

El ión molecular exótico H_4^{3+} en un campo magnético intenso

H. Olivares Pilón

Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM,

Apartado Postal 70-543, 04510 México

e-mail: horop@nucleares.unam.mx

Recibido el 13 de enero de 2006; aceptado el 27 de marzo de 2006

Utilizando el método variacional se realiza un estudio detallado de los estados electrónicos mas bajos con $m = 0, -1$ del ión molecular exótico H_4^{3+} en campos magnéticos intensos $B \gtrsim 10^{13}$ G, en la configuración lineal y simétrica, paralela a la dirección del campo magnético. Se hace una extensión del primer estudio del estado base $1\sigma_g$ (J.C. López y A. Turbiner, *Phys. Rev. A* **62**, 022510, 2000), obteniendo que la curva de energía potencial desarrolla un mínimo suficientemente profundo para distancias internucleares finitas, indicando la posible existencia del ión molecular H_4^{3+} , para campos magnéticos $B \gtrsim 3 \times 10^{13}$ G. Se demuestra por primera vez que el estado excitado $1\pi_u$ puede existir para un campo magnético $B = 4.414 \times 10^{13}$ G correspondiente al límite de aplicabilidad de la teoría no-relativista.

Descriptores: Campos magnéticos intensos; ión molecular H_4^{3+} ; estados excitados.

Using the variational method, a detailed study of the lowest $m = 0, -1$ electronic states of the exotic molecular ión H_4^{3+} in a strong magnetic field, in the linear symmetric configuration parallel to the direction of the magnetic field is carried out. A extended study of the $1\sigma_g$ ground state (J.C. López and A. Turbiner, *Phys. Rev. A* **62**, 022510, 2000) was performed obtaining that the potential energy curve displays a sufficiently deep minimum for finite internuclear distances, indicating the possible existence of the molecular ión H_4^{3+} , for magnetic fields of strength $B \gtrsim 3 \times 10^{13}$ G. It is demonstrated that the excited state $1\pi_u$ can exist for a magnetic field $B = 4.414 \times 10^{13}$ G corresponding to the limit of applicability of the non-relativistic theory.

Keywords: Strong magnetic field; molecular ión H_4^{3+} ; excited states.

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

1. Introducción

A partir del descubrimiento de los pulsares en 1967, identificados posteriormente como estrellas de neutrones (cuya existencia fue predicha en 1932 por L. Landau [1]) con enormes campos magnéticos de intensidad entre 10^{12} G -10^{13} G, el comportamiento de sistemas atómicos y moleculares en medios tan extremos ha sido objeto de numerosas investigaciones. Las primeras de ellas fueron realizadas en las áreas de la física de plasmas y en la astrofísica por Kadomstev y Kudrayavstev [2] y Ruderman [3], respectivamente. Los resultados mas relevantes de esas primeras investigaciones demostraron que la energía de amarre de los sistemas atómicos y moleculares crece considerablemente con el campo magnético a la vez que se vuelven más compactos. A consecuencia de este comportamiento surgió la conjetura sobre la posible formación de cadenas moleculares alineadas en la dirección del campo magnético.

Los estudios de los sistemas coulombianos en campos magnéticos intensos han sido alentados por los resultados de las observaciones de la estrella de neutrones 1E1207.4-5209 realizadas en el año 2002 por el observatorio espacial de rayos X Chandra. Estas observaciones indican la presencia de dos líneas de absorción en 0.7 keV y 1.4 keV, cuyo origen pudiera deberse a la existencia de sistemas moleculares exóticos en la atmósfera de dicha estrella [4]. En particular, se han intensificado los estudios de sistemas moleculares con un solo electrón, tradicionales y exóticos, tales como H_2^+ , H_3^{2+} , H_4^{3+} , $(HeH)^{2+}$, He_2^{3+} y Li_2^{5+} (ver por ejemplo la Ref. 5).

El presente trabajo se centra en el análisis cuantitativo de los estados electrónicos mas bajos del sistema molecular

constituido de cuatro protones y un electrón, H_4^{3+} , en campos magnéticos intensos. Específicamente, se hace una extensión del primer estudio de este sistema realizado en la Ref. 6 para el estado base (en el cual se demostró la posible existencia de este ión molecular exótico en configuración lineal y paralela en un campo magnético $B \sim 4.414 \times 10^{13}$ G), y se estudia por primera vez la posible existencia de estados electrónicos excitados. En esta investigación se utiliza el método variacional dentro del marco de la teoría no relativista, $B \leq 4.414 \times 10^{13}$ G (límite de Schwinger).

En todo el artículo se utilizan unidades atómicas en donde $\hbar = e = m_e = 1$ y la energía se expresa en Rydbergs. Para denotar los estados, se sigue la convención espectroscópica, esto es, un número indica el número cuántico principal, las letras griegas $\sigma, \pi, \delta \dots$ denotan el número cuántico magnético para $|m| = 0, 1, 2 \dots$, respectivamente. La paridad espacial del estado es definida por g (*gerade*) para estados con paridad par y u (*ungerade*) para estados con paridad impar. En particular el estado base con número cuántico principal igual a 1, paridad par y número cuántico magnético $m = 0$ se denota como $1\sigma_g$.

