remitirnos a la descripción clásica de un sistema por medio de las coordenadas espaciales y velocidades. A pesar de la aparente diferencia entre estas representaciones, cada una se encuentra estrechamente conectada a las otras, pues en definitiva, se trata del mismo sistema y solo es posible realizar la medida de una propiedad teniendo en cuenta el promedio de las medidas en cada microestado; esto a su vez se encuentra mediado por la distribución de partículas en cada uno y así con la contribución que tienen sobre el sistema completo que se encuentra directamente relacionado con la probabilidad de ocupación de los microestados.

En definitiva la estadística MB puede responder la pregunta (Sears y Salinger, 1978): ¿En qué proporción se distribuyen un total de N partículas entre los niveles rotacionales de energía de un sistema definido a una temperatura T dada?

Con el fin de tener en cuenta los efectos isotópicos sobre la predisiociación molecular del ion  $N_2^+$ ; este proyecto de investigación abordó el estudio de dos iones homonucleares ( $^{14}N^{14}N^+$  y  $^{15}N^{15}N^+$ ) y un ion heteronuclear ( $^{14}N^{15}N^+$ ); para cada uno de los cuales se realizaran los cálculos propuestos en los objetivos, por consiguiente, se incluyó la estadística MB en el tratamiento.

Iniciando con el ion diatómico heteronuclear que se empleó en este trabajo de investigación ( $^{14}N^{15}N^+$ ). Este ion presenta menores restricciones en el número cuántico rotacional. Dado que sus núcleos son distinguibles no es posible realizar la operación inversión como operación de simetría, en consecuencia las funciones de onda que describen el sistema no tienen restricción de simetría. Dicho de otra manera, cada microestado de este sistema queda definido por el estado de cada una de las partículas que lo forman, los cuales no tienen restricción y lo anterior se puede describir mediante la función de partición rotacional  $F_{\alpha\nu}$  para cada estado electrónico  $\alpha$  y vibracional  $\nu$  que tiene la siguiente forma:

$$F_{\alpha\nu} = \sum_J g_J e^{-E_{\alpha\nu J}/KT} \quad (11)$$

Donde  $g_J = 2J + 1$  es la degeneración de cada estado rotacional,  $K$  es la constante de Boltzmann,  $T$  la temperatura y  $E_{\alpha\nu J}$  corresponde a la energía rotovibracional del sistema que se obtiene a partir de la ecuación de Schrödinger (Ecuación 2). Luego, para una temperatura determinada  $T$ , el número de moléculas en cada estado rotacional  $J$  se calcula como:

$$n_{\alpha\nu J} = \frac{N}{F_{\alpha\nu}} e^{-E_{\alpha\nu J}/KT} \quad (12)$$

Donde  $N$  es el número de moléculas que conforman el ensamble macroscópico. Si tomamos  $N = N_A$ , siendo  $N_A$  es el número de Avogadro, la fracción molar  $\chi_{\alpha\nu J}$  de moléculas en el estado

rotacional  $J$  será:

$$\chi_{\alpha v J} = \frac{1}{F_{\alpha v}} e^{-E_{\alpha v J}/KT} g_J. \quad (13)$$

La cual solo será relevante en este estudio para  $\alpha = C$ . Finalmente para obtener las constantes en función de la temperatura  $D_v(T)$ , se utiliza la fracción molar de la Ecuación 13 para determinar la contribución de cada constante a la temperatura deseada según la distribución MB.

$$D_v(T) = \sum_J k_{vJ} * \chi_{\alpha v J} \quad (14)$$

En lo que respecta a los iones homonucleares se debe tener especial cuidado en el tratamiento estadístico considerando que existen restricciones sobre los estados cuánticos en los que se encuentran las partículas del sistema. En este caso los núcleos presentan la inversión como operación de simetría y esto lleva a considerar el movimiento nuclear, en donde se puede diferenciar entre fermiones (partículas con espín semientero) y bosones (partículas con espín entero). Por esta razón, la desemejanza en la simetría implica diferencias estadísticas en la población de estados rotacionales pares e impares (Fleischer, Sh. Averbukh, y Prior, 2007). Para el ion homonuclear  $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$  que se encuentra compuesto por un colectivo de dos fermiones se consideran, en la construcción de la función de onda, un estado triplete nuclear correspondiente a la función de espín simétrica y un estado singlete nuclear correspondiente a la función de espín antisimétrica. En cada uno de los casos se dan restricciones diferentes para el valor de  $J$ ; de igual forma se puede explicar para el colectivo de dos bosones  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$ . La paridad del estado rotacional y la simetría de la función de onda correspondiente en ambos casos se puede observar en la Tabla 1 y son estos valores los que se utilizarán para calcular las fracciones molares de cada estado a partir de la Ecuación 13.

**Tabla 1.***Isómeros de espín en los núcleos homonucleares*

Isótopo	Simetría de la función de espín	Paridad del estado rotacional (J)	Simetría de la función de onda total
$^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$	Simétrica	Impar	Impar
	Antisimétrica	Par	Impar
$^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$	Simétrica	Impar	Impar
	Antisimétrica	Par	Impar

Así, es conveniente definir la función de onda del sistema separando la parte vibracional de la rotacional como se muestra a continuación:

$$X_{\alpha v J M_J}(R, \Theta, \Phi) = \Psi_{\alpha v J}(R) \mathcal{Y}_{J M_J}(\Theta, \Phi). \quad (15)$$

#### 4.6. Condiciones iniciales

Una vez el usuario se sitúe dentro del software diseñado para el aprendizaje de la predisociación, se encontrará frente a tres posibilidades respecto a las condiciones iniciales, posterior a la elección del isótopo con el cuál desea iniciar la simulación; podrá seleccionar la temperatura, estado vibracional o rotacional inicial del estado electrónico  $C$  del  $\text{N}_2^+$ .

Con la temperatura se calculan las poblaciones de los estados rotacionales iniciales  $J$ -; de aquí se obtienen las constantes de predisociación para los posibles estados vibrónicos finales; seguido de esto se emplea la estadística de Maxwell-Boltzman (MB) para el cálculo de las poblaciones

rotacionales iniciales. Lo anterior, se lleva a cabo seleccionando los parámetros y opciones dentro la interfaz gráfica desarrollada. Cabe mencionar que este tipo de software se emplean ampliamente como ayudas en algunas asignaturas de otras universidades. Por ejemplo, para la enseñanza de dinámica cuántica de sistemas moleculares se suele utilizar el software libre Wavepacket (Schmidt y Lorenz, 2014). Otro ejemplo de este tipo de paquetes de software libre son los desarrollados y publicados por la MIT (Massachusetts Institute of Technology) para facilitar y dinamizar el aprendizaje de sus estudiantes (MIT, 2005a) (MIT, 2005b).

## 5. Metodología

Para el desarrollo exitoso de este trabajo, se abordó cada objetivo como sigue:

1. Las curvas de energía potencial  $V_{\alpha}(R)$  y los acoplamientos no adiabáticos  $T^{(1)}$  y  $T^{(2)}$  de la Ecuación 8 que son función de  $R$  se tomaron de la literatura, específicamente de (Paulus y cols., 2016).
2. Desarrollo de un programa computacional empleando el lenguaje de programación FORTRAN, por medio del cual se resolvió la Ecuación 2 y que proporcionó las funciones nucleares rotovibrónicas  $\Psi_{\alpha v J}$  y las energías  $E_{\alpha v J}$ . Para este desarrollo se empleó el método de Fourier Grid Hamiltonian (Marston y Balint-Kurti, 1989). En el **Apéndice A** se muestra el código del programa construido junto con el archivo de entrada; cuyos resultados se utilizaron como base para la construcción del software pedagógico.
3. Se calcularon las constantes de predisociación  $k_{CvJ \rightarrow Bv'J'}$  a través de los elementos de matriz  $H$  (Ecuación 6) que a su vez se calcularon a partir de las funciones  $\Psi_{\alpha v J}$  previamente determinadas.

4. Finalmente se procedió a la elaboración del software con fines pedagógicos de la predisociación junto con las constantes correspondientes utilizando el lenguaje de programación Python, dentro del cual se incluyó el cálculo de la distribución de Maxwell-Boltzmann y así las constantes de predisociación dependientes de la temperatura. La simulación inicia cuando el usuario (estudiante) hace la elección del isótopo con el cual desea trabajar y seguido de esto proporciona las condiciones de reacción (temperatura y con ella las poblaciones de estados rotovibracionales iniciales). El usuario cuenta con una interfaz gráfica que le permite explorar diferentes opciones relacionadas con el aprendizaje de la predisociación molecular.

## 6. Resultados y análisis

### 6.1. Energías y funciones de onda en los estados final e inicial de la transición

Para llevar a cabo el primer objetivo, cuyo enunciado respondía al cálculo teórico de las energías de los niveles rotovibracionales del ion molecular, en los estados  $C^2\Sigma_u^+$  y  $B^2\Sigma_u^+$  que conllevan a la predisociación molecular, se implementó un programa computacional (ver **Apéndice A**) el cual resuelve la ecuación de Schrödinger para el estudio del movimiento rotovibracional de cualquier sistema diatómico.

Se hizo uso del código Fortran para el cálculo específico de las funciones de onda y las energías del  $N_2^+$  y cada uno de sus isotopómeros (ver **Apéndice A**); con lo que se obtuvieron valores de las energías concordantes con los resultados registrados en la literatura (Hrodmarsson y cols., 2019) lo que validó el método utilizado para el cálculo teórico de las energías y paralelo a esto se evidenció dependencia rotacional e isotópica mostrada entre la tercera y cuarta cifra decimal de los resultados numéricos que se pueden observar en las Tabla 2, Tabla 3 y Tabla 4 para cada isotopómero respectivamente siendo el  $^{14}N^{14}N^+$  el más energético debido a ser el ion de menor masa

que se refleja en una mayor energía cinética; por otro lado se conserva una misma tendencia entre isotopómeros, ver Figura 3, en la cual se muestran en el eje de las abscisas los niveles rotacionales y cada línea horizontal representa los estados vibracionales con las respectivas energías en el eje de las ordenas. Los niveles de menor energía fueron obtenidos para el estado electrónico  $B^2\Sigma_u^+$  tal como se esperaba, basándose en esto se buscó ilustrar en la Figura 5 los cambios rotovibracionales utilizando solo el isotopómero  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$  esperando que refleje el compartamiento de todos los isotopómeros.

En la Figura 3 se evidenció que se necesitan al rededor de 30 estados rotacionales para alcanzar energéticamente el siguiente estado vibracional, además, que a partir del estado vibracional  $v=3$  se sobrepasa la energía de disociación lo que corrobora que a partir de este se dará la predisiociación molecular. Adicionalmente se obtuvieron las funciones de onda y son mostradas en la Figura 4 para los primeros cinco estados vibracionales del  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$  en el estado rotacional basal ( $J=0$ ).

**Tabla 2.**

*Energías rotovibracionales del ion molecular  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$*

Estado vibracional	Energía ( $E_h$ )			
	$v$	$J=3$	$J=7$	$J=9$
0		-108.53368	-108.53338	-108.53314
1		-108.52437	-108.52407	-108.52384
2		-108.51518	-108.51488	-108.51465
3		-108.50609	-108.50580	-108.50557
4		-108.49713	-108.49684	-108.49661
5		-108.48831	-108.48801	-108.48779
6		-108.47963	-108.47934	-108.47911

... continúa en la siguiente página

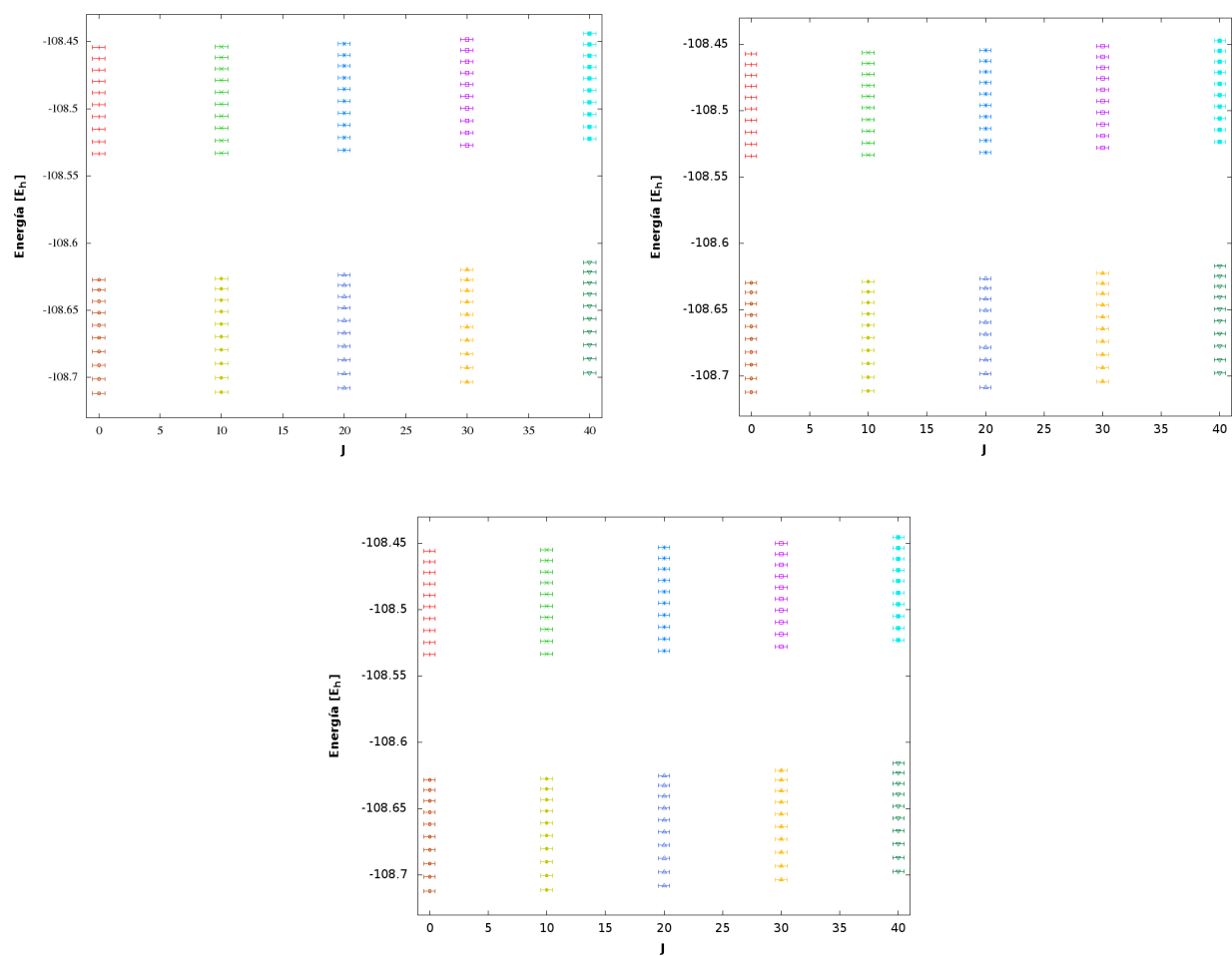
**Tabla 2... continuación**

Estado vibracional	Energía ( $E_h$ )		
	$v$	J=3	J=7
7	-108.47111	-108.47082	-108.47060
8	-108.46275	-108.46246	-108.46224
9	-108.45457	-108.45428	-108.45406

