



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS



" Existencia del Ion Molecular  $H_3^{++}$  en campo Magnético Intenso "

T E S I S  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:  
F I S I C O  
P R E S E N T A :  
SOLIS HERNANDEZ ULISES

DIRECTOR: DR. ALEXANDER TURBINER ROSENBAUM



MEXICO,



2000

280443



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVENIDA DE  
MEXICO

**MAT. MARGARITA ELVIRA CHÁVEZ CANO**  
**Jefa de la División de Estudios Profesionales de la**  
**Facultad de Ciencias**  
**Presente**

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:  
"Existencia del Ion Molecular  $H_3^{++}$  en campo Magnético Intenso"

realizado por SOLIS HERNANDEZ ULISES

con número de cuenta 9355073-1 , pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio

Atentamente

Director de Tesis  
Propietario

DR. ALEXANDER TURBINER ROSENBAUM

*AT*

Propietario

DR. JUAN CARLOS LOPEZ VIEYRA

*Lopez Vieyra*

Propietario

DR. VICTOR MANUEL ROMERO ROCHIN

*[Signature]*

Suplente

DR. JULIO JAVIER MARTINELL BENITO

*[Signature]*

Suplente

DR. RENATO LEMUS RECILLAS

*Renato Lemus Recillas*

Consejo Departamental de Física



*[Signature]*

DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE DE CIENCIAS  
Coordinadora de Licenciatura DE FÍSICA

*A mis padres por su constante y tenaz apoyo.*

*A mis hermanos.*

# Agradecimientos

Agradezco al **Dr. Alexander Turbiner** la confianza para trabajar en la tesis y el tiempo dedicado a mi persona en enseñarme y aclararme las ideas y conceptos utilizados en este trabajo.

Al **Dr. Juan Carlos López Vieyra** por el apoyo brindado durante la elaboración de la tesis y en la realización de los programas.

Quedo también agradecido con los doctores **Víctor Romero Rochín**, **Renato Lemus Casillas** y **Julio Javier Martinell Benito**, al aceptar ser parte de mi jurado y revisar mi trabajo.

Los doctores **Carlos Bunge** y **Eugenio Ley Koo** dieron una lectura a mi tesis y les agradezco los comentarios y correcciones hecho al mismo.

# Índice General

|                                          |     |
|------------------------------------------|-----|
| Introducción                             | iii |
| 1 El Método Variacional                  | 1   |
| 2 El Ion Molecular $H_3^{++}$            | 5   |
| 3 Las Funciones de Prueba                | 8   |
| 3.1 Funciones Hidrogenoides              | 8   |
| 3.2 Orbitales de Landau                  | 9   |
| 3.3 Las Funciones de Prueba              | 10  |
| 4 Técnica Computacional                  | 13  |
| 4.1 Cálculo Numérico de Integrales       | 13  |
| 4.2 Técnicas del Programa                | 14  |
| 4.3 Rutinas Estándar Utilizadas          | 15  |
| 4.3.1 Subrutina DGAUSS                   | 16  |
| 4.3.2 Subprograma MINUIT                 | 16  |
| 4.4 Programa General                     | 17  |
| 4.4.1 Rutina Principal                   | 17  |
| 4.4.2 Archivo de Datos                   | 24  |
| 4.4.3 Archivo de Salida                  | 25  |
| 5 Resultados                             | 27  |
| 5.1 Resultados para cada Ansatz          | 27  |
| 5.1.1 Ansatz 1                           | 28  |
| 5.1.2 Ansatz 2                           | 28  |
| 5.1.3 Ansatz 3                           | 29  |
| 5.1.4 Ansatz 4 (Superposición no Lineal) | 30  |

|       |                                                         |           |
|-------|---------------------------------------------------------|-----------|
| 5.1.5 | Ansatz 123 (Combinación Lineal de los Ansatz 1, 2 y 3)  | 30        |
| 5.1.6 | Ansatz Total (Superposición Lineal de todos los Ansatz) | 31        |
| 5.1.7 | Comparación de los Datos                                | 32        |
| 5.1.8 | Comparación entre Sistemas de 1 Electrón                | 34        |
| 5.2   | Análisis Gráfico                                        | 34        |
| 5.2.1 | Posición del Electrón en el Sistema                     | 34        |
| 5.2.2 | Energía del Electrón                                    | 37        |
| 5.2.3 | Pozos de Potencial                                      | 40        |
| 5.2.4 | Tamaño del Sistema                                      | 45        |
|       | <b>Conclusión</b>                                       | <b>47</b> |
|       | <b>A Unidades</b>                                       | <b>49</b> |
|       | <b>B Métodos de Aproximación</b>                        | <b>51</b> |
|       | B.1 Aproximación de Integrales                          | 51        |
|       | B.2 Interpolación de Lagrange                           | 52        |
|       | B.3 Cuadratura Gaussiana                                | 52        |
|       | <b>C Tipos de Enlaces en Física Molecular</b>           | <b>53</b> |
|       | <b>Bibliografía</b>                                     | <b>55</b> |

# Introducción

Existe una gran variedad de efectos conocidos de campos magnéticos en distintas áreas de la física. Si el campo magnético es muy fuerte, puede magnetizar una pieza de metal e influir en la conductividad eléctrica de metales o semiconductores; también, un campo así, es indispensable si se quiere tener a un plasma confinado y térmicamente aislado. Nos referimos a un campo magnético intenso cuando sus efectos producen cambios notables en las propiedades de la materia, o sea, según sus efectos sobre el sistema en el que actúa y en sus parámetros característicos, como densidad, temperatura, conductividad eléctrica, etc.

Comparemos la energía de momento magnético

$$\mu B \equiv \frac{e\hbar B}{2m_e c}, \quad (1)$$

con la energía característica del sistema o partícula. Cuando la energía de momento magnético es más grande que la energía de ligadura de átomos o moléculas ( del orden de  $Ry \equiv m_e e^4 c / \hbar^3$ ), el campo magnético debe cumplir que

$$B > B_9 \equiv \frac{m_e^2 e^3 c}{\hbar^3} = 2.35 \times 10^9 \text{ Gauss}. \quad (2)$$

En estos campos, los átomos son fuertemente deformados y elongados a lo largo de las líneas de campo magnético; la energía de ligadura y la energía de ionización se incrementan y la interacción atómica también cambia.

Por otro lado, si la condición

$$\mu B > m_e c^2, \quad B > B_{13} \equiv \frac{m_e^2 c^3}{e\hbar} = 4.4 \times 10^{13} \text{ Gauss}, \quad (3)$$



se satisface para un campo magnético tal que el radio de la órbita del electrón en el nivel más bajo de Landau  $\rho_0 = (\hbar c/eB)^{1/2}$ , es menor que la longitud de onda de Compton del electrón, los efectos relativistas llegan a ser importantes.

A lo largo de todo este texto vamos a considerar campos magnéticos intensos que no tengan efectos relativistas, es decir, cuando  $B_9 \leq B \leq B_{13}$ . Notemos además que  $B_{13} = \alpha^{-2} B_9$  donde  $\alpha = e^2/\hbar c$  es la llamada constante de estructura fina.

Cuando hay un campo magnético intenso, sobre los electrones de un átomo actúa una fuerza magnética más fuerte que la fuerza coulombiana. En la dirección perpendicular al campo, los electrones están confinados a moverse sobre orbitales de Landau cilíndricos alrededor del sistema.

El radio de los orbitales está dado por

$$\rho_m = (2m + 1)^{1/2} \rho_0, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (4)$$

donde  $\rho_0$  es el radio ciclotrónico

$$\rho_0 = \left( \frac{\hbar c}{eB} \right)^{1/2} = 2.57 \times 10^{-10} B_{12}^{1/2} \text{ cm}, \quad (5)$$

y  $B_{12}$  es un campo magnético en unidades de  $10^{12} \text{ Gauss}$ . Debido a este confinamiento, la fuerza de Coulomb es más efectiva en la dirección paralela al campo y por tanto aumenta la energía de ligadura de los electrones. De esta manera, es posible que se formen cadenas moleculares de estos átomos a lo largo de la dirección del campo.

En un campo eléctrico de intensidad grande, la distancia entre los niveles de Landau  $\hbar\omega_c$  es mucho más grande que la energía de interacción coulombiana, es decir,

$$\frac{e^2}{a_0} \ll \hbar\omega_c, \quad (6)$$

donde  $a_0 \equiv \hbar/m_e e^2$ , es el radio de Bohr. Esta condición implica que el electrón está en el nivel más bajo de Landau mientras que el átomo se deforma en una estructura tubular de radio  $\rho_0 = (\hbar c/eB)^{1/2} \ll a_0$  y longitud  $L_0 < a_0$ , paralela a las líneas de campo magnético.

Se sabe que en la superficie de las estrellas de neutrones existen campos magnéticos mayores a  $10^9 \text{ Gauss}$ , estos campos se forman durante su evolución. De acuerdo a la teoría de formación estelar, una estrella de neutrones

es el producto de una estrella típica ( en la etapa final de su vida), con masa cercana al límite de Chandrasekhar de  $1.5M_{\odot} \leq M \leq 3M_{\odot}$ , la cual ha agotado su energía termonuclear y se ha colapsado por atracción gravitacional.

Los pulsares (estrellas de neutrones que están rotando) tienen generalmente una velocidad propia grande, de unos 450 km por segundo en promedio, lo que es más de diez veces la velocidad de una estrella normal. Se considera que esta alta velocidad proviene de su nacimiento en las explosiones de supernovas durante la cual reciben un empujón fuerte. Los periodos de rotación observados van desde 1.6 milisegundos para el pulsar más rápido, hasta varios segundos. Estos objetos están constantemente perdiendo energía, convirtiendo su energía cinética de rotación en radiación y/o un viento de partículas. La observación sistemática de los radio-pulsares mostró que en efecto, su velocidad de rotación disminuye con la edad. Este frenaje se atribuye a la presencia de un campo magnético enorme, del orden de  $10^8$  a  $10^{13}$  gauss (por comparación, el campo magnético terrestre es del orden de un gauss y el campo magnético más fuerte producido en laboratorio es del orden de  $10^6$  gauss). Una estrella de neutrones puede ser un pulsar solamente si su velocidad de rotación es suficientemente alta: debido al frenaje observado, todo pulsar se apagará algún día y las estrellas de neutrones jóvenes solamente pueden ser radio-pulsares durante unas decenas de millones de años.

Recientemente se han descubierto nuevos objetos celestes llamados magnetares, su origen proviene como los pulsares, de una supernova; pero en este caso el campo magnético en su superficie es superior, resulta del orden de  $10^{15}$  Gauss.

En la década de los setenta B. B. Kadomtsev y V.S. Kudryatsev [1], y por otro lado también M. Ruderman [2], predijeron que ciertas moléculas lineales sólo podían existir en presencia de campos magnéticos muy fuertes.

Un ejemplo del comportamiento de la estructura de la materia en campo magnético es el ion  $H_2^+$ . Para el estado base de este ion, la *energía de disociación* (energía necesaria para separar una molécula en sus átomos constituyentes) se incrementa; simultáneamente, la distancia internuclear de equilibrio, disminuye conforme aumenta el campo magnético. Además, se ha mostrado que ciertos estados excitados no ligados en la ausencia de campo magnético, adquieren un pozo de potencial bien pronunciado en un campo magnético lo suficientemente fuerte. Más aún, la energía depende no sólo de la distancia internuclear, sino también del ángulo entre el campo magnético y el eje de la molécula.

Debido al principio de incertidumbre de Heisenberg, se tiene una indefi-

nición en la posición de los centros de una molécula o un átomo (no obstante que al principio se hayan considerado a los centros como fijos) y por tanto en su energía electrónica. Por definición, se le llama *energía vibracional* del sistema molecular o del átomo, a la variación de la energía de ligadura que se da si tomamos en cuenta la incertidumbre en las posiciones de los centros.