2. El ión molecular H_4^{3+}

El ión molecular H_4^{3+} es un sistema molecular exótico constituido por cuatro protones y un electrón en presencia de un campo magnético intenso. Para el presente trabajo se considera la aproximación de Born-Oppenheimer a orden cero, en donde los protones se consideran infinitamente masivos. Además supondremos que la configuración de mínima energía corresponde a la situación en donde los protones

están situados sobre una línea recta (configuración lineal) paralela a las líneas del campo magnético B (configuración paralela). El campo magnético se asume como constante y homogéneo orientado en la dirección z , esto es $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Considerando el origen de coordenadas en algún punto entre los protones internos, las posiciones de los cuatro protones sobre el eje z se denotan como $R_1, R_2, -R_3$ y $-R_4$. Por razones de simetría, supondremos además que $R_1 = R_3$ y $R_2 = R_4$ (configuración simétrica [ver Fig. 1]).

Para describir el campo magnético $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ conviene elegir el potencial vectorial magnético en la norma simétrica $\mathbf{A} = B/2(-y, x, 0)$, con lo cual se aprovecha la simetría azimutal del sistema (es por esta simetría que se utilizan coordenadas cilíndricas).

Con las suposiciones anteriores y sin considerar un término constante que proviene de tomar en cuenta el espín del electrón (el cual sólo cambia el nivel de referencia de la energía), el hamiltoniano que describe al ión molecular H_4^{3+} es

$$\hat{\mathcal{H}} = -\Delta + \hat{l}_z B + \frac{B^2 \rho^2}{4} + V(\rho, z), \quad (1)$$

en donde $\rho^2 = x^2 + y^2$ es la distancia perpendicular del electrón al eje z , \hat{l}_z es la componente z del momento angular (la cual es una cantidad que se conserva y tiene asociado el eigenvalor m –el número cuántico magnético) y $V(\rho, z)$ es la suma del potencial coulombiano electrostático de la interacción entre el electrón y cada centro cargado, más el término clásico de repulsión entre los centros cargados. Explícitamente el potencial $V(\rho, z)$ está dado por

$$V(\rho, z) = -\frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} - \frac{2}{r_3} - \frac{2}{r_4} + \frac{2}{R_2 - R_1} + \frac{2}{R_2 + R_3} + \frac{2}{R_2 + R_4} + \frac{2}{R_1 + R_3} + \frac{2}{R_1 + R_4} + \frac{2}{R_4 - R_3}, \quad (2)$$

en donde $r_i = \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}$, son las distancias entre el electrón y el correspondiente protón (z_i son las coordenadas de cada protón sobre el eje z).

3. Las funciones de prueba

Para el estudio de este sistema molecular se utiliza el método variacional con funciones de prueba aplicables a cualquier valor del campo magnético. Así, el punto central consiste en la adecuada elección de las funciones de prueba. Para ello, se siguieron los criterios de *adecuación física* usados por Turbinder-López (ver por ejemplo la Ref. 5), que han mostrado dar resultados, cualitativa y cuantitativamente, muy precisos para diferentes sistemas coulombianos en campos magnéticos intensos. Básicamente estos criterios son:

- 1.- El potencial $V_p = (\Delta \psi_p) / \psi_p$, para el cual la función de prueba ψ_p es eigenfunción exacta de $\mathcal{H}_p = -\Delta + V_p$, con energía cero, debe reproducir el potencial original

cerca de las singularidades de Coulomb y el comportamiento de oscilador armónico a grandes distancias.

- 2.- La función de prueba debe incluir las simetrías propias del sistema.
- 3.- Para el estado base del sistema, la función de prueba no debe anularse en el dominio de definición del problema (Teorema de Perron).

Además, puesto que los centros cargados (protones) son partículas idénticas, la función de prueba se elige simétrica con respecto al intercambio de éstos, es decir que sea invariante ante las transformaciones $P_{ij}(r_i \leftrightarrow r_j)$, $i, j = 1 \dots 4$.

La función de prueba que se utiliza es una combinación lineal de términos que cumplen los requerimientos descritos anteriormente. Cada uno de estos *ansatz* tiene la forma general

$$\Psi_m \equiv \mathcal{U}_m \Psi_0, \quad (3)$$

en donde

$$\Psi_0 = \left(\sum_{perm\{\alpha_1, \dots, \alpha_4\}} e^{-\alpha_1 r_1 - \alpha_2 r_2 - \alpha_3 r_3 - \alpha_4 r_4} \right) \times e^{-\beta B \frac{\rho^2}{4}}, \quad (4)$$

$$\mathcal{U}_m = e^{im\phi} \rho^{|m|}. \quad (5)$$

Aquí el factor Ψ_0 corresponde a una función de prueba general para el estado base ($m = 0$), en donde $\alpha_{1,2,3,4}$ y β son parámetros variacionales. La suma en Ψ_0 se realiza sobre todas las posibles permutaciones de los parámetros $\alpha_{1,2,3,4}$. Con el término \mathcal{U}_m se incluyen las excitaciones para diferentes valores del número cuántico magnético m . Las funciones de prueba Ψ_m dadas por la Ec. (3) correspondientes a diferentes valores del número cuántico magnético m son ortogonales entre sí, y por lo tanto resultan adecuadas para describir los estados mas bajos dentro de cada familia de estados propios para un valor de m fijo.

