

Sobre el estado excitado $2\sigma_g$ del ion molecular H_2^+ en un campo magnético intenso

F.B. Alarcón^a, A.V. Turbiner^{†,*} y J.C. López Vieyra[§]

*Instituto de Ciencias Nucleares,
Universidad Nacional Autónoma de México,
Apartado Postal 70-543, 04510 México,*

^a*Facultad de Ciencias, UNAM,*

[†]*e-mail: turbiner@nuclecu.unam.mx*

[§]*e-mail: vieyra@nuclecu.unam.mx*

Recibido el 24 de junio de 2003; aceptado el 9 de octubre de 2003

Se presenta un estudio variacional del estado excitado $2\sigma_g$ del ion molecular H_2^+ en configuración paralela a un campo magnético fuerte de intensidad $B = 1$ a.u. ($= 2.35 \times 10^9$ G). Se muestra que una elección adecuada de una función de prueba simple da resultados precisos para la energía total y la energía de amarre.

Descriptores: Campos magnéticos intensos; ion molecular de hidrógeno; estados excitados.

A variational study of the excited state $2\sigma_g$ of the H_2^+ molecular ion in a parallel configuration with a strong magnetic field of strength $B = 1$ a.u. ($= 2.35 \times 10^9$ G) is presented. It is shown that a proper choice of a simple trial function gives accurate results in the total and binding energies.

Keywords: Strong magnetic fields; hydrogen molecular ion; excited states.

PACS: 31.15.Pf; 31.10.+z; 32.60.+i; 97.10.Ld

1. Introducción

Desde su descubrimiento en los años sesenta las estrellas de neutrones se han convertido en laboratorios en donde se ponen a prueba las leyes físicas fundamentales en condiciones extremas de densidad, temperatura ($\sim 10^6$ °K) y campos magnéticos en sus superficies ($B = 10^{12} - 10^{13}$ G). Las observaciones muy recientes hechas sobre los datos reunidos por el observatorio de rayos-X *Chandra* han revelado propiedades sorprendentes – líneas de absorción a energías ~ 0.7 KeV y ~ 1.4 KeV, en el espectro de la estrella de neutrones aislada 1E1207.4-5209, indicando la posible presencia de sistemas atómicos y/o moleculares en la atmósfera de dicha estrella [1]. En este contexto, el estudio detallado de sistemas atómicos y moleculares en presencia de campos magnéticos intensos, en particular el estudio de sus estados excitados, adquiere una mayor importancia al tratar de entender con precisión el origen y naturaleza de las observaciones hechas por *Chandra*.

El propósito de la presente nota es el de realizar un estudio variacional del estado excitado $2\sigma_g$ del ion molecular H_2^+ en un campo magnético $B = 1$ a.u. ($= 2.35 \times 10^9$ G) paralelo al eje molecular en la aproximación de Born-Oppenheimer a orden cero. Nuestro estudio está basado en un criterio de elección apropiado de las funciones de onda el cual ha sido aplicado con éxito en el estudio del estado base $1\sigma_g$ del ion molecular H_2^+ en campos magnéticos en el rango $B = 0 - 4.414 \times 10^{13}$ G [2, 3]. La receta empleada puede resumirse de la siguiente manera:

- (i) Encontrar una función de prueba variacional real Ψ_{trial} para la cual el potencial $V_{trial} = (\Delta\Psi_{trial})/(\Psi_{trial})$ reproduzca de manera

precisa el comportamiento del potencial original cerca de las singularidades de Coulomb y a distancias grandes, y

- (ii) incorporar en la función de prueba Ψ_{trial} las simetrías del problema (veáanse [2, 3] y las referencias allí citadas).

2. El ion H_2^+ : estado excitado $2\sigma_g$

Para definir una función de prueba para el estado excitado $2\sigma_g$ (primer estado excitado con cero proyección del momento angular en la dirección z , $m = 0$ y paridad par (*gerade*)) es natural suponer que la función de prueba para el estado base $1\sigma_g$ ya se conoce con una precisión suficientemente alta. La selección más simple para el estado $2\sigma_g$ consiste en introducir un prefactor multiplicando a la función de prueba del estado base, de modo tal que se pueda asegurar la ortogonalidad entre las funciones de onda del estado excitado y del estado base. Una realización inmediata de ésta idea esta dada por