Se han hecho cálculos para determinar la estructura de átomos en cadenas unidimensionales en un campo magnético intenso. Estos son aproximaciones y emplean varios métodos, como por ejemplo el método variacional, el modelo estadístico de Thomas-Fermi, cálculos de Hartree-Fock y cálculos de densidad funcional.

Hay muchas investigaciones teóricas acerca de las propiedades de sistemas atómicos y moleculares en campos magnéticos intensos. Muchos de estos trabajos tratan con el átomo de hidrógeno, sin embargo, para sistemas moleculares, el ion molecular  $H_2^+$ , es el que ha sido abordado con cierto detalle.

En la presente tesis, se estudia en particular el caso del ion molecular  $H_3^{++}$ , en un campo magnético intenso. Para su estudio se toman un electrón y tres centros alineados de carga  $Z = 1$  además de un campo magnético paralelo al eje de los centros. Se calcula una cota superior para la energía del estado base del ion  $H_3^{++}$  para campos magnéticos constantes de distinta magnitud, usando el método variacional. Los cálculos se hicieron empleando una computadora que ejecuta un programa para minimizar energías escrito en el lenguaje de programación FORTRAN.

Se encuentra que para campos magnéticos mayores a  $10^{11}$  Gauss el sistema de tres protones y un electrón tiene un estado ligado, lo que significa que el ion  $H_3^{++}$  puede existir. Para campos magnéticos menores la energía de vibración de los núcleos puede rebasar el pozo de potencial y el ion escapar de un estado ligado, en consecuencia este pozo no puede encontrarse. Además, notamos que la energía del ion  $H_3^{++}$  es menor que la del átomo de hidrógeno pero mayor que la del ion  $H_2^+$ , esto indica una disociación del primer ion al segundo.

# Capítulo 1

## El Método Variacional

La solución exacta de la ecuación de Schrödinger se puede encontrar tan sólo en un número relativamente pequeño de sistemas. La mayor parte de los problemas de la mecánica cuántica conducen a ecuaciones demasiado complicadas que no se pueden resolver de manera exacta.

En la práctica, casi ningún sistema físico puede ser estudiado sin aproximación; el trabajo del físico consiste precisamente en hacerse una idea exacta de la importancia relativa de los distintos efectos y en adoptar en cada caso los métodos de aproximación más convenientes.

En este capítulo se aborda el método variacional [3], cuya característica es que para utilizarlo, se necesita conocer intuitivamente el espectro general de las soluciones propias buscadas.

Primero desarrollamos el problema aplicando un principio variacional, el cual nos dice que para un sistema cuántico caracterizado por el Hamiltoniano  $H$ , el cual está definido en el dominio  $\mathcal{V}$ , la funcional

$$\int_{\mathcal{V}} \psi^*(H - E)\psi d\mathbf{r}, \quad (1.1)$$

tiene un mínimo, en donde  $E$  es la energía del sistema y  $\psi$  es la eigenfunción correspondiente. Se tiene entonces que

$$\delta \int_{\mathcal{V}} \psi^*(H - E)\psi d\mathbf{r} = 0, \quad (1.2)$$

como una condición de extremo de la ecuación (1.1). Variando  $\psi^*$  se tiene

$$\int_V \delta\psi^*(H - E)\psi d\mathbf{r} = 0, \quad (1.3)$$

y como  $\delta\psi^*$  es arbitraria, se sigue la ecuación de Schrödinger

$$H\psi = E\psi. \quad (1.4)$$

Si variamos  $\psi$  obtenemos la ecuación conjugada compleja

$$H\psi^* = E\psi^*, \quad (1.5)$$

donde se ha tomado en cuenta que  $H$  es hermitico.

El principio variacional impone una condición de extremo; es decir, es posible presentar la energía como un multiplicador de Lagrange en el problema de extremo condicionado

$$\delta \int_V \psi^* H \psi d\mathbf{r} = 0, \quad (1.6)$$

con la condición de que

$$\int_V \psi^* \psi d\mathbf{r} = 1. \quad (1.7)$$

El valor mínimo de (1.6) es el valor propio de  $H$  para el estado base  $E_0$ . La función de onda  $\psi$  que conduce a este mínimo, es la función propia  $\psi_0$  del estado base.

Las energías para los estados excitados se obtienen admitiendo como funciones propias  $\psi_n$  ( $n > 0$ ), a aquéllas que no sólo satisfacen (1.7), sino que también deben ser ortogonales a las funciones de onda  $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_{n-1}$  de los primeros  $n$  estados.

El método variacional para calcular el estado base de energía de un sistema, se reduce a considerar una función de prueba  $\psi_p$  normalizable y calcular

$$E_{var} = \frac{\int_V \psi_p^* H \psi_p d\mathbf{r}}{\int_V \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}}, \quad (1.8)$$

donde  $E_{var}$  es la energía variacional que cumple con la desigualdad

$$E_0 \leq E_{var}; \quad (1.9)$$

es decir, el cálculo de (1.8) nos da una aproximación a la energía del estado base.

Lo anterior se prueba fácilmente expandiendo nuestra función de prueba como una combinación lineal de la base completa de funciones propias  $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_n$ ; con valores propios  $E_0, E_1, \dots, E_n$ ; respectivamente, esto es

$$\psi_p = \sum_0^{\infty} a_n \psi_n, \quad y \quad \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 = 1. \quad (1.10)$$

De lo anterior se tiene que

$$\int_V \psi_p^* H \psi_p d\mathbf{r} = \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 \geq E_0 \quad (1.11)$$

lo que prueba la relación (1.9).

Así, lo que queda es encontrar un mínimo para la energía variacional. Si la función de prueba escogida depende de varios parámetros  $\alpha, \beta, \dots$ , también la energía variacional dependerá de estos parámetros, y entonces habrá que minimizarla con respecto de ellos.

A este método se le conoce como *método variacional directo* o *método de Ritz*.

La elección de la función de prueba se basa en un análisis cualitativo del sistema, tomando en cuenta la simetría del problema. Cuando la función de prueba escogida ha sido la apropiada, se tiene una buena aproximación a la energía  $E_0$ .

Si reescribimos el Hamiltoniano de un sistema de la forma

$$H = -\Delta + V, \quad (1.12)$$

para los estados de energía del sistema con  $V$  el potencial, también podemos escribir un Hamiltoniano para la función de prueba de la forma

$$H_p = -\Delta + V_p, \quad (1.13)$$

tomando a  $V_p$  como un potencial donde la ecuación es exacta, cumpliendo que

$$H_p \psi_p = (-\Delta + V_p) \psi_p = E_p \psi_p. \quad (1.14)$$

Las ecuaciones (1.12) y (1.14) sustituidas en la ecuación (1.8), conducen a la siguiente relación

$$E_{var} = E_p + \frac{\int \psi_p^* (V - V_p) \psi_p d\mathbf{r}}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}}, \quad (1.15)$$

que es en la que nos basamos para hacer los cálculos.

También de las ecuaciones (1.12) y (1.14) se obtiene que

$$(V_p - E_p)\psi_p = \Delta\psi_p \quad (1.16)$$

lo que sustituido en (1.15) resulta en

$$E_{var} = \frac{\int_V \psi_p^* \left[ V - \frac{\Delta\psi_p}{\psi_p} \right] \psi_p d\mathbf{r}}{\int_V \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}} \quad (1.17)$$

En una forma más general, si la función de prueba es de la forma

$$\psi_p = \sum_{i=1}^n A_i \psi_i = \sum_{i=1}^n A_i e^{-\phi_i}, \quad (1.18)$$

en donde las  $A_i$  son parámetros variacionales que no dependen de las coordenadas y cada  $\phi_i$  es una función de más parámetros variacionales, la ecuación (1.17) se puede reescribir en la forma

$$E_{var} = \frac{\int_V \psi_p^* (V\psi_p - \sum_{i=1}^n A_i V_i \psi_i) d\mathbf{r}}{\int_V \psi_p^* \psi_p d\mathbf{r}}, \quad (1.19)$$

donde se define

$$V_i \equiv \frac{\Delta\psi_i}{\psi_i}. \quad (1.20)$$

Para cada Ansatz (una conjetura de la función de prueba) que escojamos de un sistema, tenemos que calcular este potencial  $V_i$ , y sustituirlo en la ecuación (1.19).

## Capítulo 2

### El Ion Molecular $H_3^{++}$

Comenzamos describiendo el sistema que vamos a estudiar. Este es el ion molecular  $H_3^{++}$  en un campo magnético intenso.

Consideramos tres centros alineados de carga  $Z = 1$  separados por las distancias  $R_-$  y  $R_+$ , los cuales numeramos 1, 2 y 3 respectivamente; también se toma un electrón a una distancia  $r_1, r_2$  y  $r_3$  de los centros. Por último, a este sistema le aplicamos un campo magnético  $B$  constante en la misma dirección del eje de los tres centros.

Para obtener el hamiltoniano de este sistema hacemos antes unas hipótesis sobre las partículas que lo conforman. La primera es que consideramos la *aproximación de Born-Oppenheimer*, es decir, tomamos a los centros como fijos o bien con masa infinita. Tenemos que del sistema, la única partícula que puede moverse es el electrón, considerando el caso en que su momento angular  $m_l = 0$ .

En consecuencia, si elegimos nuestro centro de coordenadas en la posición del centro 2 y el eje  $z$  a lo largo del eje de los tres centros, las coordenadas son  $(0, 0, -R_-)$ ,  $(0, 0, 0)$  y  $(0, 0, R_+)$  para los centros 1, 2 y 3, respectivamente. Para el electrón su distancia a los centros está dada por

$$\begin{aligned} r_1 &= [\rho^2 + (z + R_-)^2]^{1/2} \\ r_2 &= (\rho^2 + z^2)^{1/2} \\ r_3 &= [\rho^2 + (z - R_+)^2]^{1/2}, \end{aligned}$$



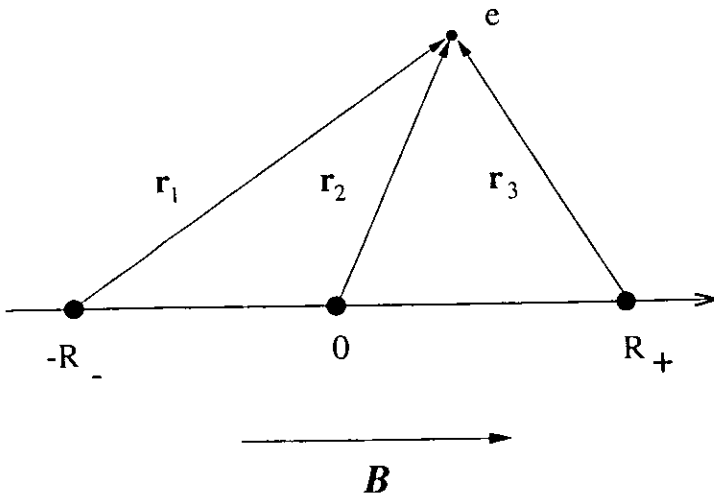


Figura 2.1:  $H_3^{++}$  en un campo magnético  $B$ .

(2.1)

con  $\rho^2 = x^2 + y^2$  y para el campo magnético las coordenadas son  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ ; así, se tiene al campo y a los tres centros alineados.

Ahora podemos obtener el hamiltoniano para el ion  $H_3^{++}$ . Un sistema con una partícula y con campo electromagnético tiene un hamiltoniano de la forma

$$\hat{H} = \frac{(\mathbf{P} - q\mathbf{A}/c)^2}{2m} + V(x, y, z), \quad (2.2)$$

donde  $\mathbf{P}$  es el impulso generalizado de la partícula,  $q$  es su carga,  $\mathbf{A}$  es el potencial vectorial del campo magnético en el punto donde se encuentra ésta y  $V(x, y, z)$  es la energía potencial de interacción de las partículas.

Si la partícula tiene espín, debemos introducir un término complementario  $-\hat{\mu} \cdot \mathbf{B}$ , que corresponde a la energía de momento magnético  $\hat{\mu}$  en el campo magnético,  $\hat{\mu}$  está dado por  $\hat{\mu} = \mu\hat{s}/s$ , con  $\hat{s}$  el operador de espín, y  $\mu$  es una constante tal que es la máxima proyección del momento magnético.