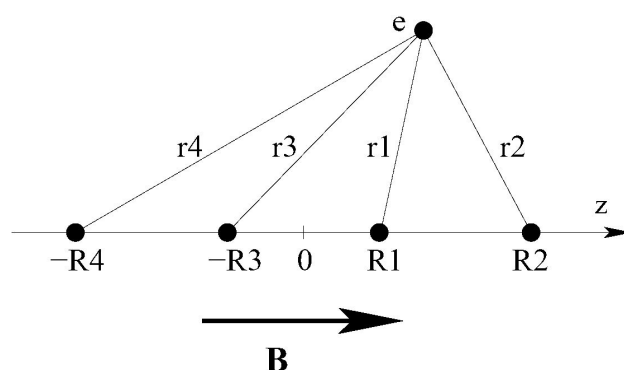


FIGURA 1. El ión molecular H_4^{3+} en configuración lineal y paralela a un campo magnético constante y homogéneo dirigido según el eje z , $\mathbf{B} = (0, 0, B)$. Las posiciones de los protones se indican por los cuatro puntos sobre el eje z y están situados a distancias R_1, R_2, R_3 y R_4 del origen. La posición del electrón se marca por un punto fuera del eje. Las distancias del electrón a cada protón se denotan como r_1, r_2, r_3 y r_4 , respectivamente.

3.1. Rotación de norma

Considerando una función de prueba Ψ_m (para un estado con número cuántico magnético m definido) dada por la Ec. (3) y el hamiltoniano del sistema $\hat{\mathcal{H}}$ [Ec. (1)], la energía total del sistema se aproxima como

$$E_{T_{var}} = \min_{\{\alpha's, \beta's\}} \frac{\int \rho^{2|m|} \Psi_0 \hat{h}_m \Psi_0 d\mathbf{r}}{\int \rho^{2|m|} \Psi_0 \Psi_0 d\mathbf{r}}, \quad (6)$$

en donde se ha definido el operador

$$\hat{h}_m \equiv \mathcal{U}_m^{-1} \hat{\mathcal{H}} \mathcal{U}_m = \hat{\mathbf{p}}_m^2 + Bm + \frac{B^2}{4} \rho^2 + V(\rho, z), \quad (7)$$

al que llamamos "hamiltoniano rotado de norma", y $\hat{\mathbf{p}}_m \equiv \mathcal{U}_m^{-1} \hat{\mathbf{p}} \mathcal{U}_m$ el "momento covariante" (para una mayor discusión véase la Ref. 5). En adelante, $E_{T_{var}}$ la denotaremos simplemente como E_T . Esta formulación es muy conveniente, ya que cada hamiltoniano \hat{h}_m (para m fija), describe una familia de eigenestados con número cuántico m los cuales pueden ser tratados de manera independiente entre estados con diferentes valores de m . Así, gracias a esta "rotación de norma", el estado base y los estados excitados se describen por funciones de prueba que tienen la misma estructura [dada por la Ec. (4)] aunque en la normalización aparece un factor de peso $\rho^{2|m|}$.

Por otra parte, de los criterios de *adecuación*, el potencial asociado a una función de prueba arbitraria Φ_0 se determina ahora mediante la relación

$$V_0^{(m)} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_m^2 \Phi_0}{\Phi_0} \equiv \frac{\tilde{\Delta} \Phi_0}{\Phi_0}, \quad (8)$$

en donde se define el laplaciano covariante $\tilde{\Delta}$ como

$$\tilde{\Delta} = \Delta + 2|m| \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \right). \quad (9)$$

Así, la forma general del potencial asociado con cada término de la función de prueba Ψ_0 , [Ec. (4)], resulta ser ⁱ

$$V_0^{(m)} = \left\{ \beta B \rho^2 - 2 \right\} \sum_{i=1}^4 \frac{\alpha_i}{r_i} + \sum_{i,k=1}^4 \alpha_i \alpha_k (\hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_k) - \beta B + \frac{(\beta)^2 B^2}{4} \rho^2 - 2|m| \sum_{i=1}^4 \frac{\alpha_i}{r_i} - |m| \beta B, \quad (10)$$

con

$$\hat{\mathbf{n}}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}_k = \frac{1}{r_i r_k} \{ \rho^2 + (z - z_i)(z - z_k) \},$$

en donde los $\hat{\mathbf{n}}_i \equiv (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)/|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|$ son vectores unitarios orientados según la línea que conecta la posición del i -ésimo centro cargado \mathbf{r}_i , con la posición del electrón \mathbf{r} . Así, el potencial (10) asociado con cada término de la función de prueba Ψ_0 [Ec. (4)] reproduce exactamente los potenciales de Coulomb originales para $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 1$, y el potencial de oscilador armónico para $\beta = 1$.