$$\psi_{trial}^{2\sigma_g} = (r_1 + r_2 - C) \psi_0, \quad (1)$$

en donde ψ_0 corresponde a la función de prueba del estado base de la forma

$$\psi_0 = A_1\psi_1 + A_2\psi_2 + A_3\psi_3, \quad (2)$$

con

$$\begin{aligned} \psi_1 &= e^{-\alpha_1(r_1+r_2)} e^{-B\beta_1\rho^2}, \\ \psi_2 &= (e^{-\alpha_2r_1} + e^{-\alpha_2r_2}) e^{-B\beta_2\rho^2}, \\ \psi_3 &= (e^{-\alpha_3r_1-\alpha_4r_2} + e^{-\alpha_3r_2-\alpha_4r_1}) e^{-B\beta_3\rho^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Aquí r_1, r_2 son las distancias entre el electrón y cada uno de los protones (véase la Fig. 1), $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ es la distancia del electrón al eje z , y $\alpha_{1,2,3,4}, \beta_{1,2,3}$ y $A_{1,2,3}$ son parámetros variacionales. Para una descripción detallada de la función ψ_0 así como del significado físico de $\psi_{1,2,3}$ véase [2, 3].

La ortogonalidad de la función de prueba $\psi_{trial}^{2\sigma_g}$ con la función de prueba del estado base se asegura mediante la introducción del parámetro C en la definición (1). Este parámetro se determina por consiguiente a partir de la relación

$$C = \frac{\langle \psi_0(\mathbf{x}, R; \alpha, \beta, A) | r_1 + r_2 | \psi_0(\mathbf{x}, R; \alpha_0, \beta_0, A_0) \rangle}{\langle \psi_0(\mathbf{x}, R; \alpha, \beta, A) | \psi_0(\mathbf{x}, R; \alpha_0, \beta_0, A_0) \rangle} \quad (4)$$

en donde " α, β, A " representan a los parámetros variacionales que caracterizan al estado $2\sigma_g$, mientras que " α_0, β_0, A_0 " representan a los parámetros que minimizan la energía total del estado $1\sigma_g$. El parámetro R determina la distancia internuclear para cada configuración de los centros cargados. Como resultado de la minimización de la energía total del estado $2\sigma_g$ encontramos valores de " α, β, A " correspondientes al mínimo.

El hamiltoniano que describe la interacción de dos protones (infinitamente pesados) y un electrón en un campo magnético uniforme orientado según el eje z , $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, paralelo al eje internuclear, está dado (en Rydbergs) por [5]

$$\mathcal{H} = \hat{p}^2 + \frac{2}{R} - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + Bm + \frac{B^2 \rho^2}{4}, \quad (5)$$

en donde $\hat{p} = -i\nabla$ es el momento, r_1, r_2 son las distancias del electrón a cada uno de los centros cargados, y R es la distancia entre los protones (véase la Fig. 1). En el hamiltoniano (5) hemos considerado el potencial vectorial en la norma simétrica, $\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$. Para los estados $1\sigma_g$ y $2\sigma_g$ el número cuántico magnético $m = 0$.

Los cálculos de la energía variacional fueron realizados usando la rutina de minimización MINUIT de la biblioteca CERN-LIB y las integraciones numéricas fueron realizadas con la rutina D01FCF de la biblioteca NAG-LIB en una computadora personal Pentium III 450MHz.

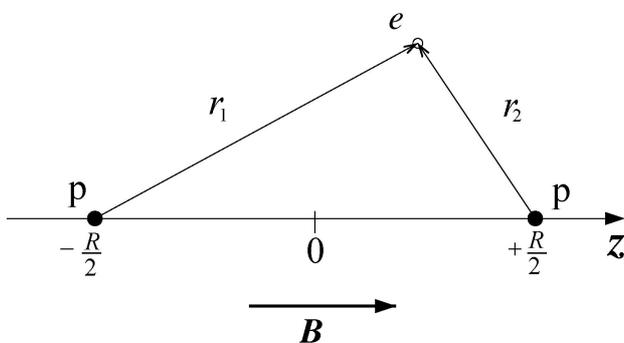


FIGURA 1. Arreglo geométrico del ion H_2^+ en configuración paralela con un campo magnético orientado según el eje z .

TABLA I. Energías total E_T , de amarre E_b y distancia internuclear de equilibrio R_{eq} para los estados $1\sigma_g$ (usando la función de prueba (2)) y $2\sigma_g$ (usando la función de prueba (1)) del ion molecular H_2^+ en un campo magnético $B = 1$ a.u. en configuración paralela. El valor del parámetro C en la Eq. (1) es 3.1522.

Estado	Fuente	E_T (Ry)	E_b (Ry)	R_{eq} (a.u.)
$1\sigma_g$	Turbiner y López Vieyra [2]	-0.94991	1.94991	1.752
	Kappes y Schmelcher [4]	-0.94642	1.94642	1.76
$2\sigma_g$	Este trabajo	0.34918	0.65082	6.632
	Kappes y Schmelcher [4]	0.34928	0.65072	6.64

3. Resultados y Discusión

Usando la función de prueba (1) se realizaron cálculos variacionales para diferentes distancias internucleares R alrededor de la posición de equilibrio del estado excitado $2\sigma_g$ en un campo magnético $B = 1$ a.u. En el Tabla I mostramos los resultados de la minimización para la energía total E_T , así como la energía de amarre $E_b = B/2 - E_T$ [La energía de amarre E_b se define como la diferencia entre la energía que tiene el electrón no ligado en el campo magnético y la energía total del sistema] y la distancia internuclear de equilibrio R_{eq} , para el estado $2\sigma_g$ y para el estado base $1\sigma_g$.