De esta manera, el hamiltoniano para la interacción de un electrón con

un campo magnético externo es

$$\hat{H} = \frac{(\mathbf{P} + e\mathbf{A}/c)^2}{2m} - \frac{\mu}{s} \hat{s} \cdot \mathbf{B} + V(x, y, z), \quad (2.3)$$

o también

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{1}{2mc}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}) + \frac{e^2 A^2}{2mc^2} - \frac{\mu}{s} \hat{s} \cdot \mathbf{B} + V(x, y, z). \quad (2.4)$$

Si elegimos la norma  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0)$  y como además  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ,  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  y  $\mathbf{A} = \frac{\mathbf{B}}{2} \times \mathbf{r}$ , tomando en cuenta que  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  conmutan, el hamiltoniano queda de la siguiente manera

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{P}}{2mc} + \frac{e^2 A^2}{2mc^2} - \frac{\mu}{s} \hat{s} \cdot \mathbf{B} + V(x, y, z). \quad (2.5)$$

Pero como  $l = \mathbf{r} \times \mathbf{P}$  y el campo está en dirección del eje  $z$ , la última expresión toma la forma

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{Bl_z}{2mc} + \frac{e^2 B^2(x^2 + y^2)}{8mc^2} - \frac{\mu}{s} \hat{s}_z B + V(x, y, z). \quad (2.6)$$

Por último, tomando el momento angular igual a cero y si despreciamos el acoplamiento espín-órbita, la expresión final para el hamiltoniano en unidades atómicas es

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2} + \frac{B^2(x^2 + y^2)}{8} + V(x, y, z) \quad (2.7)$$

, considerando además que el magneton de Bohr  $\mu_0 = |e|/2mc = 1/2$  en estas unidades.

Para que nuestro Hamiltoniano quede con la forma  $\hat{H} = -\Delta + V(x, y, z)$  debemos multiplicar por 2 al hamiltoniano y redefinir al potencial, de esta manera se tiene

$$\hat{H} = -\Delta + \frac{B^2 \rho^2}{4} + V(x, y, z). \quad (2.8)$$

El potencial para nuestro sistema es entonces

$$V = -2 \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r_3} \right) + \frac{2}{R_-} + \frac{2}{R_+} + \frac{2}{R_- + R_+}; \quad (2.9)$$

el primer término es la interacción coulombiana entre el electrón y los centros, el segundo es la repulsión entre los protones.

## Capítulo 3

# Las Funciones de Prueba

### 3.1 Funciones Hidrogenoides

En el método variacional es necesario tener una idea de las funciones de estado que describen a un sistema. Para el ion molecular  $H_3^{++}$  vamos a utilizar dos tipos de funciones que en principio son suficientes para describirlo. En este capítulo utilizaremos estos dos tipos de funciones y en particular en esta sección recordaremos a las funciones hidrogenoides.

La ecuación de Schrödinger no relativista para un átomo hidrogenoide de carga nuclear  $Z$  en unidades atómicas es

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r}\right)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (3.1)$$

La solución de esta ecuación en coordenadas esféricas se encuentra separando variables

$$\Psi(\mathbf{r}) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi), \quad l = 0, 1, \dots, n, \quad (3.2)$$

donde  $n = 1, 2, \dots$ , es el número cuántico principal,  $l$  es el momento angular y  $m$ , el número cuántico magnético, es la proyección de  $l$  sobre un eje seleccionado arbitrariamente, normalmente el eje  $z$ ,  $m$  toma los valores  $l, l-1, \dots, -l$ ; las funciones  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  son los armónicos esféricos y  $R_l(r)$  es una solución de la ecuación radial

$$\left\{ -\frac{1}{2} \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] - \frac{Z}{r} \right\} R_l(r) = E R_l(r), \quad (3.3)$$

cuyas soluciones son

$$R_{n,l}(r) = \frac{2Z}{a_0^2 n^2} \left( \frac{Z(n-l-1)!}{(n+l)!} \right)^{1/2} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right)^l e^{-Zr/na_0} L_{n-l-1}^{2l+1}(2Zr/na_0), \quad (3.4)$$

siendo  $L_{n-l-1}^{2l+1}(2Zr/na_0)$  los polinomios de Laguerre, según la convención usada en Landau y Lifschitz [3].

Las energías de los niveles están dadas por

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{a_0 n^2} \quad (3.5)$$

donde

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{\mu Ze^2}$$

es el radio de Bohr,

y  $\mu = (m_e + m_p)/m_e m_p$  es la masa reducida, con  $m_e$  y  $m_p$  las masas del electrón y del protón respectivamente.

## 3.2 Orbitales de Landau

El segundo tipo de funciones que necesitamos son las soluciones de un electrón libre en un campo magnético constante. Este caso también describe a un átomo en el límite de un campo magnético intenso tal que la interacción de Coulomb es despreciable.

Si escogemos la norma simétrica o circular  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0)$ , entonces  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ . Con estas consideraciones el hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{Bl_z}{2mc} + \frac{e^2 B^2 (x^2 + y^2)}{8mc^2}. \quad (3.6)$$

En coordenadas cilíndricas la ecuación que debe cumplir  $\Psi(\mathbf{r})$  es

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{Bl_z}{2mc} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{2mc^2} \right) \Psi(\mathbf{r}) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}), \quad (3.7)$$

usando el método de separación de variables encontramos como solución

$$\Psi(\mathbf{r}) = u(\rho) e^{im\phi} e^{ikz}, \quad (3.8)$$

donde  $u(\rho)$  cumple la ecuación

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{du}{dx} - \frac{m^2}{x^2}u + \lambda u = 0, \quad (3.9)$$

con el cambio de variable  $x = \sqrt{\frac{eB}{2\hbar c}}\rho$  y  $\lambda = \frac{4m c}{eB\hbar} \left( E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) - 2m$ .  
La solución más general es entonces

$$\Psi(\mathbf{r}) = x^{|m|} e^{-x^2/2} L_n^{|m|}(x^2) e^{im\phi} e^{ikz}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (3.10)$$

y los estados de energía son  $E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{eB\hbar}{2mc} (2n + 1 + |m| + m)$ .

### 3.3 Las Funciones de Prueba

Ahora bien, para aplicar el método variacional hay que escoger las funciones de prueba.

El requisito básico para elegir la función de prueba  $\Psi_t(x)$  es que contenga las simetrías del problema ([7, 8]). Además, si se estudia el estado base, la función no debe desaparecer en el dominio en la que está definida. El potencial  $V_p(x) = \frac{\nabla^2 \Psi_p}{\Psi_p}$ , debe reproducir las singularidades del potencial original así como su comportamiento asintótico a distancias grandes.

Primero consideramos al más simple de los Ansatz que satisfacen los requisitos antes mencionados

$$\Psi_1 = e^{-\alpha_1 Z(r_1+r_2+r_3) - \beta_1 B \rho^2/4}, \quad (3.11)$$

en donde como antes,  $r_1, r_2$  y  $r_3$  son las distancias del electrón a los centros 1, 2 y 3 respectivamente, también  $\rho^2 = x^2 + y^2$  y  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  son parámetros variacionales. Esta es la función de prueba más simple, resulta ser el producto de 3 funciones hidrogenoides (funciones de Heitler-London) por el orbital de Landau más bajo. Esta función de prueba da una buena descripción del sistema cercano a la posición de equilibrio. Esta función tiene en total cuatro parámetros variacionales si incluimos las distancias  $R_-$  y  $R_+$  entre los núcleos.

El potencial  $V_1$  que le corresponde está dado por

$$V_1 = 3Z^2\alpha_1^2 - B\beta_1 - 2Z\alpha_1 \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r_3} \right) + \frac{\beta_1^2 B^2 \rho^2}{4} +$$

$$2Z^2\alpha_1^2 \left[ \frac{1}{r_1 r_2} (\rho^2 + z(z + R_+)) + \frac{1}{r_2 r_3} (\rho^2 + z(z - R_-)) + \frac{1}{r_1 r_3} (\rho^2 + (z - R_-)(z + R_+)) \right]. \quad (3.12)$$

El segundo Ansatz que escogemos es el siguiente

$$\Psi_2 = (e^{-\alpha_2 Z r_1} + e^{-\alpha_2 Z r_2} + e^{-\alpha_2 Z r_3}) e^{-\beta_2 B \rho^2 / 4}, \quad (3.13)$$

siendo el producto de un orbital de Landau por la suma de tres funciones hidrogenoides (función de Hund-Mulliken o bien, Combinación Lineal de Orbitales Atómicos "LCAO"), con  $\alpha_2$  y  $\beta_2$  también parámetros variacionales. Aquí se ha considerado el hecho de que el electrón está más cerca de uno de los protones. Tenemos entonces que a grandes distancias internucleares,  $\psi_2$  da una buena descripción para el decaimiento  $H_3^{++} \rightarrow H + p + p$ .

En esta expresión a cada función  $\psi_i \equiv e^{\phi_i} = e^{-\alpha r_i - \beta B \rho^2 / 4}$ , con  $i = 1, 2, 3$ ; corresponde un potencial de la forma

$$V_i \equiv \frac{\Delta \psi_i}{e^{\phi_i}} = \left[ \alpha^2 + \left( \frac{\alpha \beta B}{2r_i} + \frac{\beta^2 B^2}{4} \right) \rho^2 - \beta B - \frac{2\alpha}{r_i} \right]. \quad (3.14)$$

Un tercer Ansatz que se utilizó y que describe el modo de decaimiento  $H_3^{++} \rightarrow H_2^+ + p$  fue

$$\Psi_3 = (e^{-\alpha_3 Z(r_1+r_2)} + e^{-\alpha_3 Z(r_1+r_3)} + e^{-\alpha_3 Z(r_2+r_3)}) e^{-\beta_3 B \rho^2 / 4}, \quad (3.15)$$

en el cual también  $\alpha_3$  y  $\beta_3$  son parámetros variacionales.

De la misma forma que para el Ansatz anterior, a todas las funciones  $e^{\phi_{ij}} \equiv e^{-\alpha(r_i+r_j) - \beta B \rho^2 / 4}$ ,  $i \neq j$  y  $i, j = 1, 2, 3$ , les corresponde un potencial

$$V_{ij} = 2\alpha^2 + 2\alpha^2 \left( \frac{\rho^2 + (z + R)z}{r_i r_j} \right) + \alpha \beta \rho^2 \left( \frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} \right) + \frac{\beta^2 B^2 \rho^2}{4} - 2\alpha \left( \frac{1}{r_i} + \frac{1}{r_j} \right) + \beta B. \quad (3.16)$$

Esta función puede dar la mayor contribución a distancias internucleares muy grandes.

Para tomar en cuenta las distancias en equilibrio y las distancias grandes, se usa una interpolación de las ecuaciones (3.11), (3.13) y (3.15). De esta

manera tenemos una cuarta función de prueba que es una superposición no lineal

$$\begin{aligned} \Psi_4 = & \left( e^{-\alpha_4 Z r_1 - \alpha_5 Z r_2 - \alpha_6 Z r_3} + e^{-\alpha_6 Z r_1 - \alpha_4 Z r_2 - \alpha_5 Z r_3} \right. \\ & + e^{-\alpha_4 Z r_1 - \alpha_6 Z r_2 - \alpha_5 Z r_3} + e^{-\alpha_6 Z r_1 - \alpha_4 Z r_2 - \alpha_5 Z r_3} \\ & \left. + e^{-\alpha_5 Z r_1 - \alpha_6 Z r_2 - \alpha_4 Z r_3} + e^{-\alpha_6 Z r_1 - \alpha_5 Z r_2 - \alpha_4 Z r_3} \right) e^{-\beta_4 B \rho^2 / 4}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

en donde  $\alpha_{4,5,6}$ ,  $\beta_4$ , son parámetros variacionales. Esta función es una modificación de la ecuación de Guillemin-Zener usada para describir al ion molecular  $H_2^+$ . Podemos observar que si  $\alpha_4 = \alpha_5 = \alpha_6 \equiv \alpha_1$ , la función (3.17) se reduce a la función (3.11). Cuando  $\alpha_4 \equiv \alpha_2$ ,  $\alpha_5 = \alpha_6 = 0$ , la interpolación coincide con (3.13). También si  $\alpha_4 = \alpha_5 \equiv \alpha_3$ ,  $\alpha_6 = 0$ , la función (3.17) se reduce a la función (3.15). En total se tienen seis parámetros variacionales.