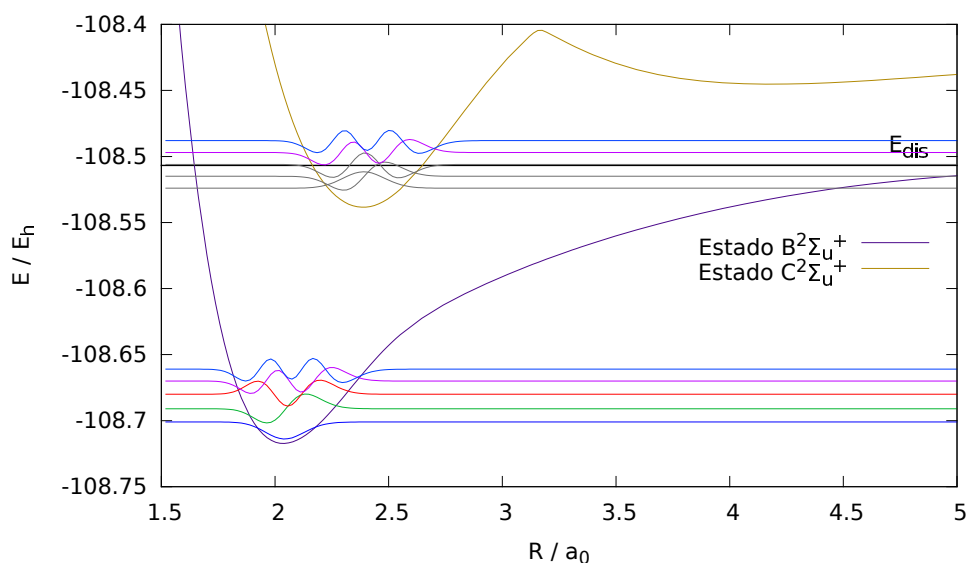
**Tabla 3.**

Energías rotovibracionales del ion molecular  $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+$

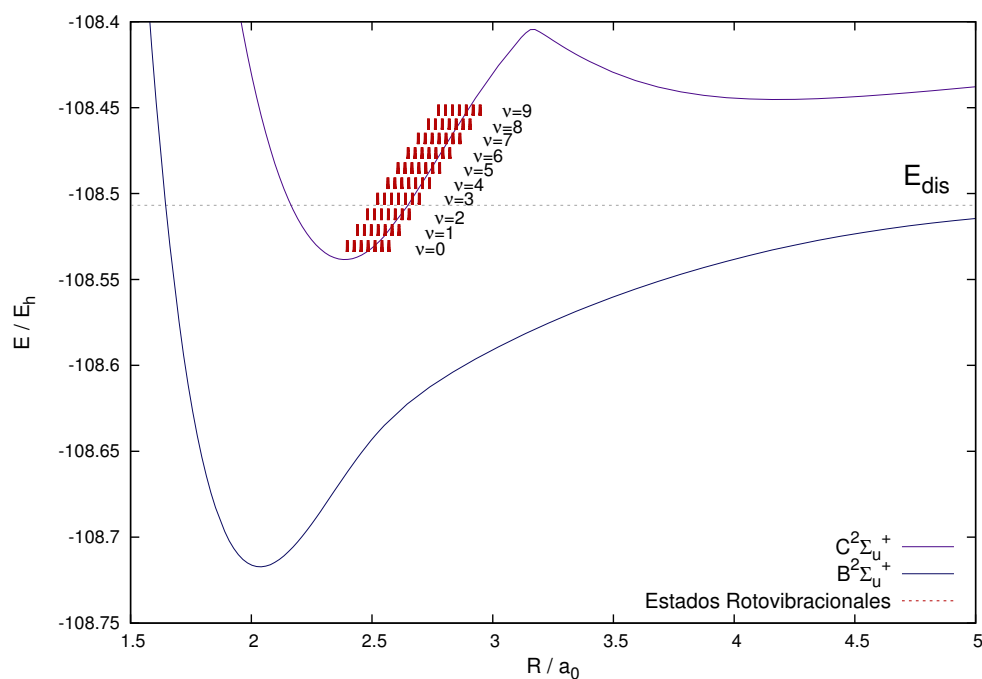
Estado vibracional	Energía ( $E_h$ )		
	$v$	J=3	J=7
0	-108.53374	-108.53345	-108.53322
1	-108.52455	-108.52426	-108.52404
2	-108.51547	-108.51518	-108.51496
3	-108.50650	-108.50621	-108.50599
4	-108.49765	-108.49737	-108.49714
5	-108.48893	-108.48865	-108.48843
6	-108.48036	-108.48007	-108.47985
7	-108.47193	-108.47165	-108.47143
8	-108.46367	-108.46339	-108.46317
9	-108.45557	-108.45529	-108.45507



**Figura 3.** Energías rotovibratorias para cada isotopómero del ion molecular  $\text{N}_2^+$ . En el eje de las ordenadas se observa el cambio rotacional y cada línea horizontal representa un estado vibracional.  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$  [superior izquierda],  $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+$  [superior derecha],  $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$  [inferior]



**Figura 4.** Funciones de onda de los primero cinco estados vibracionales en el estado rotacional basal para el ion  $^{28}\text{N}_2^+$ . Las funciones de onda del estado C que no predissociacion se ilustran en gris.



**Figura 5.** Energías de los estados rotovibracionales para el ion molecular nitrógeno  $^{28}\text{N}_2^+$ . Se etiquetan los respectivos niveles vibracionales y los primeros 7 estados rotacionales se ilustran de color rojo.

**Tabla 4.***Energías rotovibracionales del ion molecular  $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$* 

Estado vibracional $v$	Energía ( $E_h$ )		
	J=3	J=7	J=9
0	-108.53382	-108.53354	-108.53332
1	-108.52479	-108.52451	-108.52429
2	-108.51587	-108.51559	-108.51537
3	-108.50705	-108.50677	-108.50655
4	-108.49834	-108.49806	-108.49785
5	-108.48976	-108.48949	-108.48927
6	-108.48132	-108.48104	-108.48083
7	-108.47302	-108.47275	-108.47254
8	-108.46488	-108.46461	-108.46440
9	-108.45689	-108.45662	-108.45642

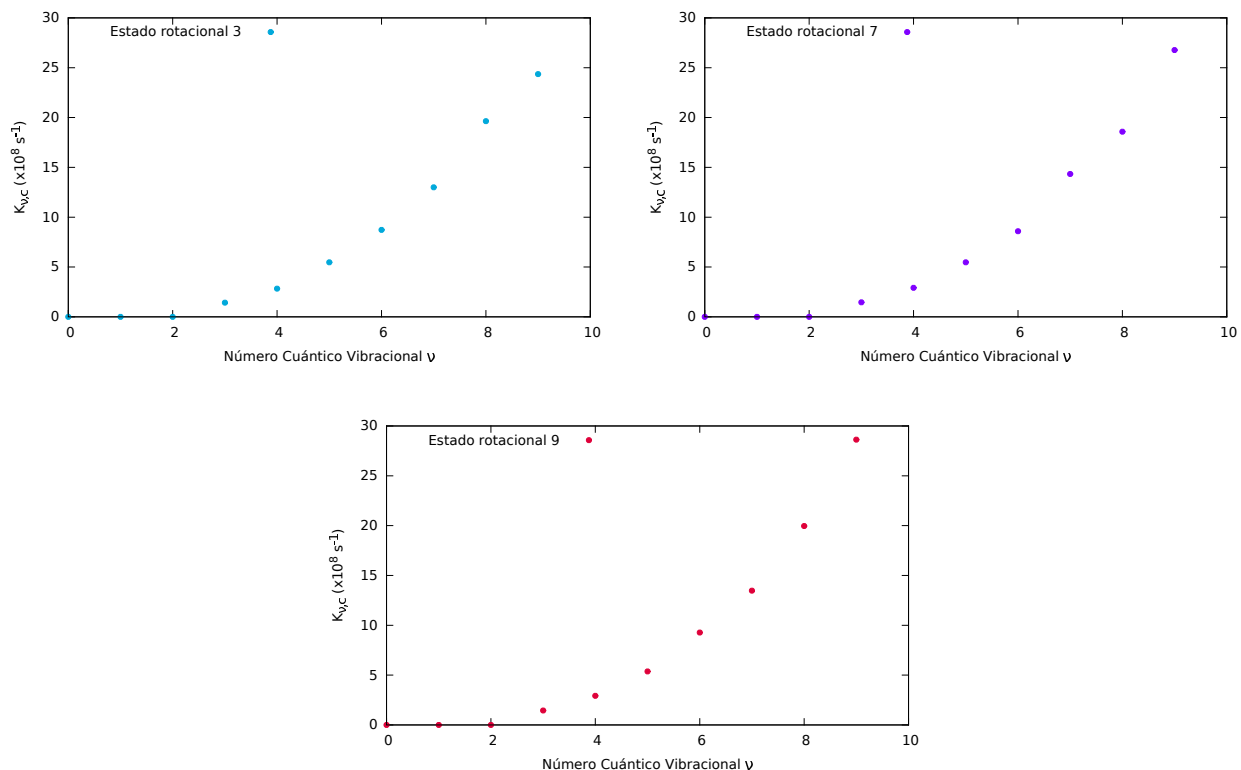
## 6.2. Constantes de predisociación

**Tabla 5.**

Constantes de predisociación  $k_{CvJ \rightarrow Bv'J'} (10^8 s^{-1})$  en función del estado rotovibracional.

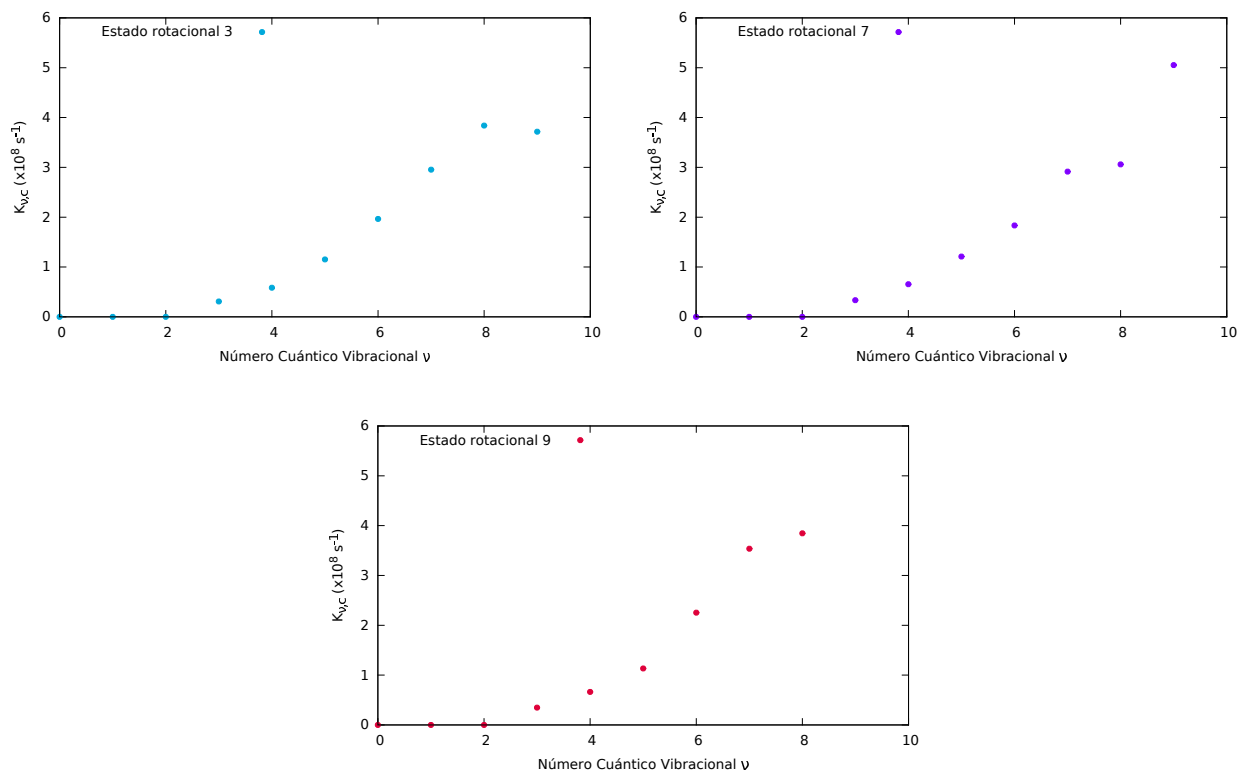
v	$^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$			$^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+$			$^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$		
	J = 3	J = 7	J = 9	J = 3	J = 7	J = 9	J = 3	J = 7	J = 9
3	1.42412	1.45808	1.44564	0.30899	0.33370	0.34749	0.04244	0.09870	0.08662
4	2.826260	2.91432	2.92264	0.58464	0.65440	0.66373	0.25454	0.23128	0.21076
5	5.47392	5.46737	5.36546	1.15203	1.20960	1.13337	0.46926	0.41929	0.45611
6	8.73143	8.59398	9.27669	1.96591	1.83473	2.25365	0.98323	0.90757	0.71968
7	12.99896	14.33836	13.47409	2.95330	2.91548	3.53775	1.20135	1.44646	1.14921
8	19.64036	18.57689	19.95968	3.83801	3.05997	3.84470	2.29418	2.07208	1.66281
9	24.35804	26.77051	28.62360	3.71608	5.05203	4.66394	2.83477	4.03236	3.36729

Como resultado de la implementación del método Fermi's Golden Rule en un programa computacional (ver **Apéndice B**) con lenguaje Fortran, se obtuvieron las constantes de predisociación  $k_{CvJ \rightarrow Bv'J'}$  para los diferentes isotopómeros en los estados vibracionales estudiados (3-9) los cuales corresponden a los estados que predisocian y en tres estados rotacionales elegidos por estar reportados (Hrodmarsson y cols., 2019) como los más poblados a las temperaturas de los experimentos realizados, esto, con el fin de poder comparar los resultados teóricos obtenidos en este trabajo con los experimentales registrados y con otros teóricos obtenidos anteriormente (Roche y Tellinghuisen, 1979) (Paulus y cols., 2016) por añadidura cabe resaltar que los programas computacionales pueden calcular las constantes para cualquier estado rotovibracional haciendo la modificación respectiva en el archivo de entrada (ver **Apéndice B**).



**Figura 6.** Constantes de predisociación del isotópomo  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$  en tres diferentes estados rotacionales.

Las constantes rotovibratoriales mostradas en la Tabla 5 se expresan en magnitudes de  $10^8$  en unidades de  $\text{s}^{-1}$  por esta razón son tomados como frecuencias de predisociación y su análisis se llevó a cabo teniendo en cuenta que la predisociación unimolecular es una reacción de orden cero y por consecuencia no depende de la concentración del ion. Las constantes permiten observar una tendencia creciente en la frecuencia de predisociación, a medida que se avanza en los estados vibratoriales dentro de un mismo estado rotacional, como se muestra en las Figura 6, Figura 7 y Figura 8, las cuales se graficaron para cada uno de los tres estados rotacionales de cada isotópomo respectivamente; la tendencia anterior se puede explicar por el efecto de la excitación vibracional y

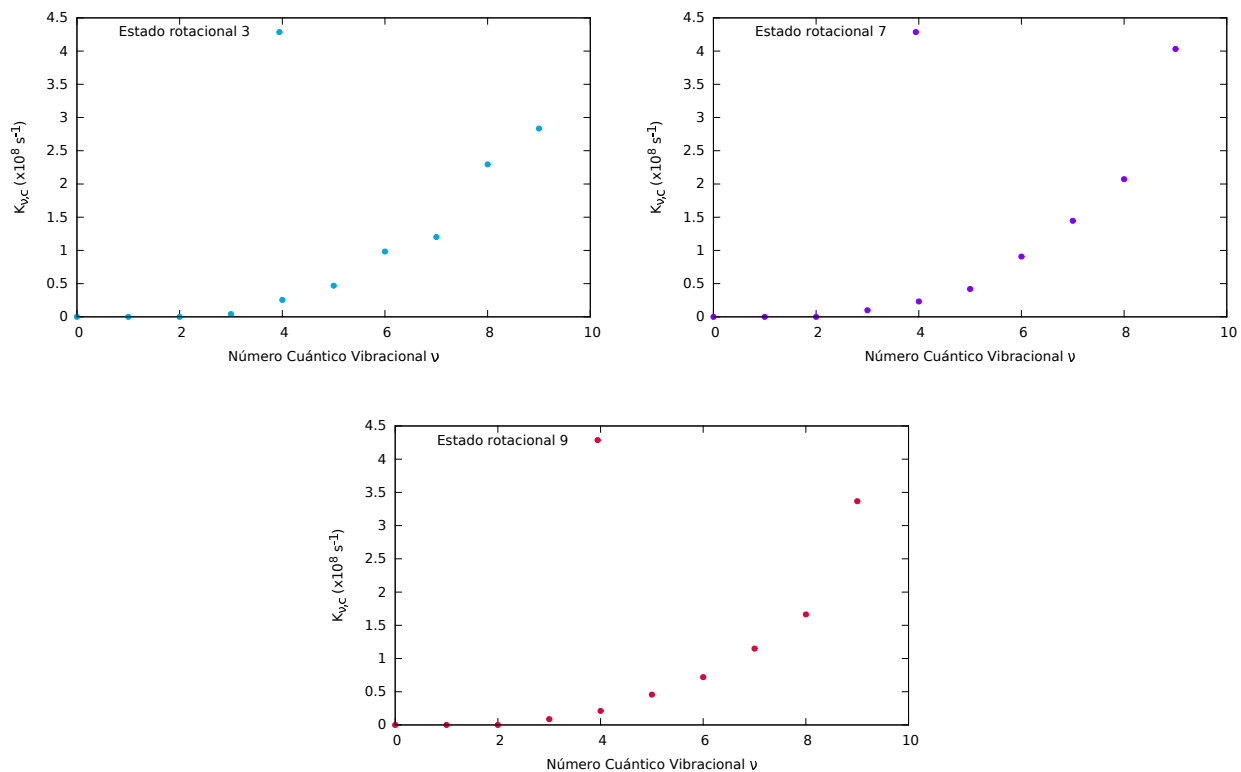


**Figura 7.** Constantes de predisiociación del isotópomo  $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+$  en tres diferentes estados rotacionales.

la energía creciente, que se encuentra ligada a cada estado a medida que se avanza dentro de este.