4. Descripción cualitativa de la función de prueba Ψ_p

La elección de la función de prueba más general Ψ_0 [Ec.(4)] no fue de ningún modo arbitraria, en ella los parámetros $\alpha's$ pueden ser interpretados como la carga efectiva de los protones y el parámetro β como el acoplamiento efectivo del electrón con el campo magnético B . Con esta caracterización de los parámetros variacionales, la forma de la función de prueba se eligió de modo tal que al imponer ciertas condiciones sobre los parámetros las funciones de prueba describan diferentes situaciones físicas.

Consideremos por ejemplo el caso en el cual la interacción del electrón con cada uno de los protones es *coherente*, es decir que el electrón interactúa de la misma forma con cada protón. Para describir dicha situación física, basta con tomar $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 \equiv \alpha_1$ en la Ec. (4). Definiendo a esta función como $\psi_0^{(1)}$ se obtiene

$$\psi_0^{(1)} = e^{-\alpha_1(r_1+r_2+r_3+r_4)} e^{-\beta_1 \frac{B}{4} \rho^2}.$$

Esta función de prueba es un producto de una función del tipo de Heitler-London (usada originalmente para describir el sistema H_2^+ sin campo magnético) multiplicada por el orbital de Landau más bajo. Los resultados de los cálculos verifican (*a posteriori*) que esta función aporta la mayor contribución en la descripción del sistema cerca de su posición de equilibrio.

Para describir la situación física a distancias internucleares grandes, en donde el electrón interactúa esencialmente con un solo protón (interacción *incoherente*), se pueden elegir todos los parámetros $\alpha's$ iguales a cero, excepto uno al que denotamos como α_2 . Con estas consideraciones obtenemos la función de prueba

$$\psi_0^{(2)} = \left\{ e^{-\alpha_2 r_1} + e^{-\alpha_2 r_2} + e^{-\alpha_2 r_3} + e^{-\alpha_2 r_4} \right\} e^{-\beta_2 \frac{B}{4} \rho^2},$$

que corresponde al producto de una función tipo Hund-Mulliken (usada originalmente para describir el sistema H_2^+ sin campo magnético) multiplicada por el orbital de Landau más bajo. Esta función de prueba describe la interacción del electrón con cada uno de los protones de manera independiente.

Resulta ahora claro que diferentes degeneraciones de la función general [Ec. (4)] que resulta de imponer ciertas condiciones sobre los parámetros variacionales conducen a diferentes descripciones físicas del sistema, y por tanto a varias funciones de prueba. En este caso, y para no discriminar entre una u otra de las diferentes descripciones, se consideró como función de prueba la combinación lineal de todos los posibles casos particulares. Con un total de once componentes, la función de prueba que se usó en el presente estudio es

$$\begin{aligned} \Psi_p = & A_1 \psi_0^{(1)} + A_2 \psi_0^{(2)} + A_3 \psi_0^{(3)} + A_4 \psi_0^{(4)} \\ & + A_5 \psi_0^{(5)} + A_6 \psi_0^{(6)} + A_7 \psi_0^{(7)} + A_8 \psi_0^{(8)} \\ & + A_9 \psi_0^{(9)} + A_{10} \psi_0^{(10)} + A_{11} \psi_0^{(11)}. \end{aligned} \quad (11)$$

TABLA I. Los términos de la función de prueba Ψ_p [Ec. (11)] junto con el número de parámetros variacionales y su interpretación física (véase el texto).

Función	Num. Param. Var.	Descripción Física
$\psi_0^{(1)}$	2	Interacción Coherente
$\psi_0^{(2)}$	2	Interacción Incoherente
$\psi_0^{(3)}$	2	$H_2^+ + 2p$
$\psi_0^{(4)}$	2	$H_3^{2+} + p$
$\psi_0^{(5)}$	3	“ $H_2^+ + H_2^+$ ”
$\psi_0^{(6)}$	3	“ $H_3^{2+} + H$ ”
$\psi_0^{(7)}$	4	“ $H_2^+ + H + H$ ”
$\psi_0^{(8)}$	3	$p + \text{“}H_2^+ + H\text{”}$
$\psi_0^{(9)}$	4	$p + \text{“}H + H + H\text{”}$
$\psi_0^{(10)}$	3	$p + p + \text{“}H + H\text{”}$
$\psi_0^{(11)}$	5	“ $H + H + H + H$ ”

Todos los términos incluidos en la Ec. (11) admiten cierta interpretación física. Estos se resumen en la Tabla I, en donde presentamos además el número de parámetros variacionales que contiene cada uno de ellos. Para un análisis detallado de cada uno de estos términos véase la Ref. 7.

Otra degeneración de la Ec. (4) en la cual los parámetros α 's son iguales por pares, *i.e.*, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$; $\alpha_3 = \alpha_4 = \alpha'$, ($\alpha \neq \alpha'$), describe la situación en donde el electrón es compartido por dos protones de dos formas distintas, lo cual se puede interpretar como una interacción “ $H_2^+ + H_2^+$ ” entre dos iones moleculares de hidrógeno, aunque por supuesto sólo se tiene un electrón (este tipo de interpretaciones físicas las denotamos entre comillas en la Tabla I). Del mismo modo, en el caso más general en donde todos los parámetros α 's son diferentes, la función correspondiente es una suma de productos de cuatro funciones hidrogenoides por una función de Landau [véase Ec. (4)], que describe un estado mezclado de cuatro “átomos” de hidrógeno compartiendo un solo electrón.