Si igualamos dos de los parámetros  $\alpha$  encontramos una "superposición lineal parcial"

$$\Psi_{slp} = \left( e^{-\alpha_4 Z(r_1+r_2) - \alpha_6 Z r_3} + e^{-\alpha_4 Z(r_1+r_3) - \alpha_6 Z r_2} + e^{-\alpha_4 Z(r_2+r_3) - \alpha_6 Z r_1} \right) e^{-\beta_4 B \rho^2 / 4}. \quad (3.18)$$

Una quinta función de prueba empleada es una combinación lineal de los tres primeros Ansatz

$$\Psi_{123} = A_1 \Psi_1 + A_2 \Psi_2 + A_3 \Psi_3. \quad (3.19)$$

Y por último consideramos un sexto Ansatz como una combinación lineal de  $\psi_{123}$  y  $\psi_4$

$$\Psi_t = \Psi_{123} + A_4 \Psi_4. \quad (3.20)$$

Este Ansatz es en el que nos basamos en nuestras conclusiones acerca de la existencia del ion  $H_3^{++}$  en un campo magnético intenso, por ser el que involucra todas las contribuciones de todas las funciones de prueba consideradas anteriormente. Como se verá más adelante, los resultados obtenidos por los cálculos de la energía fueron los más pequeños para esta función.

# Capítulo 4

## Técnica Computacional

### 4.1 Cálculo Numérico de Integrales

Ya hemos mostrado que el cálculo de la energía variacional para el ion  $H_3^{++}$  se reduce a calcular la integral

$$E_{\text{var}} = \frac{\int \psi_p^* (-\Delta + V) \psi_p \, d\mathbf{r}}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^* \psi_p \, d\mathbf{r}}, \quad (4.1)$$

del capítulo Uno. Este tipo de integrales es imposible de resolver analíticamente, por tanto, se tienen que utilizar métodos numéricos para calcularlas.

En el presente trabajo se utilizó un programa para computadora que hiciera el cálculo de la integral utilizando ciertas subrutinas que se valen del método de Cuadratura Gaussiana para aproximar integrales. Así, lo que se tiene no es un valor exacto de la integral definida, sino una aproximación para su valor con una precisión relativa estimada de  $10^{-6}$ .

La integral a resolver es una de tres dimensiones que se debe calcular en todo el espacio, esto plantea el primer problema para elaborar el programa. Tenemos que no es posible indicarle a la computadora que haga una integración de  $-\infty$  a  $+\infty$ . Una opción es hacer cambios de variable de manera que los límites de integración queden finitos, pero haciendo esto se pierde precisión.

Lo que se hizo entonces es cortar los intervalos en un límite finito, esto se puede hacer pues las funciones que integramos decaen exponencialmente; la dificultad ahora es como elegir estos límites.

El problema se complica todavía más cuando nos damos cuenta que la



función a integrar depende de varios parámetros variacionales para los cuales el valor aproximado de la integral se tiene que minimizar, lo cual implica utilizar otro programa que haga este trabajo.

En principio el programa trabaja de la siguiente manera:

- Recoge los valores de inicialización de los parámetros variacionales mediante un archivo de datos redireccionado al programa ejecutable. En este archivo también se incluyen los límites de las regiones para las cuales se hará la integración. La elección de estos intervalos depende de la precisión que se quiera, esto último se explicará con detalle más adelante.
- Calcula la integral usando un subprograma llamado DGAUSS que es parte de la biblioteca de funciones matemáticas MATHLIB del CERN.
- Mediante una función FCN del programa calcula la energía variacional.
- Usa la subrutina MINUIT también de la biblioteca del CERN para minimizar la energía con respecto a los parámetros variacionales, esta subrutina llama a la función FCN.
- Calcula la precisión relativa valiéndose de los límites de integración de los intervalos utilizados para el cálculo de la integral.

## 4.2 Técnicas del Programa

Usamos coordenadas cilíndricas  $(\theta, \phi, z)$ , lo que hace que las integrales de tres dimensiones se reduzcan a integrales de dos dimensiones (Por la simetría azimutal del problema). En estas coordenadas,  $\rho$  va de 0 a  $\infty$  y  $z$  va de  $-\infty$  a  $+\infty$ .

Como ya se había dicho, se utilizan límites finitos para hacer el cálculo de la integral. Con esta idea lo que se hace es dividir la región de integración en cuatro partes (ver figura 4.1). Una parte es la región básica y comprende los límites finitos para ambas variables  $z$  y  $\rho$ , para la primera variable los límites serán denotados como  $Upz$  y  $Loz$ , para la segunda variable serán 0 y  $Uprho$ . Los límites en  $z$  están dados en unidades de  $R_+$  y  $R_-$  para  $+z$  y  $-z$  respectivamente. Las otras tres regiones estarán relacionadas con la precisión que queremos; una región  $Deltaz2$  para las correcciones que va en la coordenada  $z$  de  $Upz$  a  $2Upz$  y en la coordenada  $\rho$  va como en la

región básica. Otra región *Delta z1* que va en  $z$  de  $Loz$  a  $2Loz$  y  $\rho$  igual como en la región básica. En la tercera región *Deltarho*,  $z$  va como en la región básica pero ahora  $\rho$  va de  $Uprho$  a  $2Uprho$ . Con esto uno encuentra valores para  $Upz$ ,  $Loz$  y  $Uprho$  tal que la razón entre la energía calculada en cualquiera de las regiones *Delta z1*, *Delta z2*, *Deltarho* y la energía calculada en la región básica sea del orden de  $10^{-6}$ , que es la precisión que queremos tener usualmente. De esta forma se resuelve el problema de los límites dando valores finitos que dependen de la precisión deseada. Todavía más, la región básica se subdivide en varias regiones para tomar en cuenta que las regiones que rodeen a los protones contribuyen más al cálculo de la energía, así se tienen mas regiones dadas por la coordenada  $z$  alrededor 0,  $R_-$  y  $R_+$  que son las posiciones de los centros a lo largo del eje  $z$ . En el programa que se usó para calcular los puntos del pozo de potencial se llegó a dividir la región básica hasta en diez regiones para mantener las contribuciones de cada uno de los centros.

Cabe aclarar que como en la formula (4.1) las funciones a integrar en el numerador y en el denominador son diferentes, los límites de integración serán distintos aunque las regiones sean las mismas.

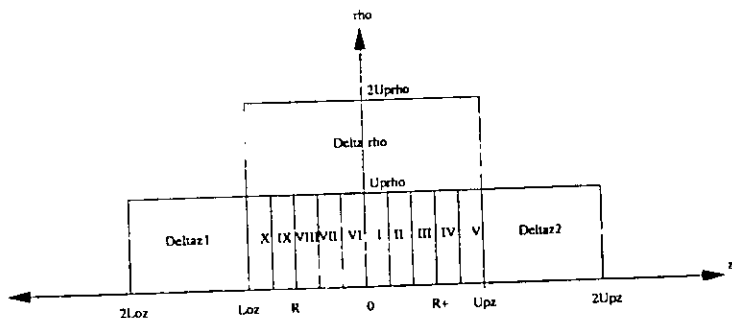


Figura 4.1: (a) Diagrama de las regiones de integración

### 4.3 Rutinas Estándar Utilizadas

Ahora daré una breve descripción de los dos subprogramas que se utilizaron para el programa. Ambos, forman parte de la biblioteca de rutinas ma-

temáticas del CERN.

### 4.3.1 Subrutina DGAUSS

DGAUSS calcula con una aproximación especificada el valor de la integral

$$\int_A^B f(x)dx. \quad (4.2)$$

Así, este subprograma es de la forma  $DGAUSS(F, A, B, EPS)$  donde  $F$  es un subprograma (FUNCION) declarada externa en el programa principal.

$A, B$ , son los puntos límite del intervalo de integración.

$EPS$  es el parámetro de aproximación.

DGAUSS es una variable de doble precisión y  $A, B$  y  $EPS$  son del mismo tipo que la función  $F$ .

Para cualquier intervalo  $[a, b]$  se define  $g_8(a, b)$  y  $g_{16}(a, b)$  como la aproximación por cuadratura gaussiana con 8 y 16 puntos respectivamente. Entonces si  $G \equiv DGAUSS$ ,

$$G = \sum_{i=1}^k g_{16}(x_{i-1}, x_i). \quad (4.3)$$

Los puntos  $x_i (i = 1, 2, \dots)$  están dados por  $x_i = x_{i-1} + \lambda(B - x_{i-1})$ , con  $\lambda$  igual al primer número de la sucesión  $1, 1/2, 1/4, \dots$  tal que  $r(x_{i-1}, x_i) < EPS$ , si definimos a  $r$  como

$$r(a, b) = \frac{|g_{16}(a, b) - g_8(a, b)|}{1 + |g_{16}(a, b)|}. \quad (4.4)$$

### 4.3.2 Subprograma MINUIT

El paquete MINUIT encuentra el mínimo de una función de varios parámetros, además de que analiza la forma de la función alrededor del mínimo. En nuestro caso lo que hace es ir fijando y restaurando los parámetros al tiempo que busca un mínimo global para la función. Esta rutina lee los valores de inicialización de los parámetros desde un archivo de datos.

La función FCN debe ser siempre una subrutina que calcule el valor de la función que va a ser minimizada con los siguientes parámetros:

- Parámetros de entrada
  - NPAR Número de parámetros variacionales.
  - XVAL Vector de parámetros.
  - IFLAG Indica qué calcular.
  - FUTIL Rutina utilitaria.
- Parámetros de salida
  - FVAL El valor calculado de la función.
  - GRAD El vector de primeras derivadas.

## 4.4 Programa General

Este es el programa que se utilizó para hacer los cálculos finales, corresponde al Ansatz total, es decir a la superposición lineal de todos los Ansatz mencionados en el Capítulo 3. Por supuesto, es el que mejores resultados dió pues se consideró al sistema en su estado más estable ( $R_+ = R_- = R_{eq}$ , en donde  $R_{eq}$  es la distancia en equilibrio).

Para los datos mostrados en las primeras tablas del capítulo de resultados, se utilizó un programa adaptado a cada uno de las funciones de prueba que se utilizaron; es decir, en el programa se cambiaba la función de prueba utilizada así como los potenciales usados.

En el caso del Ansatz total los cálculos se hicieron tomando  $R_+ = R_- = R_{eq}$ . Es en el cálculo de los puntos en las gráficas de los pozos de potencial donde si se uso el programa tomando  $R_+$  y  $R_-$  como dos parámetros diferentes.

Incorporo al final, un ejemplo de un archivo de entrada con los datos necesarios para que el programa haga el cálculo y de su archivo de salida con los resultados correspondientes.