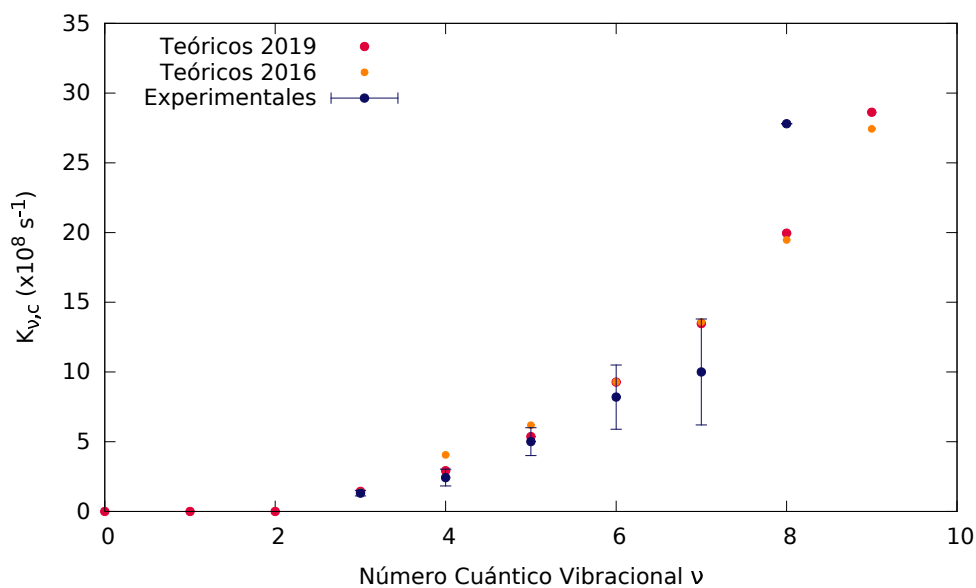
Se realizó un paralelo entre los resultados obtenidos con los resultados experimentales registrados por (Roche y Tellinghuisen, 1979) estos se sitúan exactos o dentro de la incertidumbre por medición para el isotópomo  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$  (Figura 9) y más exactos que otros cálculos teóricos-computacionales (Paulus y cols., 2016),(Roche y Tellinghuisen, 1979) para los dos isotómeros restantes (Figura 10, Figura 11).

La fuerte dependencia isotópica se muestra en la Figura 12 donde el isotópomo  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$

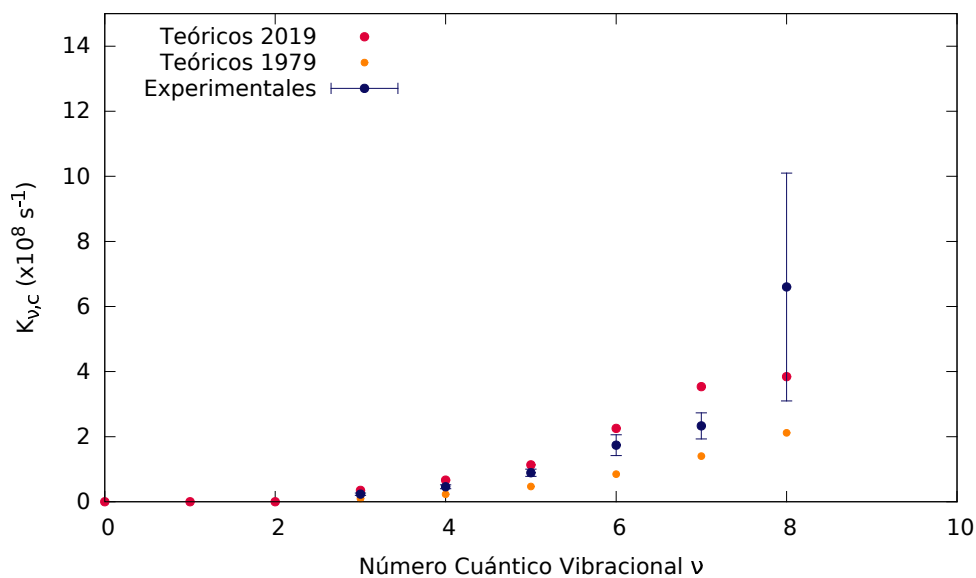


**Figura 8.** Constantes de predisociación del isotópomo  $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$  en tres diferentes estados rotacionales. Los colores identifican cada número cuántico  $J$  correspondiente y los gráficos permiten observar la variación vibracional al fijar un estado rotacional.

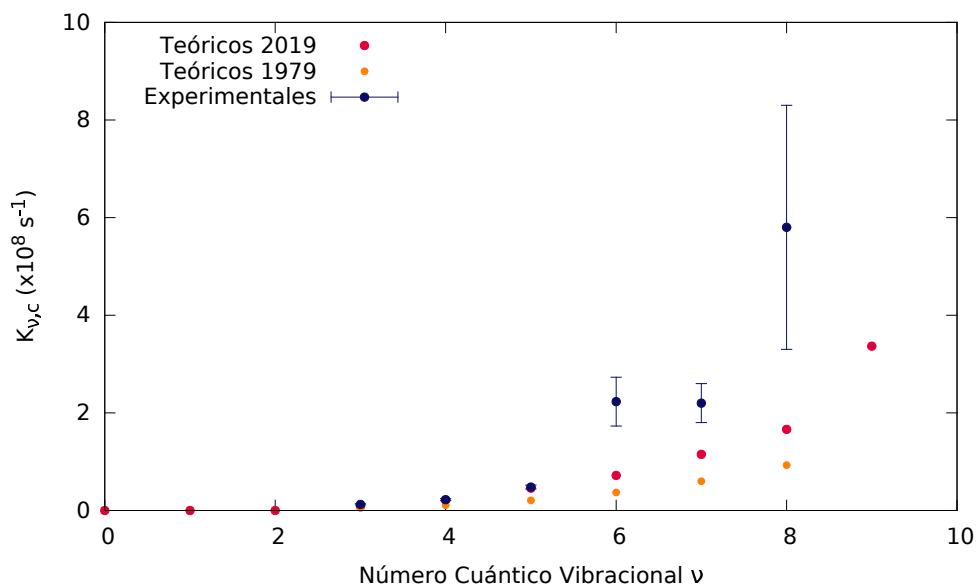
predisocia aproximadamente entre cinco y seis veces más rápido que el isotópomo  $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+$  seguido del  $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$  y finalmente la dependencia rotacional es casi nula en el ion molecular homonuclear  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$  Figura 13 y se muestra con más fuerza en los iones moleculares  $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+$  Figura 14 y  $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$  Figura 15.



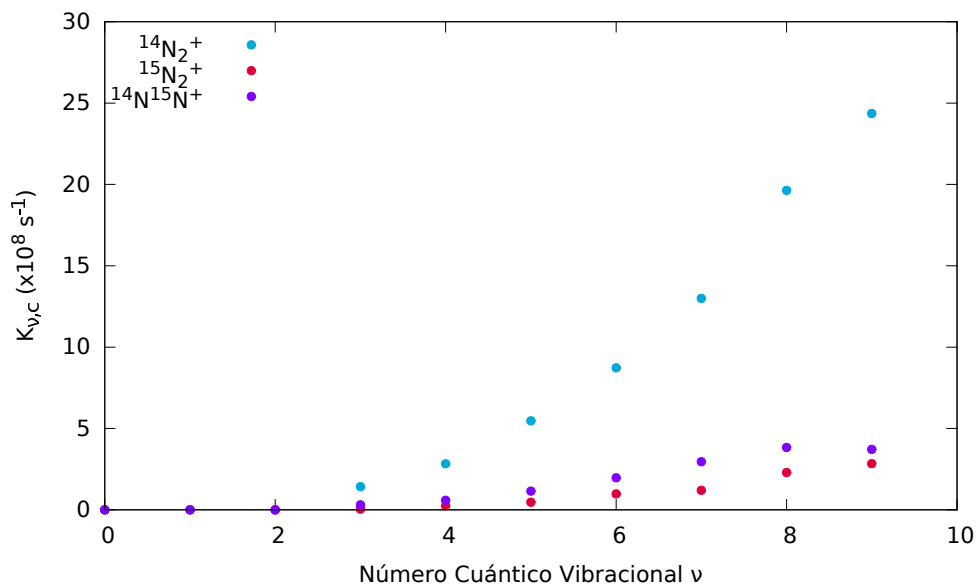
**Figura 9.** Constantes de predisiociación  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$  comparadas con valores teóricos y experimentales reportados.



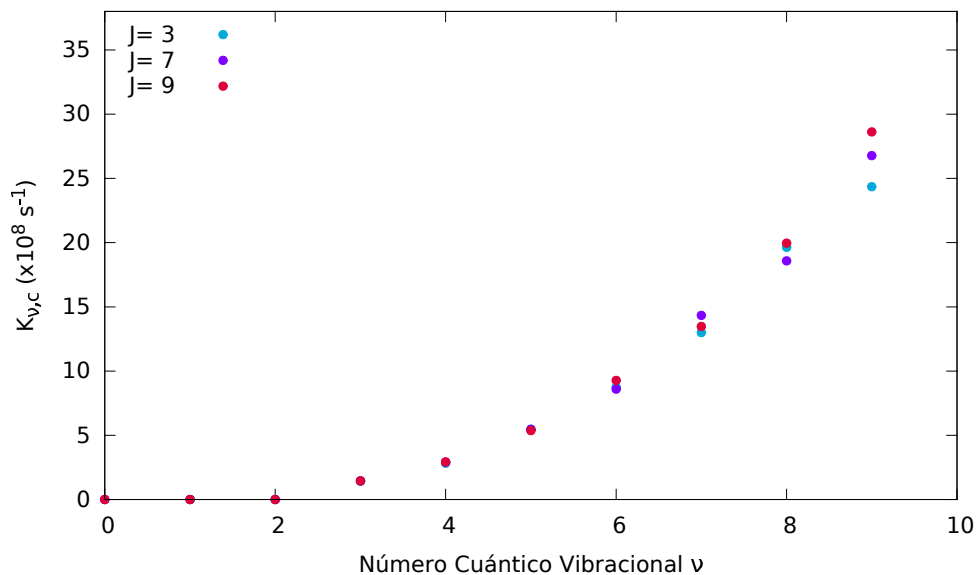
**Figura 10.** Constantes de predisiociación  $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+$  comparadas con valores teóricos y experimentales reportados.



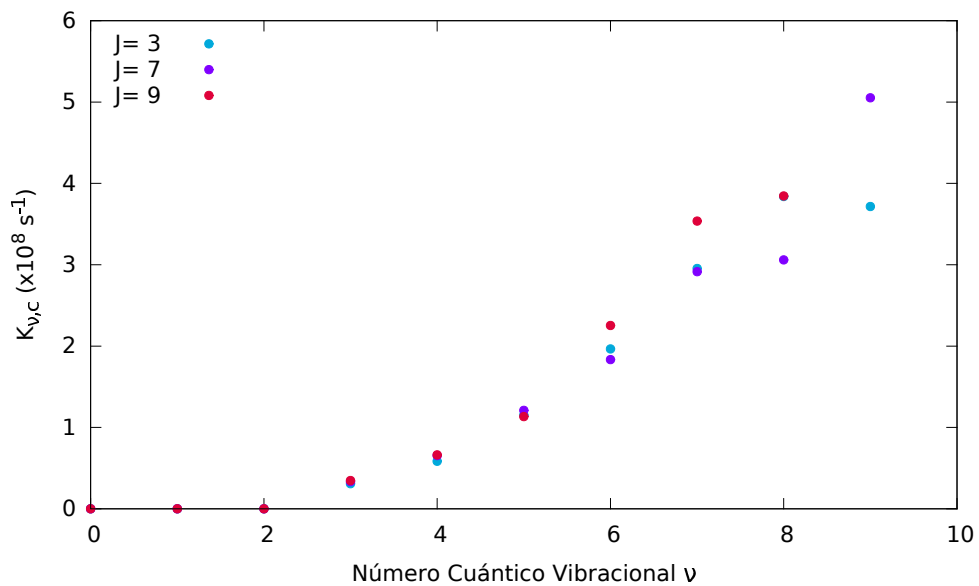
**Figura 11.** Constantes de predisiociación  $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$  comparadas con valores teóricos y experimentales reportados.



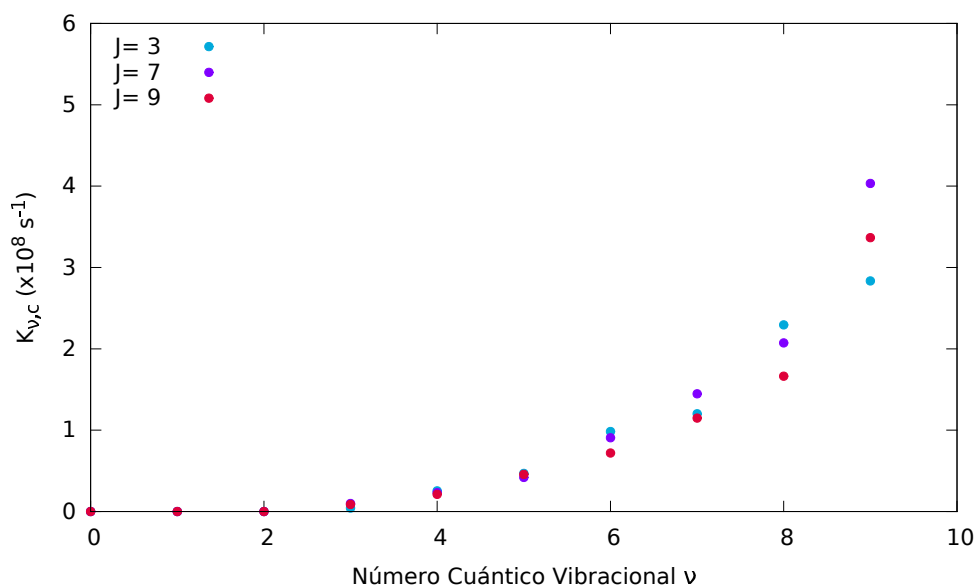
**Figura 12.** Dependencia isotópica constantes de predisiociación.