Junto con los coeficientes $A_{1,\dots,11}$ de la combinación lineal [Ec. (11)] y las posiciones $R_{1,\dots,4}$ (véase la Fig. 1) se tiene un total de 48 parámetros variacionales. La condición de normalización de la función de prueba [Ec. (11)] permite mantener fijo uno de los coeficientes A , y considerando la restricción de simetría ($R_3 = R_1, R_4 = R_2$), el número efectivo de parámetros variacionales se reduce a 45.

5. Técnica computacional

Todos los cálculos fueron llevados a cabo en una computadora personal PC DELL con dos procesadores Xeon a 2.8 GHz cada uno. Para los cálculos de minimización se hizo uso de la rutina de minimización MINUIT de la biblioteca CERN-LIB y para las integraciones numéricas se utilizó la rutina D01FCF de la biblioteca NAG-LIB. La precisión relativa en el cálculo de las integrales numéricas fue de 10^{-11} . Además, cuando los parámetros variacionales que minimizan

la energía total del sistema son determinados, el cálculo de la energía variacional toma solo unos cuantos segundos.

5.1. Estrategia de minimización

El cálculo de la energía variacional comprende dos aspectos técnicos: la evaluación numérica de las integrales en 2-dim y la minimización de la energía respecto de los parámetros variacionales. En el proceso de minimización el objetivo es encontrar un punto en el espacio paramétrico multidimensional que nos minimice la energía total del sistema [Ec. (6)]. Dado que tenemos 45 parámetros variacionales, la búsqueda del mínimo es una tarea formidable, complicada y tediosa. Por esta razón no es una buena idea comenzar el procedimiento haciendo una minimización en la cual todos los parámetros se varían simultáneamente. La estrategia usada consistió en realizar secuencias de minimizaciones del modo siguiente:

- Ansatz por ansatz, teniendo claro que entre los once términos que aparecen en la Ec. (11), el más general $\psi_{p_0}^{(11)}$ debería darnos el mejor (menor) valor en la energía total.
- Combinaciones de dos en dos ansätze, tomando a $\psi_{p_0}^{(11)}$ como el ansatz común a todas estas combinaciones.
- Algunas combinaciones de tres en tres ansätze, tomando como base las combinaciones anteriores, a las que se les incluyó un ansatz más.
- Partiendo de aquella combinación de tres ansätze con el mejor valor de la energía total, se incorporaron nuevos ansätze hasta tener el total de once.

Cada paso en una minimización particular consistía en mantener fijos algunos parámetros, mientras que otros se variaban. La elección de qué parámetros debían mantenerse fijos y cuáles libres se basó siempre en la interpretación física de dichos parámetros. De ningún modo el cálculo es automático, sino que, más bien, se requiere de un tratamiento artesanal sofisticado. Con este procedimiento se obtuvo una configuración de parámetros variacionales en la cual el valor de la energía total del sistema es mínima. Cada procedimiento de minimización para un campo magnético dado con toda generalidad tomó varios meses de cálculo (véase la Ref. 7).

6. Resultados

A continuación se presentan los resultados para la energía total E_T , la energía de amarreⁱⁱ E_b ($E_b \equiv B - E_T$) y las posiciones de equilibrio de los protones ($R_3 = R_1, R_4 = R_2$) para el estado base $1\sigma_g$ y el estado excitado $1\pi_u$ del ión molecular H_4^{3+} . Con la finalidad de comparar apropiadamente nuestros resultados con los obtenidos por Turbiner-López [6]ⁱⁱⁱ se realizaron cálculos considerando dos diferentes factores de conversión a unidades atómicas. Estos factores son $B_0 = 2.35 \times 10^9$ G (el adoptado en este trabajo) y $B_0 = 2.3505 \times 10^9$ G (el adoptado en la Ref. 6).

TABLA II. Resultados obtenidos para el estado base $1\sigma_g$ del ión molecular H_4^{3+} en presencia de un campo magnético B para diferentes valores del factor de conversión B_0 y comparación con los obtenidos por Turbiner-López.

$B(\text{G})$	$B_0(\times 10^9 \text{ G})$	$E_T(\text{Ry})$	$E_b(\text{Ry})$	$R_1(\text{a.u.})$	$R_2(\text{a.u.})$	
3×10^{13}	2.35	12727.5422	38.4153	0.0635	0.2763	Presente
4.414×10^{13}	2.35	18739.2526	43.7261	0.0574	0.2336	Presente
	2.3505	18735.2602	43.7230	0.0574	0.2336	Presente
	2.3505	18735.4675	43.5157	0.0572	0.2326	Turbiner-López ^a

^a No publicado

TABLA III. Resultados para el estado excitado $1\pi_u$ del ión molecular H_4^{3+} , para un campo magnético $B = 4.414 \times 10^{13}$ G en configuración lineal, paralela y simétrica.