### 4.4.1 Rutina Principal

Se ha cambiado el formato del programa a dos columnas, únicamente con el motivo de ahorrar espacio.

```

c      Minimizacion en MINUIT
c      Ulises Solis Hdez.
c      ICN-UWAM
c      Programa h3pp_s.f
c      Este programa minimiza la energia
c      del ion molecular H3++
c      Proyecto: DGAPA IN105296
c      -----
c      PROGRAM h3
c      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
c      COMMON /PARMS/ B,alpha1,beta1,A2,
c      $ alpha2,beta2,A3,alpha3,beta3,
c      $ R,A4,alpha4,alpha5,alpha6,beta4,A1
c      COMMON /UPLIM/ UPzH, UPzD, UPrhoN,
c      $ UPrhoD, EPSR(2), EPSZ(2)
c      COMMON /LIMITS/ AN(2),BN(2),EPSN(2),
c      $ AD(2), BD(2), EPSD(2)
c      COMMON /FLAGS/ icorr, iprint
c      EXTERNAL FCW
c
c      read(5,*)
c      read(5,*)Bx, icorr, iprint
c      read(5,*)
c      read(5,*)
c      read(5,*)UPrhoN, UPrhoD, EPSR(1)/
c      EPSR(2)
c      read(5,*)
c      read(5,*)UPzN,UPzD,EPSZ(1),EPSZ(2)
c      read(5,*)
c
c      Limites en z en unidades de R+
c      units=2.3505D0 !Unidades
c      B=Bx/units
c      !Bo=1/2.35 (1/2.3505)
c      Inicializando Minuit
c      Estableciendo numero de unidades
c      para datos de input/output
c      ird=5 !Unit number para lectura
c      ivr=6 !Unit number para escribir
c      isav=7 !Unit number para salvar
c      call mninit(ird,ivr,isav)
c      Llamando a MINUIT
c      CALL MINUIT(FCW,0)
c
c      atop
c      end ! FIN DEL PROGRAMA
c      +-----+
c      SUBROUTINE FCW
c      subroutine fcn(NPAR,GRAD,FVAL,XVAL,
c      IFLAG,FUTIL)
c      implicit double precision (A-H,D-Z)
c      dimension GRAD(*),IVAL(*)
c      COMMON /PARMS/ B,alpha1,beta1,A2,
c      $ alpha2,beta2,A3,alpha3,beta3,R,
c      $ A4,alpha4,alpha5,
c      $ alpha6,beta4,A1
c      COMMON /UPLIM/ UPzH, UPzD, UPrhoN,
c      $ UPrhoD, EPSR(2), EPSZ(2)
c      COMMON /LIMITS/ AN(2),BN(2),EPSN(2),
c      $ AD(2), BD(2), EPSD(2)
c      COMMON /FLAGS/ icorr, iprint
c      EXTERNAL EVAR
c
c      Asignaciones
c      R = XVAL(1)
c      A1 = XVAL(2)
c      alpha1 = XVAL(3)
c      beta1 = XVAL(4)
c      A2 = XVAL(5)
c      alpha2 = XVAL(6)
c      beta2 = XVAL(7)
c      A3 = XVAL(8)
c      alpha3 = XVAL(9)
c      beta3 = XVAL(10)
c      A4 = XVAL(11)
c      alpha4 = XVAL(12)
c      alpha5 = XVAL(13)
c      alpha6 = XVAL(14)
c      beta4 = XVAL(15)
c
c      Limites Superiores EPS
c      UPzH EPSZ(1)
c      UPzD EPSZ(2)
c      UPrhoN EPSR(1)
c      UPrhoD EPSR(2)
c      Integracion sobre 5 regiones en"z"
c
c      upz1 = R/3.000
c      upz2 = 2.000*R/3.000
c      upz3 = R
c      upz4 = 4.000*R/3.000
c
c      Region I: z(0,R/3) rho(0,UPrho)
c      limites para numerador
c      AN(1) = 0.000
c      AN(2) = 0.000
c      BN(1) = upz1
c      BN(2) = UPrhoN
c
c      EPSN(1) = 1.0D-09
c      EPSN(2) = 1.0D-09
c
c      limites para denominador
c      AD(1) = 0.000
c      AD(2) = 0.000
c      BD(1) = upz1
c      BD(2) = UPrhoD
c
c      EPSD(1) = 1.0D-09
c      EPSD(2) = 1.0D-09
c
c      Integracion sobre region 1
c      CALL EVAR(ENERGY,ENUM,EDEN)

```

```

ENUM1 = ENUM
EDEN1 = EDEN
if(iprint.eq.1) then
write(*,*)
write(*,*)
write(*,*)'Integration over region 1'
write(*,*)'ENUM:',ENUM1
write(*,*)'EDEN:',EDEN1
end if
c
c Region II: z( R/3,2R/3)
AN(1) = upz1 ! Limites para z
BN(1) = upz2
AD(1) = upz1
BD(1) = upz2
c
EPSN(1) = 1.0D-09
EPSN(2) = 1.0D-09
EPSD(1) = 1.0D-09
EPSD(2) = 1.0D-09
c
c Integracion sobre region 2
CALL EVAR(ENERGY,ENUM,EDEN)
ENUM2 = ENUM
EDEN2 = EDEN
if(iprint.eq.1) then
write(*,*)'Integration over region 2'
write(*,*)'ENUM:',ENUM2
write(*,*)'EDEN:',EDEN2
end if
c
c Region III: z(2R/3, R) rho(0,UPrho)
AN(1) = upz2 ! Limites para z
BN(1) = upz3
AD(1) = upz2
BD(1) = upz3
c
EPSN(1) = 1.0D-09
EPSN(2) = 1.0D-09
EPSD(1) = 1.0D-09
EPSD(2) = 1.0D-09
c
c Integracion sobre region 3
CALL EVAR(ENERGY,ENUM,EDEN)
ENUM3 = ENUM
EDEN3 = EDEN
if(iprint.eq.1) then
write(*,*)'Integration over region 3'
write(*,*)'ENUM:',ENUM3
write(*,*)'EDEN:',EDEN3
end if
c
c Region IV: z( R,4R/3) rho(0,UPrho)
AN(1) = upz3 ! Limites para z
BN(1) = upz4
AD(1) = upz3
BD(1) = upz4
c
EPSN(1) = 1.0D-09
EPSN(2) = 1.0D-09
EPSD(1) = 1.0D-09
EPSD(2) = 1.0D-09
c
c Integracion sobre region 4
CALL EVAR(ENERGY,ENUM,EDEN)
ENUM4 = ENUM
EDEN4 = EDEN
c
ENUMIV = ENUM1+ENUM2+ENUM3+ENUM4
EDENIV = EDEN1+EDEN2+EDEN3+EDEN4
c
if(iprint.eq.1) then
write(*,*)'Integration over region 4'
write(*,*)'ENUM:',ENUM4
write(*,*)'EDEN:',EDEN4
end if
c
c Region V: z(4R/3,UPz) rho(0,UPrho)
if((UPzN.le.1.33D0).or.\
(UPzD.le.1.33D0))then
write(*,*)
write(*,*)
write(*,*)
write(*,*)'**** Warning ****'
write(*,*)'Upper limits in z must'
write(*,*)'be greater than 1.33 R'
write(*,*)
write(*,*)'Program Aborted ...'
write(*,*)
write(*,*)'**** Warning ****'
stop
end if
c
AN(1) = upz4 ! Limites para z
BN(1) = UPzN*R
AD(1) = upz4
BD(1) = UPzD*R
c
EPSN(1) = 1.0D-09
EPSN(2) = 1.0D-09
EPSD(1) = 1.0D-09
EPSD(2) = 1.0D-09
c
c Integracion sobre region 5
CALL EVAR(ENERGY,ENUM,EDEN)
ENUM5 = ENUM
EDEN5 = EDEN
c
if(iprint.eq.1) then
write(*,*)'Integration over region 5'
write(*,*)'ENUM:',ENUM5
write(*,*)'EDEN:',EDEN5
end if
c
ENUMT = ENUM1+ENUM2+ENUM3+ENUM4

```

```

$ +ENUMS
EEDNT = EEDEN1+EEDEN2+EEDEN3+EEDEN4
$ +EEDEN6
c
FVAL = ENUMT/EEDENT
c
if(ABS(FVAL).ge.1.D7) then
write(*,*)'EMERGENCY STOP'
write(*,*)'(Energy seems to diverge)'
STOP
end if
c
if(iprint.eq.1) then
write(*,*)'R =',R
write(*,*)'alpha1 =',alpha1
write(*,*)'beta1 =',beta1
write(*,*)'A2 =',A2
write(*,*)'alpha2 =',alpha2
write(*,*)'beta2 =',beta2
write(*,*)'A3 =',A3
write(*,*)'alpha3 =',alpha3
write(*,*)'beta3 =',beta3
write(*,*)'A4 =',A4
write(*,*)'alpha4 =',alpha4
write(*,*)'alpha5 =',alpha5
write(*,*)'alpha6 =',alpha6
write(*,*)'beta4 =',beta4
end if
write(*,*)'Energia Variacional:',FVAL
c
if(icorr.eq.1)then
c
CORRECCIONES
EPSN(1) = 1.0D-06
EPSN(2) = 1.0D-06
EPSD(1) = 1.0D-06
EPSD(2) = 1.0D-06
c
Integracion sobre
c
intervalos adyacentes
c
Delta-z: z(UPz,2*UPz)
c
Delta-rho: rho(UPrho,2*UPrho)
c
Correcciones de Delta rho
AN(1) = 0.000 ! Limites para z
BN(1) = UPz*R
AD(1) = 0.000
BD(1) = UPz*D*R
c
AN(2) = UPrho*N ! Limites para rho
BN(2) = 2.000*UPrho*N
AD(2) = UPrho*D
BD(2) = 2.000*UPrho*D
c
Integracion sobre region DeltaRho
write(*,*)'-----'
CALL EVAR(ENERGY,ENUM,EDEN)
ENUMR = ENUM
c
EEDNR = EEDEN
c
ENUMRR = ENUMR/ENUMT
EEDNRR = EEDNR/EEDENT
c
write(*,*)'Relative contributions'
write(*,*)' from Delta-Rho:'
write(*,*)'Enum Delta-Rho:',ENUMR
write(*,*)'Eden Delta-Rho:',EEDNR
write(*,4001)ENUMRR
write(*,4002)EEDNRR
4001 format('Numer. Relative Error:',E15.5)
4002 format('Denom. Relative Error:',E15.5)
c
ERRMIN = 1.0D-06
ERRMAX = 3.5D-06
c
if(ABS(ENUMRR).LE.ERRMIN)then
c
write(*,*)'** Decrease limits'
write(*,*)' in rho for numer **'
elseif(ABS(ENUMRR).GE.ERRMAX)then
write(*,*)'** Increase limits '
write(*,*)' in rho for numer **'
endif
c
if(ABS(EEDNRR).LE.ERRMIN)then
write(*,*)'** Decrease limits'
write(*,*)' in rho for denom'
elseif(ABS(EEDNRR).GE.ERRMAX)then
write(*,*)'** Increase limits'
write(*,*)' in rho for denom **'
endif
c
Correcciones de Delta z
AN(1) = UPz*N ! Limites para z
BN(1) = 2.000*UPz*N*R
AD(1) = UPz*D*R
BD(1) = 2.000*UPz*D*R
c
AN(2) = 0.000 ! Limites para rho
BN(2) = UPrho*N
AD(2) = 0.000
BD(2) = UPrho*D
c
Integracion sobre region Delta z
write(*,*)'-----'
CALL EVAR(ENERGY,ENUM,EDEN)
ENUMZ = ENUM
EDENZ = EEDEN
c
Contribuciones relativas
ENUMZR = ENUMZ/ENUMT
EEDNZR = EEDENZ/EEDENT
c
write(*,*)'Relative contributions'
write(*,*)' from Delta-z'