**Figura 13.** Dependencia rotacional constantes de predissociación  $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$ .



**Figura 14.** Dependencia rotacional constantes de predissociación  $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+$ .



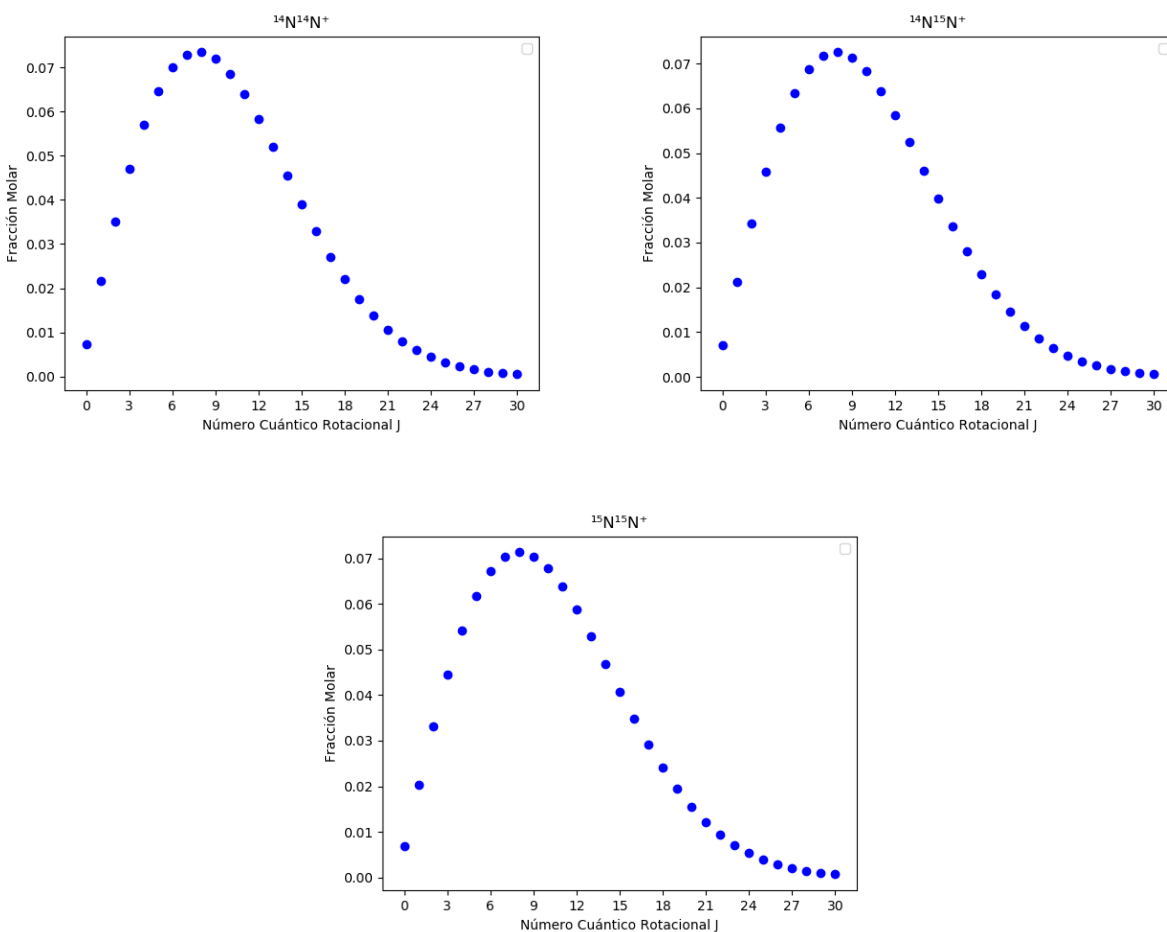
**Figura 15.** Dependencia rotacional constantes de predisiociación  $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$ .

### 6.2.1. Constantes de predisiociación dependientes de la temperatura

El cálculo de las constantes de predisiociación unimolecular, del ion  $\text{N}_2^+$  y sus tres isotopómeros, dependientes de la temperatura se llevó a cabo dentro del código de programación del software pedagógico desarrollado en Python (Ver **Apéndice C**) en el cuál inicialmente se calcularon las funciones de partición  $F_{\alpha v}$  de la Ecuación 11, seguido de las fracciones molares  $\chi_{\alpha v J}$ , Ecuación 13, para finalmente obtener las constantes de predisiociación ponderadas  $D_{CvJ}$ , Ecuación 14, dependientes de la temperatura que el usuario seleccione como condición inicial.

Las fracciones molares calculadas dependen de la energía de cada uno de los sistemas, en consecuencia y debido a la similitud de las energías rotovibracionales de los tres isotopómeros, a una misma temperatura no hay efecto isotópico en la fracción molar; es decir, se evidencia que el estado rotacional más poblado es el mismo. Para este análisis se hizo elección de dos temperaturas a las cuales fueron realizados los experimentos mencionados en este trabajo de investigación

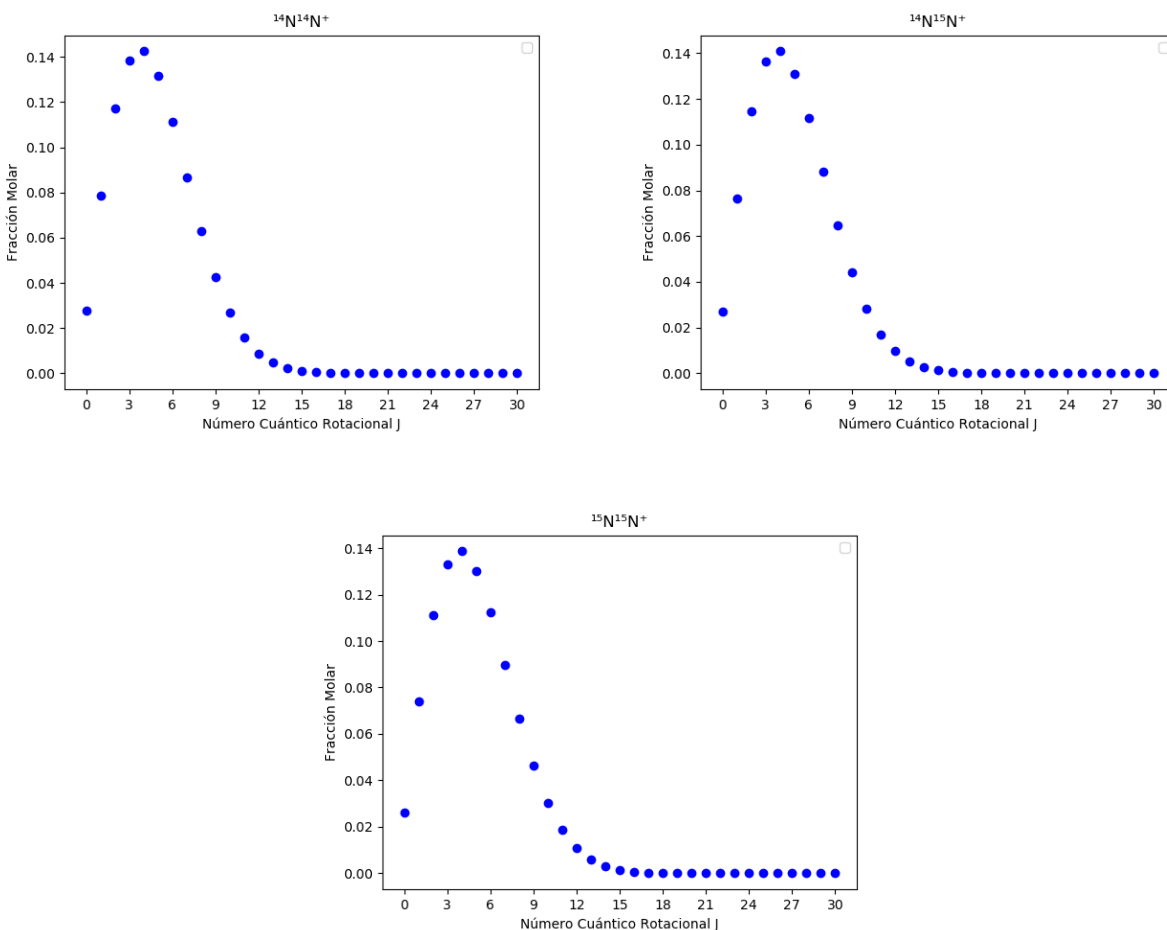
(Hrodmarsson y cols., 2019) (Roche y Tellinghuisen, 1979) que corresponden a 77K el cual se muestra en la Figura 17 y la temperatura ambiente 293K en la Figura 16; para la primera el máximo se sitúa en  $J=4$  y la segunda en  $J=8$ , puesto que, a mayor temperatura mayor energía cinética y esto se refleja en que el sistema podrá alcanzar niveles rotacionales mayores.



**Figura 16.** Fracciones molares para cada isotopómero a la temperatura ambiente 293 K.

Las constantes de predisociación  $k_{CvJ \rightarrow Bv'J'}$  sin ponderar de la Ecuación 5, obtenidas con el lenguaje de programación Fortran, fueron incluidas, en el software desarrollado en Python para

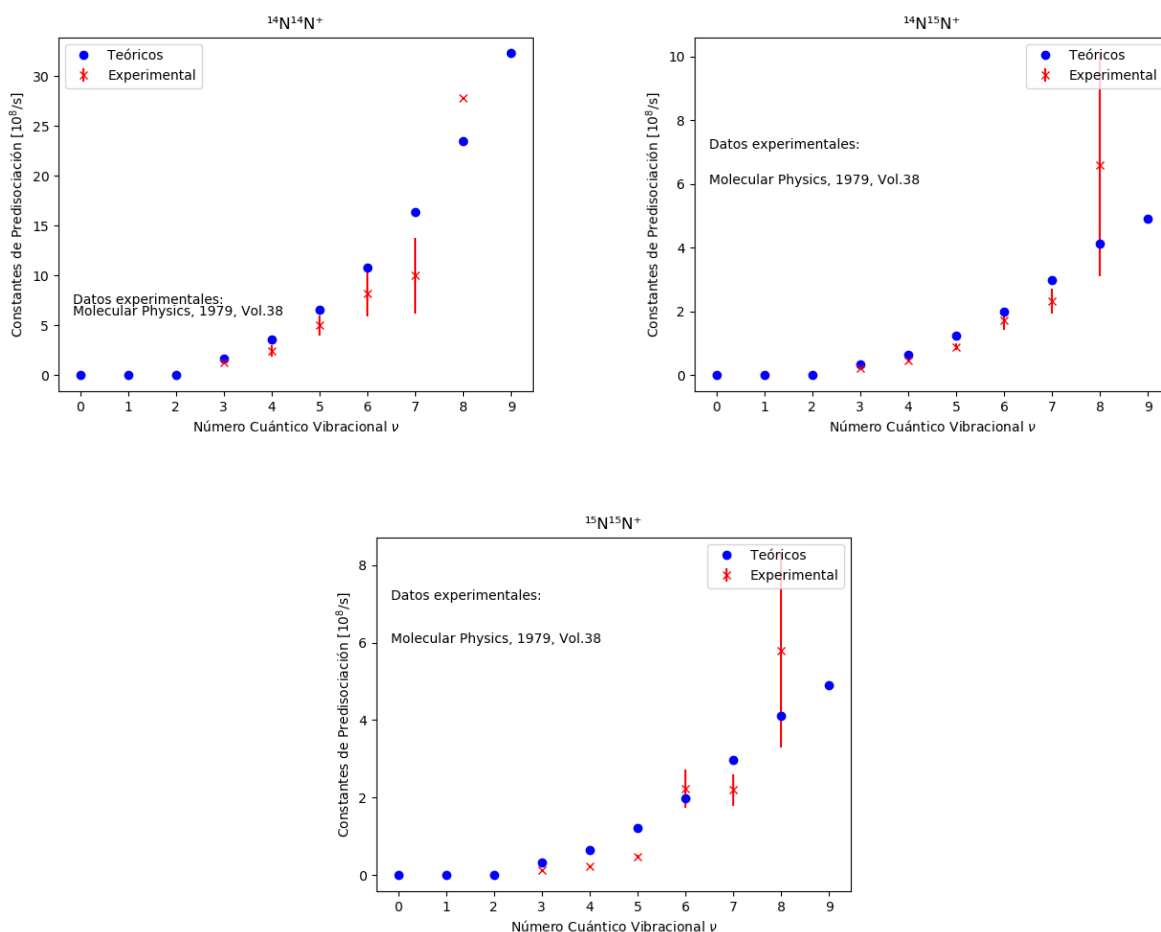
posteriormente ser multiplicadas por las fracciones molares (Ecuación 13) como se puede observar en el **Apéndice C**, lo anterior con el fin de determinar las constantes de predisociación promediadas por la distribución de Maxwell-Boltzmann.



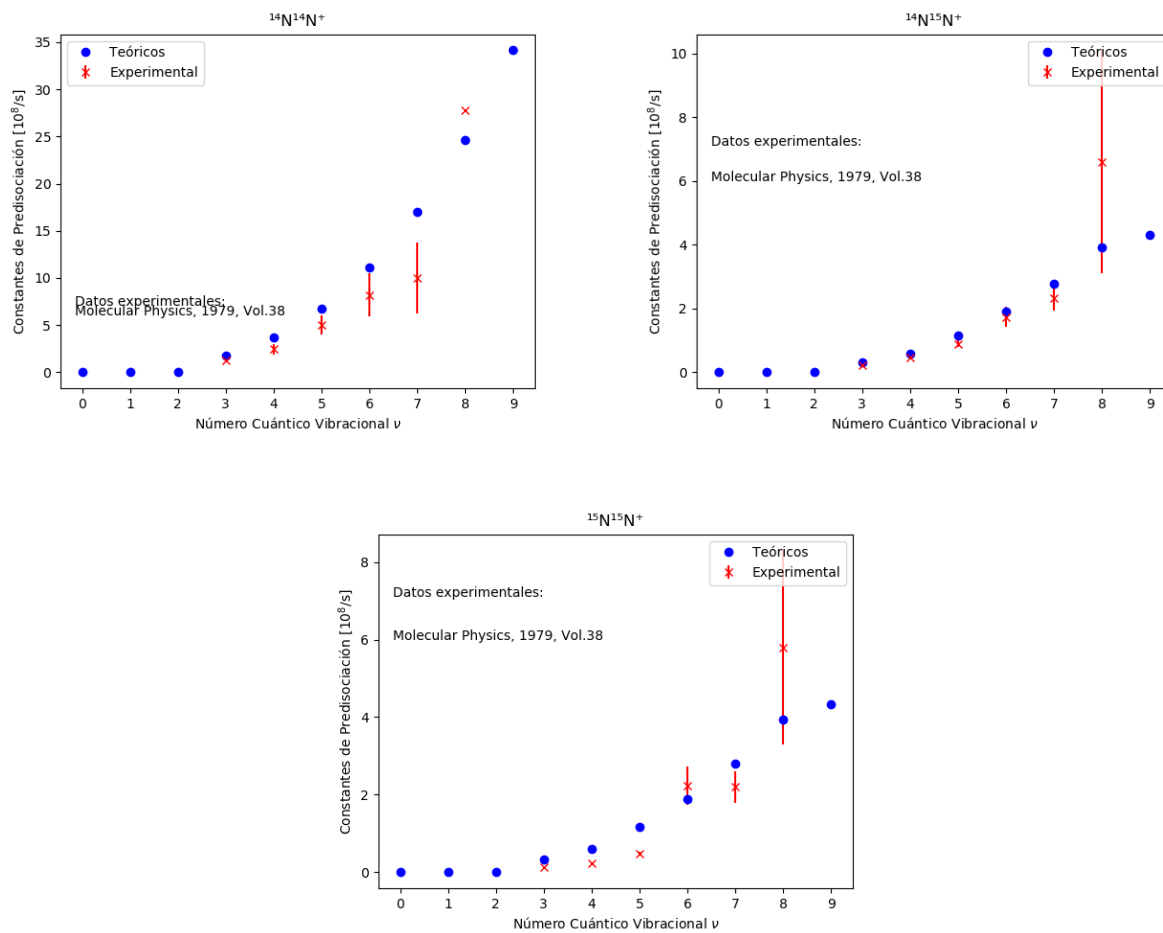
**Figura 17.** Fracciones molares para cada isotopómero a 77K.