$B(\text{G})$	$B_0(\times 10^9 \text{ G})$	$E_T(\text{Ry})$	$E_b(\text{Ry})$	$R_1(\text{a.u.})$	$R_2(\text{a.u.})$
4.414×10^{13}	2.35	18742.8185	40.1603	0.0651	5.5534
	2.3505	18738.8254	40.1578	0.0651	5.5537

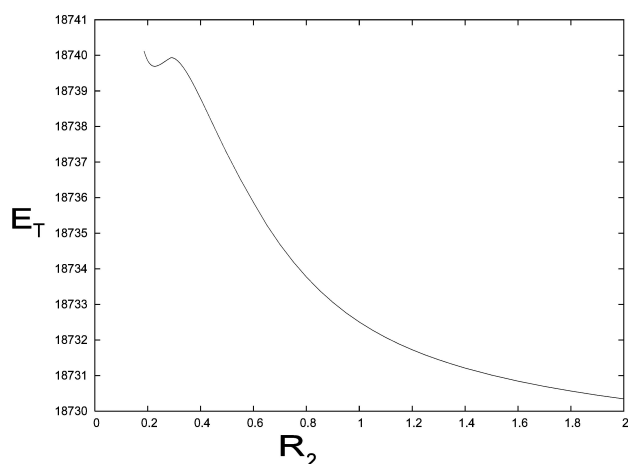


FIGURA 2. Curva de la energía total del ión molecular H_4^{3+} en el estado base $1\sigma_g$ como función del parámetro R_2 , la cual presenta un mínimo para distancias de equilibrio finitas, $R_1 = 0.0574$ a.u. y $R_2 = 0.2336$ a.u. (en el mínimo $R_3 = R_1$ y $R_4 = R_2$). Esto en configuración lineal y paralela al campo magnético $B = 4.414 \times 10^{13}$ G, con $B_0 = 2.35 \times 10^9$ G.

6.1. El Estado Base $1\sigma_g$

Al realizar cálculos de manera independiente con cada uno de los once ansatz presentados en la Tabla I cada uno de ellos presenta un mínimo en la superficie de energía total para valores finitos de los parámetros $R_{1,2,3,4}$. En la Tabla II se muestran los resultados del estado base $1\sigma_g$ para dos valores del factor de conversión B_0 al considerar la función de prueba como la combinación lineal de la Ec. (11). Se incluyen también los resultados de los cálculos revisados hechos por Turbiner y López para este estado [6], los cuales fueron realizados considerando únicamente los cuatro primeros términos de la función de prueba Ψ_p que aparecen en la Tabla I y el factor de conversión $B_0 = 2.3505 \times 10^9$ G.

Para tener una idea de qué tan ligado es el sistema, se obtuvo una curva de la energía total del sistema como fun-

ción de R_2 , manteniendo el parámetro R_1 fijo al valor correspondiente al de la configuración de energía total mínima (en configuración simétrica). Para ello, ahora se consideran a R_3 y R_4 como parámetros variacionales, es decir se elimina la restricción de simetría. La curva obtenida (Fig. 2) presenta un mínimo bien definido para distancias internucleares finitas en la configuración simétrica, y una altura de la barrera $\Delta E \equiv E_{max} - E_{min} = 0.242$ Ry. Al analizar el comportamiento asintótico de esta curva para R_2 grande se encuentra que $R_1 + R_3 \approx 0.1113$ (vease Fig. 1) y $R_4 - R_3 \approx 0.1110$ cuyos valores resultan prácticamente iguales a la distancia de equilibrio del ión H_3^{2+} (ver Tabla IV) lo cual nos sugiere que un posible decaimiento del sistema es $H_4^{3+} \rightarrow H_3^{2+} + p$. Es claro que la energía total como función de R_1, R_2, R_3 y R_4 , genera una superficie, y en particular la curva presentada en la Fig. 2 corresponde al corte a lo largo del valle de esta superficie.

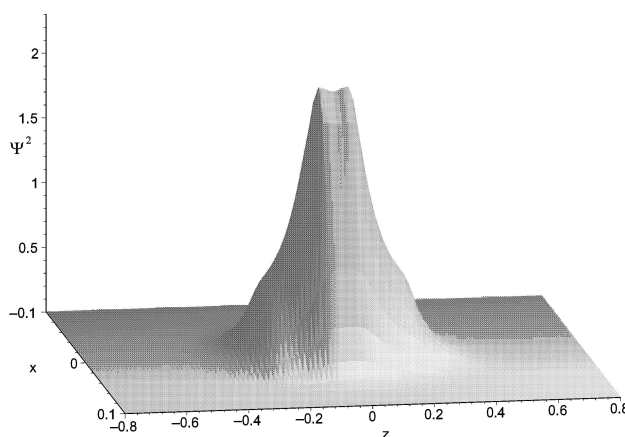


FIGURA 3. Distribución electrónica del ión molecular H_4^{3+} en su estado base $1\sigma_g$ en un campo magnético $B = 4.414 \times 10^{13}$ G, con $B_0 = 2.35 \times 10^9$ G, en configuración lineal y paralela a la dirección del campo magnético, considerando que $R_1 = R_3$ y $R_2 = R_4$ (ver Fig.1).