```

```

write(*,*)'Enum Delta-z:',ENUMZ
write(*,*)'Eden Delta-z:',EDENZ
write(*,4001)ENUMZR
write(*,4002)EDENZR
c
c
if (ABS(ENUMZR).LE.ERRMIN)then
write(*,*)'Decrease limits'
write(*,*)' in z for numer **'
elseif (ABS(ENUMZR).GE.ERRMAX)then
write(*,*)'Increase limits'
write(*,*)' in z for numer **'
endif
c
c
if (ABS(EDENZR).LE.ERRMIN)then
write(*,*)'Decrease limits'
write(*,*)' in z for denom **'
elseif (ABS(EDENZR).GE.ERRMAX)then
write(*,*)'Increase limits'
write(*,*)' in z for denom **'
endif
c
c
endif ! FIN DE CORRECCIONES
c
c
return
end
c
c
*****
SUBROUTINE EVAR(ENERGY)
Rutina DGAUSS del CERN-lib
SUBROUTINE EVAR(ENERGY,ENUM,EDEN)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON /PARMS/ B, alpha1, beta1, A2,
$ alpha2, beta2, A3, alpha3, beta3,
$ R, A4, alpha4, alpha5, alpha6, beta4, A1
COMMON /LIMITS/ AN(2), BN(2), EPSN(2),
$ AD(2), BD(2), EPSD(2)
EXTERNAL F1N, F1D, DGAUSS1,
$ DGAUSS2, DGAUSS3, DGAUSS4
c
c
ZERO = 1.0D-12
c
c
ENERGY = ZERO
ENUM = ZERO
EDEN = ZERO
c
c
----- N U M E R A T O R -----
Calculando integral para numerador
ENUM=DGAUSS1(F1N, AN(1), BN(1), EPSN(1))
c
c
----- D E N O M I N A T O R -----
Calculando integral para denominador
Intervalo Basico
EDEN=DGAUSS3(F1D, AD(1), BD(1), EPSD(1))
c
c
Calculando la energia variacional:
ENERGY = ENUM/EDEN
RETURN
c
c
END ! Fin de EVAR
c
c
-----S U B R U T I N A S-----
DOUBLE PRECISION FUNCTION F1N(Z)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
COMMON /PARMS/ B, alpha1, beta1, A2,
$ alpha2, beta2, A3, alpha3, beta3,
$ R, A4, alpha4, alpha5, alpha6, beta4, A1
COMMON /LIMITS/ AN(2), BN(2), EPSN(2),
$ AD(2), BD(2), EPSD(2)
COMMON/COORDS/ X(2)
EXTERNAL F2N, DGAUSS2
c
c
write(*,*)'Inside F1N',Z
c
c
X(1)=Z ! COORDENADA Z
c
c
F1N=DGAUSS2(F2N, AN(2), BN(2), EPSN(2))
c
c
RETURN
END
c
c
-----
DOUBLE PRECISION FUNCTION F2N(RHO)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
COMMON /PARMS/ B, alpha1, beta1, A2,
$ alpha2, beta2, A3, alpha3, beta3,
$ R, A4, alpha4, alpha5, alpha6, beta4, A1
COMMON /LIMITS/ AN(2), BN(2), EPSN(2),
$ AD(2), BD(2), EPSD(2)
COMMON/COORDS/ X(2)
c
c
X(2)=RHO ! COORDENADA RHO
c
c
X(1)=Z ! COORDENADA Z
c
c
FORMULAS
F2N= (numerador)
rho2=X(2)*X(2)
r1=DSQRT(rho2+(X(1)+R)*(X(1)+R))
r2=DSQRT(rho2+ X(1)*X(1))
r3=DSQRT(rho2+(X(1)-R)*(X(1)-R))
BeBr1=beta1*B*rho2/4.0D0
BeBr2=beta2*B*rho2/4.0D0
BeBr3=beta3*B*rho2/4.0D0
BeBr4=beta4*B*rho2/4.0D0
Vr =(1.0D0/r1) + (1.0D0/r2) + (1.0D0/r3)
Vr1=(alpha4/r1)+(alpha5/r2)+(alpha6/r3)
Vr2=(alpha4/r1)+(alpha5/r3)+(alpha6/r2)
Vr3=(alpha4/r2)+(alpha5/r1)+(alpha6/r3)
Vr4=(alpha4/r2)+(alpha5/r3)+(alpha6/r1)
Vr5=(alpha4/r3)+(alpha5/r2)+(alpha6/r1)
Vr6=(alpha4/r3)+(alpha5/r1)+(alpha6/r2)
c
c
R12 = (1.0D0/r1)+(1.0D0/r2)
R23 = (1.0D0/r2)+(1.0D0/r3)
R31 = (1.0D0/r3)+(1.0D0/r1)
P12 = (rho2*(X(1)+R)*X(1))/(r1*r2)
P23 = (rho2*(X(1)+R)*X(1))/(r2*r3)

```



```

P31 = (rho2*(X(1)*X(1)-R*R))/(r3*r1)
V = -2.000*Vr + B*B*rho2/4.000 +
$ 5.000/R ! Original Potential
c
c **Ansatz4**
c Funciones de Onda
psi41 = DEXP(- alpha4*r1 - alpha5*r2
$ - alpha6*r3 - BeBr4)
psi42 = DEXP(- alpha4*r1 - alpha5*r3
$ - alpha6*r2 - BeBr4)
psi43 = DEXP(- alpha4*r2 - alpha5*r1
$ - alpha6*r3 - BeBr4)
psi44 = DEXP(- alpha4*r2 - alpha5*r3
$ - alpha6*r1 - BeBr4)
psi45 = DEXP(- alpha4*r3 - alpha5*r2
$ - alpha6*r1 - BeBr4)
psi46 = DEXP(- alpha4*r3 - alpha5*r1
$ - alpha6*r2 - BeBr4)
psi4 = psi41 + psi42 + psi43 +
$ psi44 + psi45 + psi46
c
c Potenciales
V41 = + 2.000*alpha4*alpha5*P12 +
$ 2.000*alpha5*alpha6*P23
$+ 2.000*alpha6*alpha4*P31 +
$ beta4*B*BeBr4 + beta4*B*rho2*Vr1
$ - 2.000*Vr1 + alpha4*alpha4 +
$ alpha5*alpha5 + alpha6*alpha6
$ - beta4*B
V42 = + 2.000*alpha4*alpha5*P31 +
$ 2.000*alpha5*alpha6*P23
$+ 2.000*alpha6*alpha4*P12 +
$ beta4*B*BeBr4 + beta4*B*rho2*Vr2
$ - 2.000*Vr2 + alpha4*alpha4 +
$ alpha5*alpha5 + alpha6*alpha6
$ - beta4*B
V43 = + 2.000*alpha4*alpha5*P12 +
$ 2.000*alpha5*alpha6*P31
$+ 2.000*alpha6*alpha4*P23 +
$ beta4*B*BeBr4 + beta4*B*rho2*Vr3
$ - 2.000*Vr3 + alpha4*alpha4 +
$ alpha5*alpha5 + alpha6*alpha6
$ - beta4*B
V44 = + 2.000*alpha4*alpha5*P23
$ + 2.000*alpha5*alpha6*P31
$+ 2.000*alpha6*alpha4*P12 +
$ beta4*B*BeBr4 + beta4*B*rho2*Vr4
$ - 2.000*Vr4 + alpha4*alpha4 +
$ alpha5*alpha5 + alpha6*alpha6
$ - beta4*B
V45 = + 2.000*alpha4*alpha5*P23 +
$ 2.000*alpha5*alpha6*P12
$+ 2.000*alpha6*alpha4*P31 +
$ beta4*B*BeBr4 + beta4*B*rho2*Vr5
$ - 2.000*Vr5 + alpha4*alpha4 +
$ alpha5*alpha5 + alpha6*alpha6
$ - beta4*B
V46 = + 2.000*alpha4*alpha5*P31
$ + 2.000*alpha5*alpha6*P12
$+ 2.000*alpha6*alpha4*P23 +
$ beta4*B*BeBr4 + beta4*B*rho2*Vr6
$ - 2.000*Vr6 + alpha4*alpha4 +
$ alpha5*alpha5 + alpha6*alpha6
$ - beta4*B
c
c Funciones de Onda (Ansatz3)
psi31 = DEXP(-alpha3*(r1+r2)-BeBr3)
psi32 = DEXP(-alpha3*(r2+r3)-BeBr3)
psi33 = DEXP(-alpha3*(r3+r1)-BeBr3)
psi3 = psi31 + psi32 + psi33
c
c Potenciales (Ansatz3)
V31 = -2.000*alpha3*R12 +
$ beta3*B*BeBr3 +
$ alpha3*beta3*B*rho2*R12
$+ 2*alpha3*alpha3*P12 +
$ 2*alpha3*alpha3 - beta3*B
V32 = -2.000*alpha3*R23 +
$ beta3*B*BeBr3 +
$ alpha3*beta3*B*rho2*R23
$+ 2*alpha3*alpha3*P23 +
$ 2*alpha3*alpha3 - beta3*B
V33 = -2.000*alpha3*R31 +
$ beta3*B*BeBr3 +
$ alpha3*beta3*B*rho2*R31
$+ 2*alpha3*alpha3*P31 +
$ 2*alpha3*alpha3 - beta3*B
c
c Funciones de Onda (Ansatz2)
psi21 = DEXP(-alpha2*r1-BeBr2)
psi22 = DEXP(-alpha2*r2-BeBr2)
psi23 = DEXP(-alpha2*r3-BeBr2)
psi2 = psi21 + psi22 + psi23
c
c Potenciales (Ansatz2)
V21 = -2.000*alpha2/r1 +
$ beta2*B*BeBr2 +
$ 4.000*alpha2*BeBr2/r1
$+ alpha2*alpha2 - beta2*B
V22 = -2.000*alpha2/r2 +
$ beta2*B*BeBr2 +
$ 4.000*alpha2*BeBr2/r2
$+ alpha2*alpha2 - beta2*B
V23 = -2.000*alpha2/r3 +
$ beta2*B*BeBr2 +
$ 4.000*alpha2*BeBr2/r3
$+ alpha2*alpha2 - beta2*B
c
c Funciones de Onda (Ansatz1)
psi1 = DEXP(-alpha1*(r1 +
$ r2 + r3) - BeBr1)
c
c Potenciales (Ansatz1)
P7 = -2.000*alpha1*Vr

```

```

P8 = beta1*beta1*B*B*rho2/4.000
P9 = 2.000*alpha1*alpha1
$ (P12+P23+P31)
P10= alpha1*beta1*B*rho2*Vr
c
V1= P7 + P8 + P9 + P10 +
$ 3.000*alpha1*alpha1 - beta1*B
c
Funcion de Onda de Prueba
psi = A1*psi1 + A2*psi2 +
$ A3*psi3 + A4*psi4
c
F2N=X(2)*psi*(V*psi - A1*V1*psi1
$ - A2*(V21*psi21 + V22*psi22
$+ V23*psi23) - A3*(V31*psi31 +
$ V32*psi32 + V33*psi33)
$ - A4*(V41*psi41 + V42*psi42
$+ V43*psi43 + V44*psi44 +
$ V45*psi45 + V46*psi46))
c
RETURN
END
c
*****
c          D E N O M I N A T O R
c-----
DOUBLE PRECISION FUNCTION F1D(Z)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
COMMON /PARMS/ B, alpha1, beta1, A2,
$ alpha2, beta2, A3, alpha3, beta3,
$ R, A4, alpha4, alpha5, alpha6, beta4, A1
COMMON /LIMITS/ AN(2), BN(2),
$ EPSM(2), AD(2), BD(2), EPSD(2)
COMMON/COORDS/ X(2)
EXTERNAL F2D, DGAUSS4
c
X(1)=Z      ! COORDENADA Z
c
F1D=DGAUSS4(F2D,AD(2),BD(2),EPSD(2))
c
RETURN
END
c
*****
c-----
DOUBLE PRECISION FUNCTION F2D(RHO)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
COMMON /PARMS/ B, alpha1, beta1, A2,
$ alpha2, beta2, A3, alpha3, beta3,
$ R, A4, alpha4, alpha5, alpha6, beta4, A1
COMMON /LIMITS/ AN(2), BN(2),
$ EPSM(2), AD(2), BD(2), EPSD(2)