Para la temperatura ambiente (ver Figura 18) y a 77 K (Figura 19) fueron graficadas las constantes ponderadas por la fracción molar junto con los valores experimentales reportados de cada uno de los tres isotopómeros. Se puede observar en las respectivas figuras que a la temperatura más

baja se obtienen resultados más cercanos a los comparados y la frecuencia de predisiociación aumentó conforme se pesaron los resultados obtenidos anteriormente acercándolos a los valores experimentales excepto en el caso del isotopómero de la Figura 18 y Figura 19 izquierda. Las gráficas de este análisis fueron obtenidas desde la aplicación pedagógica desarrollada y, es esta una de las funciones que se mostrarán en la siguiente sección.



**Figura 18.** Constantes ponderadas por la fracción molar para cada isotopómero a 293K. Los valores se comparan con los datos experimentales reportados por (Roche y Tellinghuisen, 1979).



**Figura 19.** Constantes pesadas para cada isotopómero a 77K. Los valores se comparan con los datos experimentales reportados por (Roche y Tellinghuisen, 1979).

### 6.3. Software pedagógico

En el desarrollo pedagógico de este proyecto de investigación se propuso, sacando provecho del tema propuesto, obtener una aplicación que permitiera a estudiantes de química y de física interesados en aprender sobre predisociación molecular, construir su propio conocimiento y tener a su alcance una herramienta que mostrara con claridad la ruta efectiva de apropiación de este concepto. Como resultado de este propuesto, se desarrolló haciendo uso del lenguaje de programación Python, un software denominado "Predisociación"(Ver **Apéndice C**) el cual presenta una interfaz inicial como la mostrada en la Figura 20. En esta interfaz se pueden visualizar diferentes opciones para la elección del usuario, entre las que se incluyen algunas informativas sobre la predisociación molecular, el ion de trabajo y el uso de la aplicación; a favor del objetivo principal de la misma, se brinda la posibilidad de realizar diferentes simulaciones, con las condiciones iniciales que se desee, las cuales proporcionan las gráficas de los resultados numéricos obtenidos en este proyecto investigativo.

Análogamente se incluyó un quiz que se compone de tres niveles en orden ascendente de dificultad que buscan contribuir a la construcción del conocimiento por parte del usuario. Esta opción del software permite que el estudiante realice procesos cognitivos de orden superior en los cuales no solo le es entregada la información por parte del docente, sino que él es el actor principal y puede entrar a examinar en detalle, descomponer la información e identificar las causas de los resultados obtenidos, para finalmente enfrentarse a un reto sobre los conocimientos interiorizados y “ponerse a prueba”, esto último con el fin de promover el interés del estudiante mediante el aprendizaje basado en juegos y los diferentes niveles que suponen cada vez mayor esfuerzo. Para iniciar el quiz se solicita un usuario, como se muestra en la Figura 21, el cual permitirá al estudiante devolverse a la interfaz principal para realizar los diferentes análisis que le sean propuestos por las

preguntas, haciendo uso de las simulaciones, y regresar al quiz habiendo guardado su progreso en el mismo; así que la finalidad será, no permitir el aprendizaje mecánico y memorístico sino por el contrario permitir la integración de la información por medio del análisis y posterior adición al esquema cognitivo del estudiante.

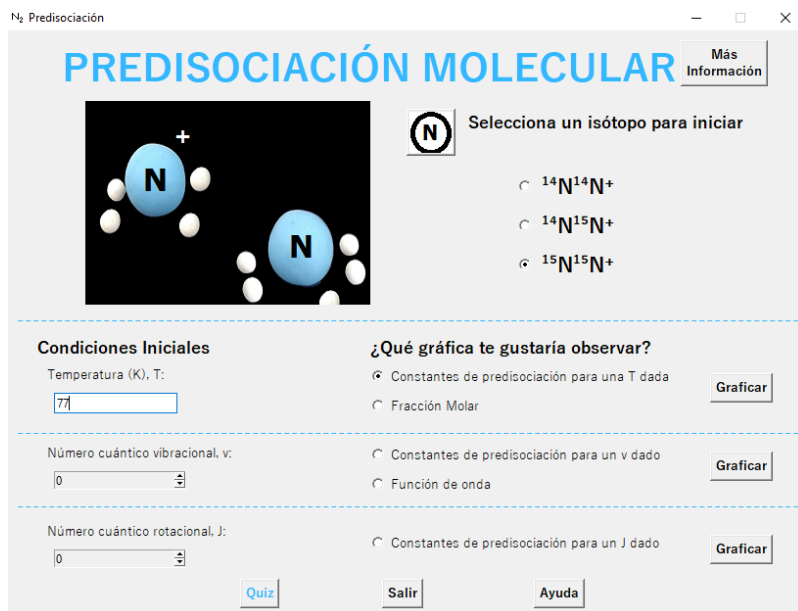


Figura 20. Interfaz principal del software pedagógico Predisociación

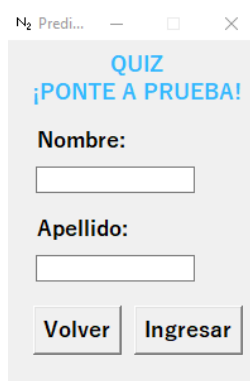


Figura 21. Interfaz de inicio del quiz incluido en el software pedagógico

## 7. Conclusiones

En el presente trabajo de investigación se expuso el tratamiento teórico del proceso de predissociación  $C^2\Sigma_u^+ \rightarrow B^2\Sigma_u^+$  del ion molecular  $N_2^+$ . Mediante la resolución de la ecuación de Schrödinger se calcularon las funciones de onda y las energías de los niveles rotovibracionales del sistema, lo anterior se llevó a cabo de forma exitosa por la concordancia con los valores experimentales ya conocidos, posterior a esto, las constantes de predissociación fueron obtenidas para los niveles vibracionales  $v=3-9$ , no obstante se deja en el apéndice el programa computacional que permite el cálculo para cualquier estado del ion molecular en trabajo. Los resultados fueron puestos bajo la estadística de Maxwell-Boltzmann y reproducen la dependencia isotópica y vibracional, mientras que, las constantes exhiben el orden correcto en magnitud de los valores experimentales reportados; del mismo modo, fue posible observar el efecto de la excitación rotacional sobre las tasas de predissociación.

Los resultados numéricos obtenidos fueron utilizados para la creación del software pedagógico Predissociación Molecular en donde se muestran preconceptos, información sobre la predissociación y el tratamiento mecanico-cuántico; así como también dispone de un quiz para “poner a prueba” al usuario. En consecuencia, se obtuvo un software que permitirá al estudiante interesado en aprender sobre la predissociación molecular, tener acceso a una herramienta que oriente su proceso cognitivo, de forma que, él mismo construya el conocimiento.

### Referencias Bibliográficas

- Aguilar, E., Corredor, M. V., de Geus, C. E., Fiallo, J., Porras, H., y Suárez, J. (2008). Aula Virtual. Una alternativa en educación superior. *Revista Docencia Universitaria*, 9(1), 129. Descargado de <https://revistas.uis.edu.co/index.php/revistadocencia/article/view/575>
- Alonso-Arévalo, J. (2017). Aplicaciones móviles en bibliotecas. *Ministerio de Educación y Cultura de España*.
- Ausubel, D. (1983). Teoría del aprendizaje significativo. *Fascículos de CEIF*, 1, 1–10. Descargado de [https://s3.amazonaws.com/academia.edu.documents/38902537/Aprendizaje\\_significativo.pdf](https://s3.amazonaws.com/academia.edu.documents/38902537/Aprendizaje_significativo.pdf)
- Baer, T., y Hase, W. L. (1996). *Dinámica de reacción unimolecular: teoría y experimentos*. Oxford University Press on Demand.
- Bourdieu, P. (2015). Los tres estados del capital cultural. *Sociológica México*(5).
- Bourdieu, P., Nice, R., y cols. (1977). *Outline of a Theory of Practice*. Cambridge University Press. Descargado de <https://books.google.com.co/books?id=4BWZpwAACAAJ>
- Bourdieu, P., y Wacquant, L. (1995). Habitus, illusio y racionalidad. Respuestas por una antropología reflexiva. Descargado de <https://psicolog.org/psicologa-institucional.html>
- Cartwright, D., y Dunning Jr, T. (1975). New electronic states of  $N_2^+$ . *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 8(6), L100.
- Fleischer, S., Sh. Averbukh, I., y Prior, Y. (2007, 05). Selective alignment of spin isomers: The case of ortho and para nitrogen. *Optics InfoBase Conference Papers*, 2. doi: 10.1109/QELS.2007.4431756
- Govers, T., Fehsenfeld, F., Albritton, D., Fournier, P., y Fournier, J. (1974). Molecular isotope effects in the thermal-energy charge exchange between  $He^+$  and  $N_2$ . *Chemical Physics*

*Letters*(1), 134–137.

Hernández, J., y Arenas, A. (2014). Avance de Colombia en la Sociedad de la Información. *Comisión de regulación de comunicaciones*. Descargado de [http://colombiatic.mintic.gov.co/602/articles-6807\\_archivo\\_pdf.pdf](http://colombiatic.mintic.gov.co/602/articles-6807_archivo_pdf.pdf)

Hill, T. (1965). Statistical Mechanics. *Kubo, R. J Phys Soc Jpn, 17*, 1100.

Hrodmarsson, H., Thissen, R., Doweck, D., Garcia, G. A., Nahon, L., y Govers, T. R. (2019). Isotope effects in the predissociation of excited states of  $N_2^+$  produced by photoionization of  $^{14}N_2$  and  $^{15}N_2$  at energies between 24.2 and 25.6 eV. *Frontiers in Chemistry*, 7, 222.

Inhester, L., Greenman, L., Rudenko, A., Rolles, D., y Santra, R. (2019). Detecting coherent core-hole wave-packet dynamics in  $N_2$  by time-and angle-resolved inner-shell photoelectron spectroscopy. *arXiv preprint arXiv:1907.06993*.

*Ley General de Educación*. (1994).

Marston, C. C., y Balint-Kurti, G. G. (1989). The Fourier grid Hamiltonian method for bound state eigenvalues and eigenfunctions. *The Journal of chemical physics*, 91(6), 3571–3576.

Martinell, A. R., y Alvarado, M. A. C. (2000). *Háblame de TIC: Tecnología digital en la educación superior*. Editorial Brujas.

MIT. (2005a). *Random Walk - 2D with 2 Particles*. Repository: Statistical Thermodynamics of Biomolecular Systems. Descargado de <https://dspace.mit.edu/bitstream/handle/1721.1/36858/BE-011JSpring2004/OcwWeb/Biological-Engineering-Division/BE-011JSpring2004/Simulations/index.htm>

MIT. (2005b). *Replicate a certain number of starting copies of DNA for several cycles. Try different probabilities of replication to get different histograms showing how much DNA is produced over many trials*. Repository: Statistical Thermodynamics of Biomolecular Systems. Descargado de <https://dspace.mit.edu/bitstream/handle/>

[1721.1/36858/BE-011JSpring2004/OcwWeb/Biological-Engineering-Division/BE-011JSpring2004/Simulations/index.htm](http://1721.1/36858/BE-011JSpring2004/OcwWeb/Biological-Engineering-Division/BE-011JSpring2004/Simulations/index.htm)

- Mosquera, C. A. P. (2012). Las TIC y la educación en Colombia durante la década del noventa: alianzas y reacomodaciones entre el campo de las políticas educativas, el campo académico y el campo empresarial. *Revista educación y pedagogía*, 24(62), 173–189.
- Paulus, B., Pérez-Torres, J. F., y Stemmler, C. (2016). Time-dependent description of the predissociation of  $N_2^+$  in the  $C^2\Sigma_u^+$  state. *Physical Review A*, 94(5), 053423.
- Pérez, J. F. T. (2019). Dilemma of the “Best Wavefunction”: Comparing Results of the STO-NG Procedure versus the Linear Variational Method. *Journal of Chemical Education*, 96, 704.
- Raquena, A. (1981). *Predisociación*. Secretariado de Publicaciones Universidad de Murcia.
- Requena, A. (1978). Predisociación. *Anales de la Universidad de Murcia (Ciencias)*, 3–108.
- Requena, S. H. (2008). El modelo constructivista con las nuevas tecnologías: aplicado en el proceso de aprendizaje. *RUSC. Universities and Knowledge Society Journal*, 5(2), 26–35.
- Roche, A., y Tellinghuisen, J. (1979). Predissociation and perturbations in the  $C^2\Sigma_u^+$  state of  $N_2^+$  from interaction with the  $B^2\Sigma_u^+$  state. *Molecular Physics*, 38(1), 129–143.
- Rojas, L. F. O. (2007). Hacia una comprensión de las políticas educativas de Colombia de 1950 a 1990. *Magistro*, 1(1), 135–150.
- Romaní, J. C. C. (2009). El concepto de tecnologías de la información. Benchmarking sobre las definiciones de las TIC en la sociedad del conocimiento. *Zer: Revista de estudios de comunicación*, 14(27), 295–318. Descargado de <http://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&db=asn&AN=47139369&lang=es&site=eds-live>
- Schmidt, B., y Lorenz, U. (2014). *WavePacket 5.0: A Matlab program package for quantum-mechanical wavepacket propagation and time-dependent spectroscopy*. Repository: Freie Universität Berlin, Math Department. Descargado de <http://publications.imp.fu-berlin>

[.de/1472/](#)

Sears, F. W., y Salinger, G. L. (1978). *Termodinámica, teoría cinética y termodinámica estadística*. Reverté.

Singh, R. B., y Rai, D. (1966). Potential-energy curves for  $O_2^+$ ,  $N_2^+$ , and  $CO^+$ . *Journal of Molecular Spectroscopy*, 19(1-4), 424–434.

Tame, J. R. (2019). Maxwell and Boltzmann. En *Approaches to entropy* (pp. 31–47). Springer.

Van de Runstraat, C., De Heer, F., y Govers, T. (1974). Excitation and decay of the  $C2\Sigma_u^+$  state of  $N_2^+$  in the case of electron impact on  $N_2$ . *Chemical Physics*, 3(3), 431–450.