TABLA IV. Comparación entre sistemas moleculares con un solo electrón: H_2^+ [8], H_3^{2+} [9] y H_4^{3+} (presente) en diferentes estados. Todos ellos en configuración lineal, simétrica y paralela en presencia de un campo magnético $B = 4.414 \times 10^{13}$ G ($B_0 = 2.35 \times 10^9$ G). En H_3^{2+} la distancia de equilibrio R_{eq} corresponde a la distancia entre dos protones adyacentes. Para el sistema H_4^{3+} ésta se consideró como la separación entre los protones internos $R_{eq} = 2R_1$ (ver Fig. 1).

	Estado	$E_T(\text{Ry})$	$E_b(\text{Ry})$	$R_{eq}(\text{a.u.})$
H_2^+	$1\sigma_g$	18728.477	54.5018	0.1016
	$1\sigma_u$	18750.07	32.912	2.021
	$1\pi_u$	18741.89	41.09	0.130
	$1\pi_g$	18757.273	25.7054	2.237
	$1\delta_g$	18747.527	35.407	0.148
	$1\delta_u$	18761.18	21.80	2.230
H_3^{2+}	$2\sigma_g$	18781.576	1.402	3.120
	$1\sigma_g$	18727.7475	55.2312	0.110
	$1\sigma_u$	No existe		
	$1\pi_u$	18742.7564	40.2223	0.145
	$1\pi_g$	No existe		
	$1\delta_g$	18748.9067	34.0720	0.167
H_4^{3+}	$1\delta_u$	No existe		
	$1\sigma_g$	18739.2526	43.7261	0.1149
	$1\pi_u$	18742.8185	40.1603	0.1302

La distribución electrónica correspondiente al estado base $1\sigma_g$ se muestra en la Fig. 3, en donde se observa que la nube electrónica se concentra principalmente alrededor del punto intermedio a los protones.

6.2. El estado excitado $1\pi_u$

Los cálculos llevados a cabo para el estado excitado $1\pi_u$ muestran que cada uno de los once ansatz que se utilizaron, presenta de manera independiente un mínimo en la curva de energía para valores finitos de los parámetros $R_{1,2,3,4}$. Los cálculos se realizaron para los dos valores del factor de conversión B_0 y se muestran en la Tabla III.

En la Fig. 4 se muestra la distribución electrónica para el estado excitado $1\pi_u$. En ella, la posición de los protones está indicada por puntos en el plano (x, z) . El que aparentemente sólo estén presentes tres puntos y no cuatro, se debe a que las distancias entre los protones internos es muy pequeña en comparación con la dimensión total del sistema (ver Tabla III). Esta distribución electrónica presenta siete máximos (Fig. 4b) localizados en regiones vecinas a los protones. De estos, aquellos que rodean a los protones internos (ver Fig. 1) resultan ser $\sim 10^8$ veces más pronunciados que los menores de ellos. Así, olvidándonos por un momento de los protones externos del ión molecular H_4^{3+} , una comparación de la energía total y de las distancias de equilibrio entre los iones moleculares H_4^{3+} y H_2^+ , ambos para el estado excitado $1\pi_u$,

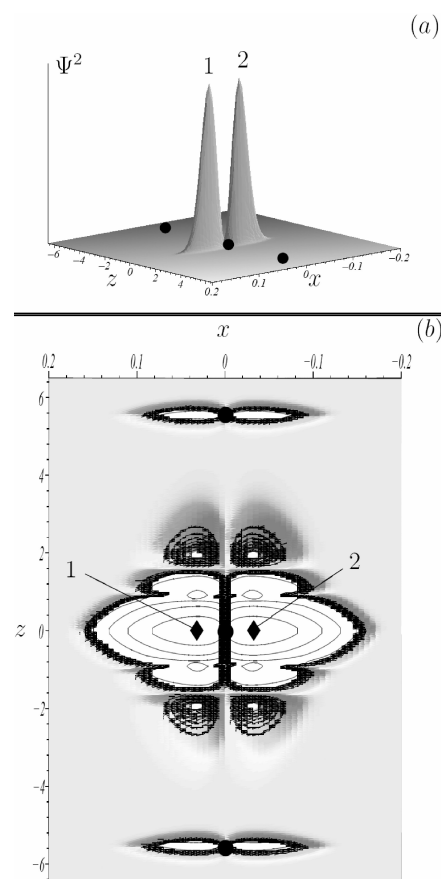


FIGURA 4. (a) Distribución electrónica del ión molecular H_4^{3+} para el estado excitado $1\pi_u$ en un campo magnético $B = 4.414 \times 10^{13}$ G, con un factor de conversión $B_0 = 2.35 \times 10^9$ G. Los puntos indican la posición de los protones (ver texto). (b) Una ampliación de 10^7 en la escala vertical permite la localización de otros seis pares de picos. Los dos más pronunciados se distinguen aquí con los números 1 y 2, y se indican con el símbolo \blacklozenge . Para una mejor visualización se presenta una vista perpendicular al plano (x, z) . La normalización no es fija.

muestra que ambas son muy similares (véase Tabla IV). Indicando con ello, aunque un análisis detallado es necesario, que $H_4^{3+} \rightarrow H_2^+ + 2p$ podría ser una posible vía de decaimiento del sistema molecular H_4^{3+} . Una simple comparación con la energía total de los sistemas moleculares H_4^{3+} y H_3^{2+} (Tabla IV), nos indica que $H_4^{3+} \rightarrow H_3^{2+} + p$ podría ser otra vía de decaimiento. De entre los sistemas H , H_2^+ , H_3^{2+} y H_4^{3+} , el primero de ellos, H , resulta ser el que tiene la mayor energía total en el rango de campos magnéticos $0 - 4.414 \times 10^{13}$ G, por lo que podemos descartar un decaimiento $H_4^{3+} \rightarrow H + 3p$.