En primer lugar podemos enfatizar que la distancia de equilibrio del estado excitado $2\sigma_g$ es significativamente más grande que la correspondiente distancia de equilibrio para el estado base $1\sigma_g$, y que su energía de amarre es casi tres veces menor que la del estado base.

Para tener una idea del comportamiento de las energías total E_T y de amarre E_b , y de la distancia internuclear de equilibrio R_{eq} como función del campo magnético comparamos el caso $B = 1$ a.u. con el caso libre de campo $B = 0$. En el último caso el estado $2\sigma_g$ se convierte en el estado $3d\sigma_g$ (en notación espectroscópica estándar). Siguiendo la Ref. 4, este estado tiene una energía total $E_T = -0.34936 Ry$, una energía de amarre $E_b = 0.34936 Ry$ y una distancia de equilibrio $R_{eq} = 8.80$ a.u. Estos resultados nos permiten conjeturar que, de manera similar al estado base, tanto E_T como E_b crecen con un incremento del campo magnético mientras que la distancia internuclear disminuye. De hecho este comportamiento se confirma para todo el rango de campos magnéticos $B = 0 - 4.414 \times 10^{13} G$ [6].

Comparando nuestros resultados con los de Kappes y Schmelcher [4] (véase el Tabla I) inmediatamente resalta el hecho de que la función de prueba (1), que es muy simple con 9 parámetros variacionales, nos da resultados más precisos que los de la Ref. 4 en donde se ha usado una base de más de 200 orbitales atómicos optimizados. Esta comparación muestra explícitamente que la precisión relativa en la Ref. [4] no excede 10^{-4} . Esto indica una convergencia

muy lenta en la expansión en orbitales atómicos. Tomando en cuenta que en nuestro estudio además de los errores numéricos de los cálculos variacionales, tenemos un error introducido por el procedimiento de ortogonalización, que se hace con una aproximación del propio estado base, pensamos que la precisión relativa de nuestros resultados es alrededor de 10^{-5} tanto en la energía total E_T como en la energía de amarre E_b .

En conclusión hemos mostrado que los resultados variacionales obtenidos mediante una función de prueba simple son cuantitativamente comparables en precisión a los resultados obtenidos usando métodos tradicionales sofisticados. Debemos mencionar, sin embargo, el hecho de que aunque la función de prueba (1) describe bien al sistema en, y cerca de la posición de equilibrio, ésta función de prueba no es adecuada para describir el dominio de distancias internucleares grandes para las cuales aparece el fenómeno de disociación

$H_2^+ \rightarrow H + p$. La razón de esto reside en el hecho de que en la definición de la función de prueba (1) se ha introducido un prefactor común para las funciones $\psi_{1,2,3}$ (Ec. (3)). Una manera directa de mejorar esta situación consistirá entonces en la introducción de prefactores diferentes para cada una de estas funciones. Un estudio mas completo desde este punto de vista esta actualmente en proceso y será publicado en alguna parte [6].

Agradecimientos

F.B.A. agradece el apoyo económico del SNI mediante el programa para ayudantes. Este trabajo es apoyado parcialmente por el proyecto CONACyT # 36650-E y por el proyecto universitario FENOMECC.

*. On leave of absence from the Institute for Theoretical and Experimental Physics, Moscow 117259, Russia

1. D. Sanwal *et al.*, *ApJL*, **574** (2002) L61, (astro-ph/0206195); K. Mori and C.J. Hailey, 'X-Ray spectroscopy of the isolated neutron star 1E1207.4-5209: Atmospheric composition and equation of state', (astro-ph/0301161).
2. A.V. Turbiner and J.C. López Vieyra, *Phys. Rev. A* **68** (2003) 012504.
3. J.C. Lopez V., P.O. Hess, and A. Turbiner, *Phys.Rev. A* **56** (1997) 4496, (astro-ph/9707050).
4. U. Kappes and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **51** (1995) 4542.
5. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press Oxford - New York - Toronto - Sydney - Paris - Frankfurt, 1977).
6. A.V. Turbiner and J.C. López Vieyra, 'The H_2^+ molecular ion in a strong magnetic field. The lowest excited states', (por publicarse en *Phys. Rev. A* **69** mayo 2004).