## Apéndices

### A. Fourier Grid Hamiltonian Method

! Fourier Grid Hamiltonian method for solving the Eigenvalue

! Equation associate to the Schroedinger Equation (21.05.2019)

```
program fghm
use inter
implicit none
integer :: nx,i,j,k,np,ne,nR,JJ
INTEGER :: LWORK,INFO
REAL*8, ALLOCATABLE :: WORK(:)
real *8 :: dp,dx,xmin,xmax,pi,mass
real *8, allocatable :: x (:),E (:),V(:)
real *8, allocatable :: H (:,:),S (:,:),C (:,:),T (:,:)
character*1 :: ch
character*12 :: filepot

pi=2.0*asin (1.0)
read (5,*) JJ
read (5,*) mass
read (5,*) xmin
read (5,*) xmax
read (5,*) nx
```

```
read (5,*) filepot
np=(nx-1)/2
dx=(xmax-xmin)/(nx-1)
dp=(2.0*pi)/((nx-1)*dx)
open(1, file = filepot )
read (1,*) ch,nR
allocate (xtmp(nR),ytmp(nR))
do i=1,nR
  read (1,*) xtmp(i),ytmp(i)
enddo
close (1)
call precubsp(nR)
allocate (x(nx))
do i=1,nx
  x(i)=xmin+(i-1)*dx
enddo
allocate (H(nx,nx),S(nx,nx),T(nx,nx))
allocate (V(nx))
do i=1,nx
  do j=i,nx
    T(i,j)=0.0
    S(i,j)=0.0
    do k=1,np
      T(i,j)=T(i,j)+((k*dp)**2)*cos(k*dp*(x(j)-x(i)))
```

```
    enddo
    T(i,j)=T(i,j)/((nx-1)*mass)
    H(i,j)=T(i,j)
    if (i.eq.j) then
        V(i)= finter (x(i))+(JJ*(JJ+1)/(2.0*mass*x(i)**2))
        H(i,j)=H(i,j)+V(i)
        S(i,j)=1.0
    endif
    H(j,i)=H(i,j)
enddo

enddo

allocate (C(nx,nx),E(nx))

write (6,*) INFO

LWORK=3*nx

ALLOCATE(WORK(LWORK))

CALL DSYGV(1,'V','U',nx,H,nx,S,nx,E,WORK,LWORK,INFO)

deallocate (WORK)

C=H

do i=1,10
    if (E(i).lt .0.d0) write (6,*) i,E(i)
enddo

deallocate (H,T,E,S,C)

end program
```

%%%%%%%%%

!Archivos de entrada para la resolucion del Hamiltoniano en

!una Malla de Fourier

JJ # valor de J

12861.93 #masa del N14N14+

1.52 #xmin

20.0 #xmax

1001 #numero de puntos de grid

e—state #archivo que contiene el potencial

%%%%%%%%%

JJ # valor de J

13201.77225 #masa del N14N15+

1.52 #xmin

20.0 #xmax

1001 #numero de puntos de grid

e—state #archivo que contiene el potencial

%%%%%%%%%

JJ # valor de J

13671.76295 #masa del N15N15+

1.52 #xmin

20.0 #xmax

```
1001  #numero de puntos de grid
e—state #archivo que contiene el potencial
```

!Módulo para interpolar funciones empleando una base de splines y determinar sus derivadas.

```

module inter

  real *8, dimension(:), allocatable :: xtmp,ytmp

  contains

  %%%%%%%%%%%

  real *8 function finter (x)

  implicit none

  integer nmax,nf

  parameter(nmax=200000)

  real *8 :: x,y

  real *8 :: xx,yy,yd2,aa

  common/splines/xx(nmax),yy(nmax),yd2(nmax),aa(2,nmax),nf

  if ((x.gt.xx(nf)).or.(x.lt.xx(1))) then

    write (6,*) 'x,xx(1),xx(nf)',x,xx(1),xx(nf)

    stop 'Prob0: coef'

  endif

  call splint (xx,yy,yd2,nf,x,y)

  finter =y

  return

end function finter

%%%%%%%%%%

```

```

real*8 function dfinter (x,dx)
implicit none
integer nmax,nf
parameter(nmax=200000)
real*8 :: x,y2,y1,dx
real*8 :: xx,yy,yd2,aa
common/splines/xx(nmax),yy(nmax),yd2(nmax),aa(2,nmax),nf
if ((x.gt.xx(nf)).or.(x.lt.xx(1))) then
write (6,*) 'x,xx(1),xx(nf)',x,xx(1),xx(nf)
stop 'Prob0: coef'
endif
call splint (xx,yy,yd2,nf,x+dx/2.d0,y2)
call splint (xx,yy,yd2,nf,x-dx/2.d0,y1)
dfinter =(y2-y1)/dx
return
end function dfinter

```

%%%%%%%%%

```

subroutine precubsp(ntmp)
implicit real*8 (a-h,o-z)
integer nmax,ntmp,nf
parameter(nmax=200000)

```

```
real *8 :: xx,yy,yd2,aa
common/splines/xx(nmax),yy(nmax),yd2(nmax),aa(2,nmax),nf
nf=ntmp
do i=1,nf
  xx(i)=xtmp(i)
  yy(i)=ytmp(i)
enddo
!   ordena
vmin=xx(1)
do i=2,nf
  if (xx(i).lt.vmin) vmin=xx(i)
enddo
vmax=xx(1)
do i=2,nf
  if (xx(i).gt.vmax) vmax=xx(i)
enddo
vmin=vmin-2
ncot=0
1  continue
ncot=ncot+1
rant=vmax+1.d0
do i=1,nf
  if ((xx(i).lt.rant).and.(xx(i).gt.vmin)) then
    rant=xx(i)
```

```

        nbu=i
    endif
enddo

aa(1,ncot)=xx(nbu)
aa(2,ncot)=yy(nbu)
xx(nbu)=vmin-3
if (ncot.lt.nf) go to 1
do i=1,nf
    xx(i)=aa(1,i)
    yy(i)=aa(2,i)
    if (xx(i).eq.aa(1,i+1)) then
        write (6,*) ' Warning '
        write (6,fmt='(i5,2e16.8)') i,xx(i),yy(i)
        stop 'Hay puntos repetidos '
    endif
enddo

!   Calcula la primera derivada en el primer y en el ultimo punto

ydi=(yy(2)-yy(1))/(xx(2)-xx(1))
ydf=(yy(nf)-yy(nf-1))/(xx(nf)-xx(nf-1))

!   Calcula las segundas derivadas

call spline (xx,yy,nf,ydi,ydf,yd2)

return

```

```
end subroutine precubsp
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
subroutine spline (x,y,n,yp1,ypn,y2)
```

```
integer n,nmax
```

```
real *8 yp1,ypn,x(n),y(n),y2(n)
```

```
parameter (nmax=200000)
```

```
integer i,k
```

```
real *8 p,qn,sig,un,u(nmax)
```

```
if (yp1.gt ..99 d30) then
```

```
    y2(1)=0.d0
```

```
    u(1)=0.d0
```

```
    else
```

```
    y2(1)=-0.5d0
```

```
    u(1)=(3.d0/(x(2)-x(1)))*((y(2)-y(1))/(x(2)-x(1))-yp1)
```

```
endif
```

```
do i=2,n-1
```

```
    sig=(x(i)-x(i-1))/(x(i+1)-x(i-1))
```

```
    p=sig*y2(i-1)+2.d0
```

```
    y2(i)=(sig-1.d0)/p
```

```
    u(i)=(6.d0*((y(i+1)-y(i))/(x(i+1)-x(i))-(y(i)-y(i-1))&
```

```
        /(x(i)-x(i-1)))/(x(i+1)-x(i-1))-sig*u(i-1))/p
```

```
enddo
```

```
if (ypn.gt ..99 d30) then
```

```

    qn=0.d0
    un=0.d0
    else
    qn=0.5d0
    un=(3.d0/(x(n)-x(n-1)))*(ypn-(y(n)-y(n-1))/(x(n)-x(n-1)))
endif
y2(n)=(un-qn*u(n-1))/(qn*y2(n-1)+1.d0)
do k=n-1,1,-1
    y2(k)=y2(k)*y2(k+1)+u(k)
enddo
return
end subroutine spline

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

subroutine splint (xa,ya,y2a,n,x,y)
integer n
real *8 x,y,xa(n),y2a(n),ya(n)
integer k,khi,klo
real *8 a,b,h
klo=1
khi=n
1  if (khi-klo.gt.1) then
    k=(khi+klo)/2
    if (xa(k).gt.x) then

```



## B. Fermi's Golden Rule

```
program fgr
use inter
implicit none
integer i,j,k,cmin,cmax
integer :: nx,nxacop
integer , allocatable :: ind(:)
real *8, allocatable :: rho (:),C(:)
real *8, allocatable :: wvfC (:,:), wvfB (:,:), EC(:), EB(:), x(:)
real *8, allocatable :: T1 (:),T2(:)
real *8 :: pi , delta , acum,mass,xval , xinf , xsup
character *23 :: file1 , file2 , fileacop , fileref

pi=2.d0*dasin(1.d0)
!Lee el archivo de entrada
read (5,*) file1
read (5,*) file2
!Se refiere a vibracional minimo y maximo
read (5,*) cmin,cmax
!Contiene el archivo de acoplamiento noadibatico
read (5,*) fileacop
!Contiene la masa reducida del isotopomero correspondiente
```

```
read (5,*) fileref  
open(1, file = file1 )  
open(2, file = file2 )
```

!Numero de puntos en el grid

```
read (1,*) nx  
read (2,*) nx
```

!Funciones de onda y energias

```
allocate (wvfC(nx,nx),wvfB(nx,nx),EC(nx),EB(nx),x(nx))  
do i=1,nx  
  read (1,*) x(i) ,( wvfC(i,j) , j=1,nx) ,( EC(j) , j=1,nx)  
  read (2,*) x(i) ,( wvfB(i,j) , j=1,nx) ,( EB(j) , j=1,nx)  
enddo  
close (1)  
close (2)
```

!Para encontrar el estado degenerado en el continuo

```
allocate (ind(cmin:cmax),rho(cmin:cmax))  
do i=cmin,cmax  
  do j=1,nx  
    if (EB(j) .gt. EC(i)) then  
      ind(i)=j  
      goto 10  
    endif  
  enddo
```

```
10  continue
```

!Calcula la densidad de estados

```
rho(i)=2.d0/(EB(ind(i))-EB(ind(i)-1))  
enddo
```

! Lee masa reducida desde N2.inp

```
open(1, file = fileref )  
read (1,*) i  
read (1,*) mass  
close (1)
```

! Lee acoplamiento no adiabatico T(1)

```
nxacop=502  
allocate (xtmp(nxacop),ytmp(nxacop))  
open(1, file = fileacop )  
do i=1,nxacop  
  read (1,*) xtmp(i),ytmp(i)  
enddo  
close (1)
```

!Llama al modulo para interpolar

```
call precubsp(nxacop)  
deallocate (xtmp,ytmp)  
allocate (T1(nx),T2(nx))  
do i=1,nx  
  T1(i)= finter (x(i))  
  T2(i)= dfinter (x(i),0.05 d0)
```

```

enddo

allocate (xtmp(nx),ytmp(nx))

allocate (C(0:cmax))

do k=0,cmin-1
  C(k)=0.d0
enddo

do k=cmin,cmax
  do i=1,nx
    xtmp(i)=x(i)
    ytmp(i)=wvfC(i,k)*2.d0*T1(i)
$      *(wvfB(i+1,ind(k))-wvfB(i-1,ind(k)))/(x(i+1)-x(i-1))
$      +wvfC(i,k)*T2(i)*wvfB(i,ind(k))
  enddo

```

!Llama al modulo para realizar la integral 6

```

call precubsp(nx)

xinf=1.6d0

xsup=6.d0

acum=0.d0

do i=1,1000
  xval=xinf+xsup*(i-1)/(1000-1)
  acum=acum+finter(xval)*xsup/(1000-1)
enddo

acum=-acum/(2.d0*mass)

```

!Constante en unidades atomicas

```
acum=2.d0*pi*rho(k)*acum**2
```

```
!Se obtiene la constante en s-1
```

```
C(k)=acum*1.d-8/2.418884d-17
```

```
!Escribe la constante en pantalla junto al nivel v
```

```
write (6,*)k,C(k)
```

```
enddo
```

```
end program
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
!Archivo de entrada para la Regla de Oro de Fermi
```

```
wvf-e-Cstate.dat-J.dat #Archivo que contiene energia y funcion de onda
```

```
wvf-e-Bstate.dat-J.dat #para cada estado rotacional
```

```
3 9 #cmin, cmax
```

```
nacBC-R.dat #acoplamiento no adiabatico
```

```
N2.inp #Archivo de entrada fghm
```

### C. Software pedagógico: Predisociación Molecular

```
from tkinter import *
from tkinter import ttk
import math
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import webbrowser
from tkinter import messagebox

xpotC,ypotC = np.loadtxt("Data\e-Cstate.dat", unpack=True)
xpotB,ypotB = np.loadtxt("Data\e-Bstate.dat", unpack=True)
wvfC=np.loadtxt("Data\wvf-e-Cstate.dat-0.dat", unpack=True)

class app:

    #Básico
    def __init__( self ):
        try:
            self.inform.destroy()
        except:
            print("")
        try:
            self.infnitro .destroy ()
```

```
except:
    print("")
try:
    self .ayuda.destroy ()
except:
    print("")
try:
    self .Vquiz.destroy ()
except:
    print("")

self .root = Tk()
self .root .iconbitmap("Data\ENE.ico")
self .root .title (" Predisociaci ón")
self .root .geometry("820x600+300+10")
self .root .resizable (0,0)

# Variables to be specified
self .T = DoubleVar(value=1.0)
self .J = IntVar (value=0)
self .v = IntVar (value=0)

self .Isotope = StringVar (value=' Title ')
self .xmol = BooleanVar(value=' False ') #Fracción molar
```

```

self .type = StringVar (value=' null ' ) #Lleva la información sobre que opción se
quiere graficar

self .image=PhotoImage(file="Data\8.png") #Imagen de inicio

self .imbot=PhotoImage( file="Data/botoncito . gif " )

# Widgets ( Buttons and commands )

#Etiquetas fijas

self . title =Label( self . root , text ="PREDISOCIACIÓN_MOLECULAR",font=("Yu_
gothic",30,"bold"), fg="#33B8FF")

self .labeimg=Label( self . root ,image=self .image) #Un label que contiene una imagen

self .labelISO = Label( self . root , text ="Selecciona_un_isótopo_para_iniciar" , font=(
"Yu_gothic" ,13,"bold"))

self . conditions = Label( self . root , text ="Condiciones_Iniciales " , font=(
"Yu_gothic"
,13, "bold"))

self . select = Label( self . root , text =" Qué gráfica te gustaría observar?" , font=(
"Yu_
gothic" ,13, "bold"))

self . labelT = Label( self . root , text ="Temperatura_(K),_T:" , font=(
"Yu_gothic" ,10))

self . labelJ = Label( self . root , text ="Número_cuántico_rotacional,_J:" , font=(
"Yu_
gothic" ,10))

self . labelv = Label( self . root , text ="Número_cuántico_vibracional,_v:" , font=(
"Yu_
gothic" ,10))

```



```

    _____", fg="#33B8FF")

```

### *#Selección de la gráfica*

```

self.kpredT = Radiobutton( self . root , text="Constantes_de_predisociación_para_una_
T_dada", font=("Yu_gothic",10),

```

```

    variable = self . type, value='a' , cursor= "hand2")

```

```

self.kpredJ = Radiobutton( self . root , text="Constantes_de_predisociación_para_un_
J_dado", font=("Yu_gothic",10),

```

```

    variable = self . type, value='b' , cursor= "hand2")

```

```

self.kpredv = Radiobutton( self . root , text="Constantes_de_predisociación_para_un_
v_dado", font=("Yu_gothic",10),

```

```

    variable = self . type, value='c' , cursor= "hand2")

```

```

self.wvf = Radiobutton( self . root , text="Función_de_onda", font=("Yu_gothic",10),

```

```

    variable = self . type, value='d' , cursor= "hand2")

```

```

self.molar = Radiobutton( self . root , text="Fracción_Molar", font=("Yu_gothic",10),

```

```

    variable = self . type, value='e' , cursor= "hand2")

```

### *#Botones de selección para información de v y J*

```

self . valueJ = Spinbox( self . root , from_=0,to=30,wrap=False, textvariable = self . J, state
='readonly')

```

```

self . valuev = Spinbox( self . root , from_=0, to=9,wrap=False, textvariable = self . v, state
='readonly')

```

### *#Botón para obtener la gráfica*

```

self . plotT = Button( self . root , text=" Graficar ",command=self.pltT, font=("Yu_gothic"
,10, "bold"), cursor= "hand2")