7. Conclusiones

En este trabajo se realizó un estudio de los estados electrónicos $1\sigma_g$ y $1\pi_u$ del ión molecular H_4^{3+} en configuración lineal y paralela a las líneas del campo magnético B , el cual se consideró constante y homogéneo.

7.1. Estado Base $1\sigma_g$

Al considerar los once ansätze en la función de prueba [Ec. (11)] se obtuvo una mejora en la energía total variacional de $\sim 0.2\%$ en comparación con los cálculos realizados previamente (Turbiner-López) en donde solamente se consideraron los cuatro primeros ansätze de la Tabla I. Las distancias de equilibrio entre los protones resultaron prácticamente iguales confirmando que la simetría propia del sistema es aquella en la cual $R_1 = R_3$ y $R_2 = R_4$, esto es la configuración simétrica. Un punto muy importante es el hecho que el sistema H_4^{3+} puede existir ya para un campo magnético de intensidad $B = 3 \times 10^{13}$ G en configuración lineal y paralela a las líneas del campo magnético.

7.2. Estado Excitado $1\pi_u$

El análisis de los resultados nos dan una clara indicación de la posible existencia del estado excitado $1\pi_u$ del sistema H_4^{3+} en un campo magnético $B = 4.414 \times 10^{13}$. Este estado excitado presenta una peculiaridad respecto a sus distancias de equilibrio (véase Tabla III) en donde la distancia del origen a los protones externos (R_2) resulta ser aproximadamente 80 veces el valor de la distancia del origen a los protones internos (R_1). Asimismo el hecho de que la energía total de los

iones moleculares H_4^{3+} , H_3^{2+} y H_2^+ sean muy similares, indica que el ión molecular H_4^{3+} es muy inestable en el estado $1\pi_u$, ya que alguna pequeña perturbación pudiera ocasionar un decaimiento al estado base o en algún otro sistema. Así, no parece posible la existencia de otros estados excitados, al menos para este valor del campo magnético.

Como parte final es importante mencionar que al liberar al sistema de la condición de simetría, éste se mantiene prácticamente sin cambio alguno, confirmando que la configuración propia del sistema es la configuración simétrica, en la cual $R_1 = R_3$ y $R_2 = R_4$.

Agradecimientos

El autor agradece profundamente al Dr. A. Turbiner por sus asesorías, la introducción en el tema y por la constante revisión e interés durante las investigaciones que condujeron al desarrollo de mi tesis de licenciatura, de la cual, en este trabajo se compilan los principales resultados. Agradezco al Dr. J.C. López Vieyra por las muchas discusiones y la valiosa ayuda en la preparación del manuscrito. De igual manera quiero agradecer al Dr. N. Guevara L. por sus asesorías en el aspecto computacional y los comentarios hechos durante el desarrollo del trabajo. Agradezco el apoyo económico brindado por CONACyT mediante el proyecto No. 36650-E.

-
- i.* Este potencial corresponde al primer término de la función de prueba (4) con los parámetros “ α ” sin permutar.
 - ii.* La energía de amarre E_b es la energía necesaria para separar al sistema en sus diferentes constituyentes.
 - iii.* Aunque los primeros cálculos para este sistema se presentan en [6], la comparación se hace con resultados no publicados obtenidos por los mismos autores.
1. L. Landau, *Soviet Z. Sowjetunion* **1** (1991) 185.
 2. B.B. Kadomtsev y V. S. Kudryavtsev, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor Fiz. [Sov.Phys. JETP Lett.]*. **13** (1971) 15.
 3. M. Ruderman, *Phys. Rev. Lett.* **27** (1971) 1306; In IAU Symp. *Physics of Dense Matter*. **53** (1974) 117 (ed. by C.J. Hansen, Dordrecht).
 4. A.V. Turbiner y J.C. López-Vieyra, *Mod. Phys. Lett. A*. **19** (2004) 1919.
 5. A.V. Turbiner y J.C. López Vieyra, *Phys. Rep.* **424** (2006) 309.
 6. J.C. López-Vieyra y A.V. Turbiner, *Phys. Rev. A*. **62** (2000) 022510.
 7. H. Olivares Pilon, El Ion Molecular Exótico H_4^{3+} en un Campo Magnético Intenso, Tesis de Licenciatura, UNAM, México, 2005.
 8. A.V. Turbiner y J.C. López-Vieyra, *Phys. Rev. A* **69** (2004) 053413.
 9. A.V. Turbiner, J.C. López-Vieyra y N.L. Guevara, *Phys. Rev. A* **72** (2005) 023403.
 10. L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press Oxford - New York - Toronto - Sydney - Paris - Frankfurt 1977).