```

```

COMMON/COORDS/ X(2)
c
X(2)=RHO      ! COORDENADA RHO
c
F2D= (denominador)
FORMULAS
rho2=X(2)*X(2)
r1=DSQRT(rho2*(X(1)+R)*(X(1)+R))
r2=DSQRT(rho2* X(1)*X(1))
r3=DSQRT(rho2*(X(1)-R)*(X(1)-R))
BeBr1=beta1*B*rho2/4.000
BeBr2=beta2*B*rho2/4.000
BeBr3=beta3*B*rho2/4.000
BeBr4=beta4*B*rho2/4.000
c
Funciones de Onda
psi41 = DEXP(- alpha4*r1 - alpha5*r2
$ - alpha6*r3 - BeBr4)
psi42 = DEXP(- alpha4*r1 - alpha5*r3
$ - alpha6*r2 - BeBr4)
psi43 = DEXP(- alpha4*r2 - alpha5*r1
$ - alpha6*r3 - BeBr4)
psi44 = DEXP(- alpha4*r2 - alpha5*r3
$ - alpha6*r1 - BeBr4)
psi45 = DEXP(- alpha4*r3 - alpha5*r2
$ - alpha6*r1 - BeBr4)
psi46 = DEXP(- alpha4*r3 - alpha5*r1
$ - alpha6*r2 - BeBr4)
psi4 = psi41 + psi42 + psi43 +
$ psi44 + psi45 + psi46
psi31= DEXP(-alpha3*(r1+r2)-BeBr3)
psi32= DEXP(-alpha3*(r2+r3)-BeBr3)
psi33= DEXP(-alpha3*(r3+r1)-BeBr3)
psi3 = psi31 + psi32 + psi33
psi21=DEXP(-alpha2*r1-BeBr2)
psi22=DEXP(-alpha2*r2-BeBr2)
psi23=DEXP(-alpha2*r3-BeBr2)
psi2 = psi21 + psi22 + psi23
psi1= DEXP(-alpha1*(r1 + r2 + r3)
$ - BeBr1)
c
Funcion de Onda de Prueba
psi = A1*psi1 + A2*psi2 +
$ A3*psi3 + A4*psi4
F2D=X(2)*psi*psi
c
RETURN
END
c
*****

```

#### 4.4.2 Archivo de Datos

El siguiente es un archivo de datos que contiene los valores de entrada para los parámetros variacionales, también muestra los límites para las tres regiones de integración. Se trata de un ejemplo para  $B = 10^{12}$  Gauss que en el archivo esta indicado por  $B=1000$ , por ser la convencion usada cuando se tienen unidades atómicas. En este caso no hay minimización y se considera la configuración en equilibrio donde  $R_- = R_+$ . EPS es el parámetro de aproximación de la rutina DGAUSS.

```

Magnetic field (in units of B_0) and flags for corr l=yes and iprint
1000.0D0      1      0
#-----
NUM      DEN      EPSN      EPSD Integration Up. Lim. for "rho"
0.282D0  0.288D0  1.D-09  1.D-09
NUM      DEN      EPSN      EPSD Integration Up. Lim. for z in units of R+
10.4D0   10.4D0   1.D-09  1.D-09
NUM      DEN      EPSN      EPSD Integration Up. Lim. for z in units of R-
-10.4D0  -10.4D0  1.D-09  1.D-09
#-----

SET TITLE
'Variational Energy for H3++ in a magnetic field (Superposition)'
PARAMETERS
  1 ' R-      ' 0.34459  0.00  0.0  5.0
  2 ' A1      ' 1.00000  0.00  0.0  0.0
  3 ' alpha1  ' 1.17320  0.00  0.0  9.0
  4 ' beta1   ' 0.91538  0.00  0.0  5.0
  5 ' A2      ' -.11095  0.00 -10.0 20.0
  6 ' alpha2  ' 2.13840  0.00  0.0 30.0
  7 ' beta2   ' 0.79493  0.00  0.0 20.0
  8 ' A3      ' 0.11610  0.00 -9.0  20.0
  9 ' alpha3  ' 1.49040  0.00  0.0 10.0
 10 ' beta3   ' 0.90896  0.00  0.0 10.0
 11 ' A4      ' 0.36202  0.00 -2.0 10.0
 12 ' alpha4  ' 2.71580  0.00 -2.0 50.0
 13 ' alpha5  ' 0.50923  0.00 -2.0 10.0
 14 ' alpha6  ' 0.49881  0.00 -2.0 50.0

```

```

15 ' beta4 ' 0.89196 0.00 0.0 2.0
16 ' R+ ' 0.34459 0.00 0.0 5.0

```

```

SET EPSmachine 0.0000001
SET STRategy 2
MIGRAD 500
STOP

```

### 4.4.3 Archivo de Salida

Una vez hechos los cálculos, el programa tiene un archivo de salida con los resultados. El siguiente archivo es el que corresponde al archivo de entrada de la sección anterior, muestra los valores de los parámetros variacionales como constantes, así como la energía variacional calculada (FCN). También se indica la precisión relativa para cada región de integración, tanto del numerador como del denominador de la función (4.1).

```

FCN= 410.3499 FROM PARAMETR STATUS=RESET 2 CALLS 2 TOTAL
EDM= unknown STRATEGY= 1 NO ERROR MATRIX

```

| EXT PARAMETER |        | VALUE    | CURRENT GUESS<br>ERROR | PHYSICAL LIMITS |          |
|---------------|--------|----------|------------------------|-----------------|----------|
| NO.           | NAME   |          |                        | NEGATIVE        | POSITIVE |
| 1             | R      | 0.34459  | constant               |                 |          |
| 2             | A1     | 1.00000  | constant               |                 |          |
| 2             | alpha1 | 1.1732   | constant               |                 |          |
| 3             | beta1  | 0.91538  | constant               |                 |          |
| 4             | A2     | -0.11095 | constant               |                 |          |
| 5             | alpha2 | 2.1384   | constant               |                 |          |
| 6             | beta2  | 0.79493  | constant               |                 |          |
| 8             | A3     | 0.11610  | constant               |                 |          |
| 9             | alpha3 | 1.4904   | constant               |                 |          |
| 10            | beta3  | 0.90896  | constant               |                 |          |
| 11            | A4     | 0.36202  | constant               |                 |          |
| 12            | alpha4 | 2.7158   | constant               |                 |          |
| 13            | alpha5 | 0.50923  | constant               |                 |          |
| 14            | alpha6 | 0.49881  | constant               |                 |          |

```

15  beta4      0.89196      constant
16  R          0.34459      constant

**  1 **SET EPSMACHINE  0.1000E-06
FLOATING-POINT NUMBERS ASSUMED ACCURATE TO  0.100E-06
**  2 **SET STRATEGY    2.000
NOW USING STRATEGY  2: MAKE SURE MINIMUM TRUE, ERRORS CORRECT
**  3 **MIGRAD          500.0
**  4 **STOP

```

CALL TO USER FUNCTION WITH IFLAG = 3

Energia Variacional: 410.349883

```

-----
Relative contributions from Delta-Rho
Enum Delta-Rho: 6.19016979E-09
Eden Delta-Rho: 2.19700459E-11
Numer. Relative Error: 0.11614E-07
Denom. Relative Error: 0.16915E-07
** Decrease limits in rho for numer **
** Decrease limits in rho for denom **

```

```

-----
Relative contributions from Delta-z1
Enum Delta-z: 9.29918414E-09
Eden Delta-z: 2.0848689E-11
Numer. Relative Error: 0.17448E-07
Denom. Relative Error: 0.16052E-07
** Decrease limits in z for numer **
** Decrease limits in z for denom **

```

```

-----
Relative contributions from Delta-z2
Enum Delta-z: 9.29918414E-09
Eden Delta-z: 2.0848689E-11
Numer. Relative Error: 0.17448E-07
Denom. Relative Error: 0.16052E-07
** Decrease limits in z for numer **
** Decrease limits in z for denom **
.....MINUIT TERMINATED BY MINUIT COMMAND: STOP

```

# Capítulo 5

## Resultados

### 5.1 Resultados para cada Ansatz

Sustituyendo el hamiltoniano para el ion  $H_3^{++}$  y el potencial correspondiente en la ecuación para la energía variacional (1.8) para cada función de prueba, podemos ahora calcular la integral numéricamente. La manera de hacer el cálculo es aproximándose al valor de la integral por el método de cuadratura Gaussiana, el cual se explica en el apéndice B. Cada uno de estos cálculos fueron hechos con el programa discutido en el Capítulo 4.

La integración se hizo para la distancia en equilibrio  $R_{eq} \equiv R_- = R_+$ , con una precisión relativa del orden de  $10^{-6}$ .

Se hicieron los cálculos para cada uno de los Ansatz propuestos y para valores distintos del campo magnético. Cálculos para campos magnéticos de  $10^{10}$  Gauss muestran que no existe un mínimo de la energía total para valores de  $R_{eq}$  finitos. Por tanto, se tomaron los campos magnéticos de intensidad:  $10^{11}$ ,  $10^{12}$  y  $10^{13}$  Gauss, con el fin de encontrar un mínimo en la energía que pueda mantener un estado ligado.

Las siguientes tablas muestran el valor de la energía variacional para diferentes campos magnéticos para todos los Ansatz propuestos, además de mostrar el valor de los parámetros variacionales.

### 5.1.1 Ansatz 1

La primera tabla nos indica qué valores se obtienen para la energía del estado base si consideramos al sistema únicamente formado por enlaces covalentes, o sea, los núcleos comparten los electrones en una molécula.

La primera función de prueba (3.11) describe al sistema en el estado de equilibrio, cuando las distancias internucleares son iguales entre sí  $R_- = R_+$ . En esta descripción, el electrón no tiene preferencia alguna por estar cerca de alguno de los centros.

Por principio de cuentas, en la tabla se nota que cuando aumentamos el valor del campo magnético, las distancias internucleares disminuyen y la energía total aumenta, esto indica que la energía de amarre se hace cada vez más grande y el ion se va compactando.

| B         | $R_{eq}$ (u.a.) | E (Ry)  | $\alpha_1$ | $\beta_1$ |
|-----------|-----------------|---------|------------|-----------|
| $10^{11}$ | 0.778           | 36.49   | 0.76       | 0.87      |
| $10^{12}$ | 0.343           | 410.43  | 1.24       | 0.93      |
| $10^{13}$ | 0.167           | 4220.43 | 1.95       | 0.97      |

Tabla 1.  $\psi_1$ . Resultados de cálculos de energía total E y distancia en equilibrio  $R_{eq}$  del estado base del ion  $H_3^{++}$ . El campo magnético está dado en Gauss, el parámetro variacional  $\alpha_1$  en  $(u.a.)^{-1}$  y  $\beta_1$  es adimensional.

### 5.1.2 Ansatz 2

La segunda tabla presenta los valores correspondientes al caso en que tenemos un acoplamiento de un átomo de hidrógeno con dos protones, es decir del tipo  $H + p + p$ , donde sólo hay enlaces iónicos.

Este es un buen Ansatz cuando queremos describir al ion  $H_3^{++}$  con distancias internucleares grandes, describe cuando el electrón prefiere estar cerca de uno de los centros.

Notemos que la energía calculada con el Ansatz 2 es mayor a la calculada con el Ansatz 1. De esto concluimos que la primera función de prueba describe mejor al sistema cerca de la posición de equilibrio.

| B         | $R_{eq}$ (u.a.) | E (Ry)  | $\alpha_2$ | $\beta_2$ |
|-----------|-----------------|---------|------------|-----------|
| $10^{11}$ | 0.835           | 36.78   | 1.98       | 0.83      |
| $10^{12}$ | 0.348           | 411.09  | 3.41       | 0.91      |
| $10^{13}$ | 0.166           | 4221.68 | 5.48       | 0.97      |

Tabla 2.  $\psi_2$ . Resultados de cálculos de energía total E y distancia en equilibrio  $R_{eq}$  del estado base del ion  $H_3^{++}$ . El campo magnético está dado en Gauss, el parámetro variacional  $\alpha_2$  en (u.a.)<sup>-1</sup> y  $\beta_2$  es adimensional.

### 5.1.3 Ansatz 3

El tercer Ansatz describe un acoplamiento de un ion  $H_2^+$  con un protón,  $H_2^+ + p$ ; así, la Tabla 3 muestra los valores que corresponden a esta función de prueba. En esta descripción el electrón forma un ion de hidrógeno y un protón restante.