```

```
self . plotv = Button( self . root , text=" Graficar " , command=self.pltv , font=("Yu_gothic"
,10, "bold") , cursor= "hand2")
```

```
self . plotJ = Button( self . root , text=" Graficar " , command=self.pltJ , font=("Yu_gothic"
,10, "bold") , cursor= "hand2")
```

```
def back():
```

```
    self . root . destroy ()
```

```
#Salir de la app
```

```
self . exit = Button( self . root , text=" Salir " , command=back , font=("Yu_gothic",10, "
bold") , cursor = "hand2")
```

```
#Empaquetamientos (Posicionamiento)
```

```
#Etiquetas texto fijo
```

```
self . title . place( x = 55 , y = 10)
```

```
self . labeimg . place( x = 80 , y = 70)
```

```
self . labelISO . place( x = 470 , y = 80)
```

```
self . labelP1 . place( x =10 , y = 280)
```

```
self . labelP2 . place( x =10 , y = 395)
```

```
self . labelP3 . place( x =10 , y = 470)
```

```
self . conditions . place( x = 30 , y = 310)
```

```
self . select . place( x = 370 , y = 310 )
```

```
self . labelT . place( x = 40 , y = 340)
```

```
self . labelv . place( x= 40 , y = 420)
```

```
self . labelJ . place( x = 40, y = 500)

#Etiquetas texto de entrada

self . temp.place( x = 50, y = 370)

#Botones RadioBotton

self . Iso1414.place( x = 520 , y = 140)
self . Iso1415.place( x = 520 , y = 180)
self . Iso1515.place( x = 520 , y = 220)
self . kpredT.place( x = 370 , y = 340)
self . molar.place( x = 370 , y = 370)
self . kpredv.place( x = 370, y = 420)
self . wvf.place( x = 370, y = 450)
self . kpredJ . place( x = 370, y = 510 )

#Botones SpinBox

self . valuev . place( x = 50 , y = 450)
self . valueJ . place( x = 50, y = 530)

#Botones para obtener gráficas

self . plotT . place( x = 720, y = 350)
self . plotv . place( x = 720, y = 430)
self . plotJ . place( x = 720, y = 515)

#Botón de salida de la app

self . exit . place( x = 385, y = 560)

#####Adicionales

self . botinfor = Button( self . root , text ="Más\nInformación",command=self.info, font=(
"Yu_gothic",10, "bold"), cursor= "hand2")
```

```

self . botinfor . place (x=690,y=10)

self . botN = Button( self . root , image = self . imbot , command=self.NITROGENO , font=(
Yu_gothic" ,10 , "bold") , cursor= "hand2")

self . botN . place (x=410,y=80)

self . bothelp = Button( self . root , text="Ayuda" , command=self.help , font=("Yu_gothic"
,10 , "bold") , cursor= "hand2")

self . bothelp . place (x=540,y=560)

self . botquiz = Button( self . root , text="Quiz" , command=self.quiz , font=("Yu_gothic"
,10 , "bold") , fg="#33B8FF" , cursor= "hand2")

self . botquiz . place (x=240,y=560)

#####

self . root . mainloop()

##### FUNCION PANTALLA #####

def quiz( self ):

self . root . destroy ()

self . Vquiz= Tk()

self . Vquiz . geometry ("200x280+300+10")

self . Vquiz . iconbitmap ("Data\ENE.ico")

self . Vquiz . resizable (0,0)

self . Vquiz . title (" Predisociaci ón")

self . Nombre = StringVar()

self . Apellido = StringVar ()

```

```
def back():
    self.Vquiz.destroy ()
    self.__init__ ()
def Ingresar ():
    global Nombre,Apellido,Nivel1, Calificacion1 ,Nivel2, Calificacion2 ,Nivel3,
    Calificacion3
    Nombre = self.Nombre.get()
    Apellido = self.Apellido.get ()

    Nombre = Nombre.upper()##convertir en mayusculas
    Apellido = Apellido.upper()

# print (Nombre,Apellido)
if Nombre == "" and Apellido == "":
    self.labelERROR = Label(self.Vquiz, text="INGRESO_INVÁLIDO", font=("Yu_
gothic",12, "bold"), fg="red")
    self.labelERROR.place( x = 20, y = 249)
else :
    try:
        self.Vquiz.destroy ()
    except:
        print("")
```

```
H = open("Data\Historico . dat", "r")
Data = H. readlines ()
H.close ()

Nivel1 = '0'
Calificacion1 = '0'
Nivel2 = '0'
Calificacion2 = '0'
Nivel3 = '0'
Calificacion3 = '0'
Existe = '0'
posfila = len(Data)

for i in range (1, len(Data)):

    fila = Data[i]. strip ()
    Datos = fila . split (";") ## SEPARAR COMPONENTES DEL VECTOR
    if Datos[0] == Nombre and Datos[1] == Apellido:

        Existe = '1'
        posfila = i
```

```
Nivel1 = Datos[2]
Calificacion1 = Datos[3]
Nivel2 = Datos[4]
Calificacion2 = Datos[5]
Nivel3 = Datos[6]
Calificacion3 = Datos[7]
```

```
if Existe == '0' :
    informacion=Nombre+';'+Apellido+';'+Nivel1+';'+ Calificacion1 +' ;'+Nivel2+';'+
Calificacion2 +' ;'+Nivel3+';'+ Calificacion3 +' \n'
    Data.append(informacion)
```

```
self .Vquiz1 = Tk()
self .Vquiz1.iconbitmap("Data\ENE.ico")
self .Vquiz1.geometry("650x620+200+10")
self .Vquiz1. title (" Predisociaci ón")
```

```
self .P1 = StringVar ()
self .P2 = StringVar ()
self .P3 = StringVar ()
```

```
def volver ():
```

```
self .Vquiz1.destroy ()  
  
self . __init__ ()  
  
def evaluar () :  
    global Nombre,Apellido,Nivel1, Calificacion1 ,Nivel2, Calificacion2 ,Nivel3,  
    Calificacion3
```

```
R1 = str( self .P1.get () )  
R2 = str( self .P2.get () )  
R3 = str( self .P3.get () )  
  
nota = 0  
  
if Nivel1 == '1' and Nivel2 == '1' and Nivel3 == '0' :  
    if R1 == "D":  
        nota = nota + 33  
    if R2 == "A":  
        nota = nota + 33  
    if R3 == "B":  
        nota = nota + 34  
    if int( Calificacion3 )<int(nota):  
        Calificacion3 = str(nota)  
    if nota >= 66:  
        Nivel3 = '1'
```

```
    if nota < 66:  
        messagebox.showinfo("INTENTA_DE_NUEVO","Tu calificación es muy\  
nbaja para continuar.\nIntenta de nuevo!")
```

```
    if Nivel1 == '1' and Nivel2 == '0':  
        if R1 == "B":  
            nota = nota + 33  
        if R2 == "C":  
            nota = nota + 33  
        if R3 == "A":  
            nota = nota + 34  
        if int( Calificacion2 )<int(nota):  
            Calificacion2 = str(nota)  
        if nota >= 66:  
            Nivel2 = '1'  
            messagebox.showinfo("FELICITACIONES","PASASTE_DE_NIVEL!\n\  
Puedes continuar con un nivel de mayor dificultad")  
        if nota < 66:  
            messagebox.showinfo("INTENTA_DE_NUEVO","Tu calificación es muy\  
nbaja para continuar.\nIntenta de nuevo!")
```

```
    if Nivel1 == '0':  
        if R1 == "A":  
            nota = nota + 33
```

```

if R2 == "B":
    nota = nota + 33

if R3 == "C":
    nota = nota + 34

if int( Calificacion1 )<int(nota):
    Calificacion1 = str(nota)

if nota >= 66:
    Nivel1 = '1'
    messagebox.showinfo("FELICITACIONES", "PASASTE_DE_NIVEL!\n_\
Puedes_continuar_con_\n_un_nivel_de_mayor_\n_dificultad")

if nota < 66:
    messagebox.showinfo("INTENTA_DE_NUEVO", "Tu_calificación_es_muy\
nbaja_para_continuar_\n_Intenta_de_nuevo!")

self .Vquiz1.destroy ()

#print (nota)

#print (Data)

informacion=Nombre+';'+Apellido+';'+Nivel1+';'+ Calificacion1 +' ;'+Nivel2+';'+
Calificacion2 +' ;'+Nivel3+';'+ Calificacion3 +' \n'

Data[ posfila ] = informacion

#print (Data)

```

```

H = open("Data\Historico . dat", "w")
for f in range(len(Data)):
    H.write(Data[f])
H.flush ()
H.close ()

Ingresar ()

if Nivel1 == '0':

    self .labelUSUARIO = Label(self.Vquiz1, text=Nombre+" _"+Apellido+" _Nivel_
actual:_1_"+" _Mejor_nota:_"+Calificacion1, font=("Yu_gothic",13, "bold"))

    self .labelNIVEL = Label( self .Vquiz1, text="NIVEL_1", font=("Yu_gothic",13, "
bold"), fg="#33B8FF")

    self .labelP1 = Label( self .Vquiz1, text="La_predisociación_se_presenta_como_
mecanismo_de_relajación_del_sistema.\nCuál_proceso_compite_con_la_predisociación?_",
justify =LEFT, font=("Yu_gothic",12, "bold"))

    self .P1A = Radiobutton( self .Vquiz1, text ="Decaimiento_radiativo_o_fotoemisió
n",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P1,value='A', cursor= "hand2")

    self .P1B = Radiobutton( self .Vquiz1, text ="Disociación_molecular", font=("Yu_
gothic",10, "bold"), variable =self .P1,value='B', cursor= "hand2")

```

```
self .P1C = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Entrecruzamiento_entre_estados_
electrónicos", font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P1,value='C', cursor= "
hand2")
```

```
self .P1D = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Excitación_molecular", font=("Yu_
gothic",10, "bold"), variable =self .P1,value='D', cursor= "hand2")
```

```
self .labelP2 = Label( self .Vquiz1, text="En_el_desarrollo_mecanico-cuántico,
las_energías_y_funciones_de_onda\nfueron_obtenidas_por_medio_de:", justify=LEFT,
font=("Yu_gothic",12, "bold"))
```

```
self .P2A = Radiobutton( self .Vquiz1, text="La_regla_de_Oro_de_Fermi", font=(
"Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P2,value='A', cursor= "hand2")
```

```
self .P2B = Radiobutton( self .Vquiz1, text="La_resolución_de_la_ecuación_de
Shrdinger", font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P2,value='B', cursor= "
hand2")
```

```
self .P2C = Radiobutton( self .Vquiz1, text="La_distribución_estadística_de
Maxwell-Boltzmann", font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P2,value='C', cursor
= "hand2")
```

```
self .P2D = Radiobutton( self .Vquiz1, text="El_estudio_de_los_mecanismos_de
relajación_del_sistema", font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P2,value='D',
cursor= "hand2")
```

```
self .labelP3 = Label( self .Vquiz1, text="Según_reportes_experimentales, la
excitación_rotacional_puede_afectar\ las_tasas_de_predisociación. Cuál_de_los_
```

```
siguientes_isotopómeros\npresenta_menor_efecto_rotacional?", justify =LEFT, font=("Yu_gothic",12, "bold"))
```

```
self .P3A = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Todos_presentan_el_mismo_efecto_rotacional",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P3,value='A', cursor= "hand2")
```

```
self .P3B = Radiobutton( self .Vquiz1, text="14N15N+",font=("Yu_gothic",10,"bold"), variable=self .P3,value='B', cursor= "hand2")
```

```
self .P3C = Radiobutton( self .Vquiz1, text="14N14N+",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P3,value='C', cursor= "hand2")
```

```
self .P3D = Radiobutton( self .Vquiz1, text="15N15N+",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P3,value='D', cursor= "hand2")
```

```
if Nivel1 == '1' and Nivel2 == '0':
```

```
self .labelUSUARIO = Label(self.Vquiz1,text=Nombre+"_"+Apellido+"_Nivel:_2_ "+"_Mejor_nota:_"+Calificacion2, font=("Yu_gothic",13, "bold"), fg="#33B8FF")
```

```
self .labelNIVEL = Label( self .Vquiz1,text="NIVEL_2", font=("Yu_gothic",13, "bold"))
```

```
self .labelP1 = Label( self .Vquiz1,text="A_las_mismas_condiciones_termodinámicas,_cuál_ion_molecular_de_nitrógeno_tiene_más_probabilidad_de_presentar_predisociación?", justify =LEFT, font=("Yu_gothic",12, "bold"))
```

```
self .P1A = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Todos los isotómeros tienen la misma probabilidad",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P1,value='A', cursor = "hand2")
```

```
self .P1B = Radiobutton( self .Vquiz1, text=" $^{14}\text{N}^{14}\text{N}^+$ ",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P1,value='B', cursor= "hand2")
```

```
self .P1C = Radiobutton( self .Vquiz1, text=" $^{14}\text{N}^{15}\text{N}^+$ ",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P1,value='C', cursor= "hand2")
```

```
self .P1D = Radiobutton( self .Vquiz1, text=" $^{15}\text{N}^{15}\text{N}^+$ ",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P1,value='D', cursor= "hand2")
```

```
self .labelP2 = Label( self .Vquiz1, text=" Es la predisociación molecular del  $\text{N}-\text{N}^+$  un posible mecanismo de relajación para cualquier estado rotovibracional?", justify=LEFT,font=("Yu_gothic",12, "bold"))
```

```
self .P2A = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Sí, no existe una restricción para ninguno de los niveles rotovibracionales", font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable = self .P2,value='A', cursor= "hand2")
```

```
self .P2B = Radiobutton( self .Vquiz1, text="No, existen restricciones energéticas para algunos niveles rotacionales", font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable = self .P2,value='B', cursor= "hand2")
```

```
self .P2C = Radiobutton( self .Vquiz1, text="No, solo es posible a partir del tercer estado vibracional", font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P2,value='C', cursor= "hand2")
```

```
self .P2D = Radiobutton( self .Vquiz1, text="No, existen diferentes
restricciones rotovibratoriales ", font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P2,
value='D', cursor= "hand2")
```

```
self .labelP3 = Label( self .Vquiz1, text="No olvides tener en cuenta que estas
son preguntas de única respuesta.\n\nEn la predisociación molecular existe un
evidente efecto:", justify =LEFT, font=("Yu_gothic",12, "bold"))
```

```
self .P3A = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Isotópico", font=("Yu_gothic",10, "
bold"), variable =self .P3, value='A', cursor= "hand2")
```

```
self .P3B = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Térmico", font=("Yu_gothic",10, "
bold"), variable =self .P3, value='B', cursor= "hand2")
```

```
self .P3C = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Tunel", font=("Yu_gothic",10, "bold
"), variable =self .P3, value='C', cursor= "hand2")
```

```
self .P3D = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Molecular", font=("Yu_gothic",10, "
bold"), variable =self .P3, value='D', cursor= "hand2")
```

```
if Nivel1 == '1' and Nivel2 == '1' and Nivel3 == '0':
```

```
self .labelUSUARIO = Label(self.Vquiz1, text=Nombre+" "+Apellido+" Nivel: 3
"+" Mejor nota: "+Calificacion3, font=("Yu_gothic",13, "bold"), fg="#33B8FF")
```

```
self .labelNIVEL = Label( self .Vquiz1, text="NIVEL 3", font=("Yu_gothic",13, "
bold"))
```

```
self .labelP1 = Label( self .Vquiz1, text=" Por _qué_no_ocurre_predisociación_
molecular_antes_del_tercer_estado\ nvibracional _del_ion_N-N+?", justify=LEFT, font=(
"Yu_gothic", 12, "bold"))
```

```
self .P1A = Radiobutton( self .Vquiz1, text="En_los_niveles_de_menor_energía_
ocurre_disociación_sin_pasar_por_la_predisociación", font=("Yu_gothic", 10, "bold"),
variable = self .P1, value='A', cursor= "hand2")
```

```
self .P1B = Radiobutton( self .Vquiz1, text="La_predisociación_conlleva_
restricciones_rotacionales_que_influyen", font=("Yu_gothic", 10, "bold"), variable =
self .P1, value='B', cursor= "hand2")
```

```
self .P1C = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Son_necesarias_menores_energías_
de_excitación_para_que_ocurra_la_predisociación", font=("Yu_gothic", 10, "bold"),
variable = self .P1, value='C', cursor= "hand2")
```

```
self .P1D = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Las_energías_de_los_anteriores_
estados_no_superan_la_energía_de_disociación", font=("Yu_gothic", 10, "bold"),
variable = self .P1, value='D', cursor= "hand2")
```

```
self .labelP2 = Label( self .Vquiz1, text="A_mayores_energías_vibracionales_la_
frecuencia_de_predisociación_exhibe:", justify =LEFT, font=("Yu_gothic", 12, "bold"))
```

```
self .P2A = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Tendencia_creciente_debido_al_
aumento_de_energía_cinética", font=("Yu_gothic", 10, "bold"), variable = self .P2, value=
'A', cursor= "hand2")
```

```
self .P2B = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Tendencia_creciente_ya_que_el_
```

```
sistema_tendrá_menor_energía_total",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P2,  
value='B', cursor= "hand2")
```

```
self .P2C = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Tendencia_decreciente_ya_que_el_  
sistema_tendrá_mayor_energía_total",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P2,  
value='C', cursor= "hand2")
```

```
self .P2D = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Un_compartamiento_periódico",font  
=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .P2,value='D', cursor= "hand2")
```

```
self .labelP3 = Label( self .Vquiz1, text="El_efecto_isotópico_presentado_en_la_  
predisociación_molecular_puede_inser_justificado_principalmente_por:", justify =LEFT,  
font=("Yu_gothic",12, "bold"))
```

```
self .P3A = Radiobutton( self .Vquiz1, text="El_efeto_de_excitación_rotacional_  
sobre_las_masas_de_cada_isotopómero",font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable =self .  
P3,value='A', cursor= "hand2")
```

```
self .P3B = Radiobutton( self .Vquiz1, text="El_efecto_de_excitación_  
vibracional_sobre_las_masas_de_cada_isotopómero",font=("Yu_gothic",10, "bold"),  
variable =self .P3,value='B', cursor= "hand2")
```

```
self .P3C = Radiobutton( self .Vquiz1, text="Las_diferencias_energéticas_entre_  
el_estado_inicial_y_final_de_la_transición", font=("Yu_gothic",10, "bold"), variable  
=self .P3,value='C', cursor= "hand2")
```

```
self .P3D = Radiobutton( self .Vquiz1, text="La_temperatura",font=("Yu_gothic"  
,10, "bold"), variable =self .P3,value='D', cursor= "hand2")
```

```
if Nivel1 == '1' and Nivel2 == '1' and Nivel3 == '1':
```

```
    self .labelCONGRATS = Label(self.Vquiz1,text="FELICITACIONES!", font=("Yu_
gothic",25, "bold"), fg="#33B8FF")
```

```
    self .labelFINAL = Label( self .Vquiz1,text="Culminaste los tres niveles \n
sobre predisociación molecular", font=("Yu_gothic",25, "bold"), fg="#33B8FF")
```

```
    self .botFINALIZAR = Button(self.Vquiz1,text="FINALIZAR",command=volver,
font=("Yu_gothic",13, "bold"), cursor= "hand2")
```

```
    self .botFINALIZAR.place( x = 275 , y = 550)
```

```
    self .labelCONGRATS.place( x = 150 , y = 180)
```

```
    self .labelFINAL.place( x = 50, y = 240 )
```

```
if Nivel1 != '1' or Nivel2 != '1' or Nivel3 != '1':
```

```
    self .botevaluar = Button( self .Vquiz1,text="EVALUAR",command=evaluar, font
=("Yu_gothic",8, "bold"), cursor= "hand2")
```

```
    self .botvolver = Button( self .Vquiz1,text="VOLVER",command=volver, font=(
Yu_gothic",8, "bold"), cursor= "hand2")
```

```
    self .labelUSUARIO.place( x = 80, y = 10)
```

```
    self .labelP3 .place( x = 20 , y = 70)
```

```
    self .P3A.place( x = 40 , y = 140)
```

```
    self .P3B.place( x = 40 , y = 165)
```

```
self .P3C.place( x = 40 , y = 190)
self .P3D.place( x = 40 , y = 215)

self .labelP1 .place( x = 20 , y = 245)

self .P1A.place( x = 40 , y = 305)
self .P1B.place( x = 40 , y = 330)
self .P1C.place( x = 40 , y = 355)
self .P1D.place( x = 40 , y = 380)

self .labelP2 .place( x = 20 , y = 410)

self .P2A.place( x = 40 , y = 460)
self .P2B.place( x = 40 , y = 485)
self .P2C.place( x = 40 , y = 510)
self .P2D.place( x = 40 , y = 535)

self .botevaluar .place( x = 250 , y = 580)
self .botvolver .place( x = 350 , y = 580)
self .labelNIVEL.place(x = 50, y = 45)
self .Vquiz1.mainloop()

self .labelN = Label( self .Vquiz, text ="Nombre:", font=("Yu_gothic",13, "bold"))
```

```
self .labelA = Label( self .Vquiz, text="Apellido:", font=("Yu_gothic",13, "bold"))
self .QUIZ = Label(self .Vquiz, text="QUIZnPONTE_A_PRUEBA!", font=("Yu_gothic"
,13, "bold"),fg = "#33B8FF")
```

```
self .ENombre = ttk.Entry( self .Vquiz, textvariable =self .Nombre, width=20)
self .EApellido = ttk .Entry( self .Vquiz, textvariable =self .Apellido, width=20)
```

```
self . botingresar = Button( self .Vquiz, text=" Ingresar ", command=Ingresar, font=("Yu_
gothic",13, "bold"), cursor= "hand2")
```

```
self .back = Button( self .Vquiz, text="Volver", command=back, font=("Yu_gothic",13, "
bold"), cursor= "hand2")
```

```
self .labelN . place (x=20,y=65)
```

```
self .ENombre.place(x=22,y=100)
```

```
self .QUIZ.place(x=16,y=5)
```

```
self .labelA . place (x=20,y=135)
```

```
self .EApellido . place (x=22,y=170)
```

```
self . botingresar . place (x=100,y=210)
```

```
self .back . place (x=20,y=210)
```

```
self .Vquiz.mainloop()
```

```
def help( self ):
```

```
self . root . destroy ()

self . ayuda = Tk()

self . ayuda . geometry ("820x600+300+10")

self . ayuda . resizable (0,0)

self . ayuda . iconbitmap ("Data\ENE.ico")

self . ayuda . title (" Predisociación")

self . image5 = PhotoImage (file="Data\help . png")

self . labeimg5 = Label (self . ayuda , image = self . image5)

def callback ( url ):

    webbrowser . open _new (url)

    self . label = Label ( self . ayuda , text ="https ://youtu .be/FqS3OpuzT-0", fg="#7

C3B97", cursor="hand2")

    self . label . bind ("<Button-1>", lambda e: callback ("https ://youtu .be/FqS3OpuzT-0

"))

    self . label . place ( x = 635, y = 580)

self . label = Label ( self . ayuda , text ="www.youtube.com", fg="blue", cursor="hand2")

self . label . bind ("<Button-1>", lambda e: callback ("https ://youtu .be/FqS3OpuzT-0"))

self . back = Button ( self . ayuda , text ="Atrás", command=self . __init__ , font=("Yu_gothic

",10, "bold"), cursor="hand2")
```

```
self.labeimg5.place( x = 0, y = 0)
self.back.place( x = 650, y = 20)
self.label.place( x = 635, y = 580)

self.ayuda.mainloop()
```

**def** NITROGENO(self):

```
self.root.destroy ()
self.infnitro = Tk()
self.infnitro.geometry("820x600+300+10")
self.infnitro.resizable (0,0)
self.infnitro.iconbitmap("Data\ENE.ico")
self.infnitro.title (" Predisociaci ón")

self.image3=PhotoImage(file="Data/ nitro .png")
self.labeimg3=Label(self.infnitro ,image=self.image3)

self.back = Button( self.infnitro ,text="Atrás",command=self.__init__, font=("Yu_
gothic",10, "bold"), cursor= "hand2")

self.labeimg3.place( x = 0, y = 0)
self.back.place( x = 700, y = 560)
```

```
# self . label . place( x = 0, y = 0)
```

```
self . infnitro . mainloop()
```

```
def info( self ):
```

```
self . root . destroy ()
```

```
self . inform = Tk()
```

```
self . inform . geometry("820x600+300+10")
```

```
self . inform . resizable (0,0)
```

```
self . inform . iconbitmap("Data\ENE.ico")
```

```
self . inform . title (" Predisociaci ón")
```

```
self . image1 = PhotoImage(file="Data\info .png")
```

```
self . labeimg1 = Label(self . inform, image=self . image1)
```

```
self . back = Button( self . inform, text = "Atrás", command = self . __init__, font = ("Yu_gothic", 10, "bold"), cursor = "hand2")
```

```
self . labeimg1 . place( x = 0, y = 0)
```

```
self . back . place( x = 700, y = 550)
```

```
self . inform . mainloop()
```

```
#####
```

```
def pltv ( self ):
```

```
    typeP = str ( self . type . get () )
```

```
    title = str ( self . Isotope . get () )
```

```
    v=int( self . v . get () )
```

```
if title == '14N14N+':
```

```
    E=np.loadtxt ("Data\E-N1414.dat")
```

```
    C=np.loadtxt ("Data\C-N1414.dat")
```

```
if title == '14N15N+':
```

```
    E=np.loadtxt ("Data\E-N1415.dat")
```

```
    C=np.loadtxt ("Data\C-N1415.dat")
```

```
if title == '15N15N+':
```

```
    E=np.loadtxt ("Data\E-N1515.dat")
```

```
    C=np.loadtxt ("Data\C-N1515.dat")
```

```
if typeP == 'c':
```

```
    plt . plot ( C[:, v], 'bo', label= 'Teóricos' )
```

```
    plt . title ( title )
```

```

plt . xlabel ("Número_cuántico_rotacional_J")
plt . ylabel ("Constantes_de_predisociación_10^8/s")
plt . xticks (np.arange (0,20, step=2))
plt . legend()
plt . show()

```

**if** typeP == 'd':

```

x1, y1 = [0, 10], [-108.51, -108.51]
plt . plot (x1, y1, color='black', linestyle='dashed', linewidth=1)
plt . plot (wvfC[0,:], -0.005*wvfC[v+1,:]**1+E[0,v], 'm', label='Función_Onda')
plt . plot (xpotC, ypotC, 'r', label='$C^2\backslash\Sigma_u^+_{estado}$')
plt . plot (xpotB, ypotB, 'b', label='$B^2\backslash\Sigma_u^+_{estado}$')
plt . title ("Curvas_de_Energía_Potencial")
plt . xlim(1,10)
plt . ylim(-108.8,-108.2)
plt . xlabel ("Distancia_Internuclear_a_0")
plt . ylabel ("Energía_E_h")

plt . legend()
plt . show()

```

**def** pltT( self):

```

typeP = str( self . type . get () )

```

```

title = str ( self . Isotope . get () )
T = float ( self . T . get () )
if title == '14N14N+':
    C=np.loadtxt ("Data\C-N1414.dat")
    E=np.loadtxt ("Data\E-N1414.dat")
    xk,yk,ykerr = np. loadtxt ("Data\kE1414.dat", unpack=True)
if title == '14N15N+':
    C=np.loadtxt ("Data\C-N1415.dat")
    E=np.loadtxt ("Data\E-N1415.dat")
    xk,yk,ykerr = np. loadtxt ("Data\kE1415.dat", unpack=True)
if title == '15N15N+':
    C=np.loadtxt ("Data\C-N1515.dat")
    E=np.loadtxt ("Data\E-N1515.dat")
    xk,yk,ykerr = np. loadtxt ("Data\kE1515.dat", unpack=True)

if T == 0.0:
    messagebox.showinfo("USA_OTRA_TEMPERATURA!", "Utiliza una temperatura\
ndiferente de cero")
if typeP == 'a':

kb=8.617e-5 # Boltzmann constant in eV/K
kb=kb/27.211396 # Boltzmann constant in Eh/K
beta =1.0/( kb*T)
F=np.zeros(len(E[0])) # Number of columns, i. e. number of vibrational states

```

```

D=np.zeros(len(E[0]))
X=np.zeros((len(E),len(E[0]))) # Number of rows ( rotational states ) and columns
for v in range(len(E[0])):
    for J in range(len(E)):
        F[v] += (2*J+1)*math.exp(-(E[J,v]-E[0,v])*beta) # Partition function for
each v
    for v in range(len(E[0])):
        for J in range(len(E)):
            X[J,v] = (2*J+1)*math.exp(-(E[J,v]-E[0,v])*beta)/F[v] # Molar fraction
for v in range(len(E[0])):
    for J in range(20):
        D[v] += X[J,v]*C[J,v] # Weighted predissociation rates
plt . plot (D[:, 'bo', label= 'Teóricos' )
plt . errorbar (xk,yk, yerr=ykerr,fmt='rx', label= 'Experimental')
plt . title ( title )
plt . ylabel ("Constantes de Predissociación [ $10^8$ /s]")
plt . xlabel ("Número Cuántico Vibracional  $\nu$ ")
plt . xticks (np.arange (0,10, step=1))
plt . text (-0.15,7.1, "Datos experimentales:")
plt . text (-0.15,6.0, "Molecular Physics, 1979, Vol.38")
plt . legend()
plt . show()

if typeP == 'e':

```

```

kb=8.617e-5 # Boltzmann constant in eV/K
kb=kb/27.211396 # Boltzmann constant in Eh/K
beta=1.0/(kb*T)
F=np.zeros(len(E[0])) # Number of columns, i.e. number of vibrational states
X=np.zeros((len(E),len(E[0]))) # Number of rows ( rotational states ) and columns
for v in range(len(E[0])):
    for J in range(len(E)):
        F[v] += (2*J+1)*math.exp(-(E[J,v]-E[0,v])*beta) # Partition function for
each v
    for v in range(len(E[0])):
        for J in range(len(E)):
            X[J,v] = (2*J+1)*math.exp(-(E[J,v]-E[0,v])*beta)/F[v] # Molar fraction

plt . plot (X[:,0], 'bo')
plt . title (str ( self . Isotope . get ( ) ))
plt . xlabel ("Número_Cuántico_Rotacional_J")
plt . ylabel ("Fracción_Molar")
Jmax=int(len(E))
plt . xticks (np.arange (0, Jmax, step=3))
plt . legend ()
plt . show ()

def pltJ ( self ):

```

```

typeP = str ( self . type . get () )
title = str ( self . Isotope . get () )
if title == '14N14N+':
    C=np.loadtxt ("Data\C-N1414.dat")
    E=np.loadtxt ("Data\E-N1414.dat")
    xk,yk,ykerr = np. loadtxt ("Data\kE1414.dat", unpack=True)
if title == '14N15N+':
    C=np.loadtxt ("Data\C-N1415.dat")
    E=np.loadtxt ("Data\E-N1415.dat")
    xk,yk,ykerr = np. loadtxt ("Data\kE1415.dat", unpack=True)
if title == '15N15N+':
    C=np.loadtxt ("Data\C-N1515.dat")
    E=np.loadtxt ("Data\E-N1515.dat")
    xk,yk,ykerr = np. loadtxt ("Data\kE1515.dat", unpack=True)

if typeP == 'b':
    J = self . J . get ()
    if J <= len(E):
        plt . plot (C[J ,:], 'bo', label= 'Teóricos')
        plt . errorbar (xk,yk,yerr=ykerr,fmt='rx', label= 'Experimental')
        plt . title ( title )
        plt . xlabel ("Número_Cuántico_Vibracional_\nu_")
        plt . ylabel ("Constantes_de_predisociación_[10^8$/s]")
        plt . xticks (np.arange (0,10, step=1))

```

```
plt . text (-0.15,7.1, "Datos_experimentales:")
plt . text (-0.15,6.0, "Molecular_Physics,_1979,_Vol.38")
plt . legend()
plt . show()

else :

    print("Too_large_J_value")

if typeP == 'c':
    v=self . v . get ()
    plt . plot (C[:,v], 'bo', label= 'Teóricos ')
    plt . title ( title )
    plt . xlabel ("Número_Cuántico_Rotacional_J")
    plt . ylabel ("Constantes_de_Predisociación_[10^8$/s]")
    plt . xticks (np.arange (0,20, step=2))
    plt . legend()
    plt . show()

def main():
    myapp = app()
    return 0

if __name__ == '__main__':
    main()
```