Con estos datos podemos ir haciendo una comparación entre los valores obtenidos de la energía para los diferentes Ansatz. Se puede ver que de los tres primeros éste es el que da menor valor de la energía. Hasta ahora, es entonces el mejor Ansatz que hemos propuesto.

| B         | $R_{eq}$ (u.a.) | E (Ry)  | $\alpha_3$ | $\beta_3$ |
|-----------|-----------------|---------|------------|-----------|
| $10^{11}$ | 0.835           | 36.47   | 1.25       | 0.83      |
| $10^{12}$ | 0.346           | 410.40  | 1.97       | 0.92      |
| $10^{13}$ | 0.168           | 4220.39 | 3.01       | 0.97      |

Tabla 3.  $\psi_3$ . Resultados de cálculos de energía total E y distancia en equilibrio  $R_{eq}$  del estado base del ion  $H_3^{++}$ . El campo magnético está dado en Gauss, el parámetro variacional  $\alpha_3$  en (u.a.)<sup>-1</sup> y  $\beta_3$  es adimensional.

Una vez hecho el cálculo con las tres primeras funciones, cabe la posibilidad de mejorar los datos obtenidos haciendo una combinación más general entre estas funciones, esto es lo que se hace a continuación.



### 5.1.4 Ansatz 4 (Superposición no Lineal)

El Ansatz 4 es una superposición no lineal entre los tres primeros Ansatz. La función conserva su simetría frente intercambio de los parámetros  $\alpha$ .

Con esta función se intenta describir al ion con distancias internucleares en equilibrio y también a distancias grandes.

Se observan mejores mínimos para la energía, esto motiva a intentar seguir construyendo funciones de prueba que nos den valores todavía más precisos.

| B         | $R_{eq}$ (u.a.) | E (Ry)  | $\alpha_4$ | $\alpha_5$ | $\alpha_6$ | $\beta_4$ |
|-----------|-----------------|---------|------------|------------|------------|-----------|
| $10^{11}$ | 0.795           | 36.45   | 1.66       | 0.42       | 0.42       | 0.83      |
| $10^{12}$ | 0.350           | 410.39  | 2.41       | 0.70       | 0.78       | 0.92      |
| $10^{13}$ | 0.167           | 4220.37 | 2.73       | 0.48       | 2.74       | 0.97      |

Tabla 4.  $\psi_4$ . Resultados de cálculos de energía total E y distancia en equilibrio  $R_{eq}$  del estado base del ion  $H_3^{++}$ . El campo magnético esta dado en Gauss, los parámetros variacionales  $\alpha_{4,5,6}$  en (u.a.)<sup>-1</sup> y  $\beta_4$  es adimensional.

### 5.1.5 Ansatz 123 (Combinación Lineal de los Ansatz 1, 2 y 3)

Esta función de prueba es la superposición lineal de los tres primeros Ansatz (3.11), (3.13) y (3.15). Para esta función, al igual que para la anterior el modo de minimizar la energía con respecto a los parámetros variacionales debe hacerse con más cuidado.

La minimización del Ansatz 123 se hizo de la siguiente manera. Los coeficientes  $A_1$ ,  $A_2$  y  $A_3$  se inicializaron igual a 1, los primeros valores de los parámetros variacionales fueron los que se consiguieron en la minimización de cada Ansatz; luego se empezó a minimizar con el tercer Ansatz pues de los tres primeros, es el que mejores resultados dió. Después se continuó con el Ansatz 1 y al final con la segunda función de prueba. Este proceso fue cíclico y se hizo varias veces hasta que los valores de los parámetros dados por el programa no variaran drásticamente.

Esta es otra manera de poder combinar los distintos acoplamientos entre los tres Ansatz más simples y así obtener distintas funciones de prueba que

se acerquen a una buena descripción del estado del sistema.

Los valores de la energía que se obtuvieron con este procedimiento se resumen en las siguientes gráficas.

| B         | $R_{eq}$ (u.a.) | E (Ry)  | $A_1$ | $\alpha_1$ | $\beta_1$ | $A_2$ | $\alpha_2$ | $\beta_2$ |
|-----------|-----------------|---------|-------|------------|-----------|-------|------------|-----------|
| $10^{11}$ | 0.796           | 36.45   | 1     | 0.84       | 0.83      | 0.07  | 3.06       | 0.70      |
| $10^{12}$ | 0.346           | 410.39  | 1     | 1.35       | 0.92      | 0.07  | 4.06       | 0.90      |
| $10^{13}$ | 0.167           | 4220.29 | 1     | 1.74       | 0.97      | -0.02 | 1.71       | 0.92      |

| B         | $A_3$ | $\alpha_3$ | $\beta_3$ |
|-----------|-------|------------|-----------|
| $10^{11}$ | 0.11  | 1.07       | 0.88      |
| $10^{12}$ | 0.27  | 1.86       | 0.96      |
| $10^{13}$ | 0.24  | 2.96       | 0.96      |

Tabla 5.  $\psi_{123}$ . Resultados de cálculos de energía total E y distancia en equilibrio  $R_{eq}$  del estado base del ion  $H_3^{++}$ . El campo magnético esta dado en Gauss, los parámetros variacionales  $\alpha_{1,2,3}$  en (u.a.)<sup>-1</sup> y los  $\beta_{1,2,3}$  son adimensionales.

### 5.1.6 Ansatz Total (Superposición Lineal de todos los Ansatz)

La función más general que se puede lograr es una combinación lineal del Ansatz 123 y el Ansatz 4. La última función es entonces el Ansatz Total.

El procedimiento para minimizar es análogo al de la superposición lineal. Se comienza a minimizar con el Ansatz que ha dado mejores resultados partiendo con los mismos parámetros variacionales que tenía cuando se minimizó la energía con sólo esta función.

A medida que la función de prueba se va complicando y va aumentando el número de parámetros variacionales, el cálculo de la integral con la computadora se va haciendo más tardado y el mínimo es más difícil de localizar, por eso es importante la guía que nos dan los resultados obtenidos anteriormente

con otras funciones de prueba.

| B         | $R_{eq}$ (u.a.) | E (Ry)  | $A_1$ | $\alpha_1$ | $\beta_1$ | $A_2$ | $\alpha_2$ | $\beta_2$ |
|-----------|-----------------|---------|-------|------------|-----------|-------|------------|-----------|
| $10^{11}$ | 0.801           | 36.43   | 1     | 0.89       | 0.84      | 0.07  | 3.08       | 0.75      |
| $10^{12}$ | 0.346           | 410.30  | 1     | 1.62       | 1.00      | -0.51 | 12.34      | 1.61      |
| $10^{13}$ | 0.165           | 4220.09 | 1     | 0.51       | 1.00      | -4.39 | 3.42       | 0.96      |

| B         | $A_3$ | $\alpha_3$ | $\beta_3$ | $A_4$  | $\alpha_4$ | $\alpha_5$ | $\alpha_6$ | $\beta_4$ |
|-----------|-------|------------|-----------|--------|------------|------------|------------|-----------|
| $10^{11}$ | 0.38  | 1.31       | 0.83      | -3.11  | -0.25      | 6.60       | 6.60       | 0.019     |
| $10^{12}$ | -8.52 | 5.96       | 0.95      | 5.62   | 0.53       | 0.83       | 3.26       | 0.93      |
| $10^{13}$ | 27.28 | 2.89       | 0.97      | -11.77 | 16.45      | -0.73      | 16.45      | 0.99      |

Tabla 6.  $\psi_l$ . Resultados de cálculos de energía total E y distancia en equilibrio  $R_{eq}$  del estado base del ion  $H_3^{++}$ . El campo magnético esta dado en Gauss, los parámetros variacionales  $\alpha_{1,2,3,4,5,6}$  en  $(u.a.)^{-1}$  y los  $\beta_{1,2,3,4}$  son adimensionales.

### 5.1.7 Comparación de los Datos

Las siguientes son las tablas que comparan las energías del estado base del ion para distintos Ansatz. Aquí se puede notar como el Ansatz 3 cobra importancia para la descripción del sistema pues de los tres primeros es el que da una menor cota para la energía.

También se ve que el mejor valor de las energías se obtiene con la función de prueba Total. Con esto se muestra la conveniencia de considerar todas las posibles descripciones del sistema.

| Ansatz       | $R_{eq}$ (u.a.) | E(Ry) |
|--------------|-----------------|-------|
| $\Psi_1$     | 0.778           | 36.49 |
| $\Psi_2$     | 0.835           | 36.78 |
| $\Psi_3$     | 0.786           | 36.47 |
| $\Psi_{123}$ | 0.795           | 36.45 |
| $\Psi_4$     | 0.796           | 36.45 |
| $\Psi_t$     | 0.801           | 36.43 |

Tabla 7.  $B = 10^{11}$  Gauss. Resultados de cálculos de energía total  $E$  y distancia en equilibrio  $R_{eq}$  del estado base del ion  $H_3^{++}$  usando Ansatz distintos.

| Ansatz       | $R_{eq}$ (u.a.) | E(Ry)  |
|--------------|-----------------|--------|
| $\Psi_1$     | 0.343           | 410.43 |
| $\Psi_2$     | 0.348           | 411.09 |
| $\Psi_3$     | 0.346           | 410.40 |
| $\Psi_{123}$ | 0.350           | 410.39 |
| $\Psi_4$     | 0.346           | 410.39 |
| $\Psi_t$     | 0.346           | 410.30 |

Tabla 8.  $B = 10^{12}$  Gauss. Resultados de cálculos de energía total  $E$  y distancia en equilibrio  $R_{eq}$  del estado base del ion  $H_3^{++}$  usando Ansatz distintos.

| Ansatz       | $R_{eq}$ (u.a.) | E(Ry)   |
|--------------|-----------------|---------|
| $\Psi_1$     | 0.167           | 4220.43 |
| $\Psi_2$     | 0.166           | 4221.68 |
| $\Psi_3$     | 0.168           | 4220.39 |
| $\Psi_{123}$ | 0.167           | 4220.29 |
| $\Psi_4$     | 0.167           | 4220.37 |
| $\Psi_t$     | 0.165           | 4220.09 |

Tabla 9.  $B = 10^{13}$  Gauss. Resultados de cálculos de energía total  $E$  y distancia en equilibrio  $R_{eq}$  del estado base del ion  $H_3^{++}$  usando Ansatz distintos

### 5.1.8 Comparación entre Sistemas de 1 Electrón

En la siguiente tabla podemos comparar los valores para la energía del estado base para diferentes campos magnéticos en tres distintos sistemas, un átomo de hidrógeno y dos iones moleculares  $H_2^+$  y  $H_3^{++}$ .

Se puede ver también que la distancia en equilibrio disminuye conforme se aumenta el campo magnético; o sea, la molécula se hace cada vez más compacta.

|            | $B = 0$ |          | $B = 10^{11}$ Gauss |          | $B = 10^{12}$ Gauss |          | $B = 10^{13}$ Gauss |          |
|------------|---------|----------|---------------------|----------|---------------------|----------|---------------------|----------|
|            | $E$     | $R_{eq}$ | $E$                 | $R_{eq}$ | $E$                 | $R_{eq}$ | $E$                 | $R_{eq}$ |
| $H$        | -1.000  | -        | 36.929              | -        | 413.57              | -        | 4231.6              | -        |
| $H_2^+$    | -1.205  | 1.997    | 35.036              | 0.593    | 408.300             | 0.283    | 4218.662            | 0.147    |
| $H_3^{++}$ | -       | -        | 36.429              | 0.803    | 410.296             | 0.346    | 4220.090            | 0.165    |

Tabla 10. Comparación entre sistemas diferentes de un electrón. Los resultados para el átomo de hidrógeno son de Lai et al. Phys. Rev. A45, 4832 (1992); para el  $H_2^+$  los resultados son de [6] y para  $H_3^{++}$  los resultados son del presente trabajo. La energía total  $E$  y la distancia en equilibrio están en u.a.

## 5.2 Análisis Gráfico

### 5.2.1 Posición del Electrón en el Sistema

Las tres figuras 5.1 muestran la distribución de la densidad electrónica como función del campo magnético. Puede verse que la posición más probable para encontrar al electrón es cerca del protón central.

En un campo magnético  $B \simeq 10^{11}$  Gauss la distribución tiene un claro máximo correspondiente a la posición del protón de en medio, todavía se

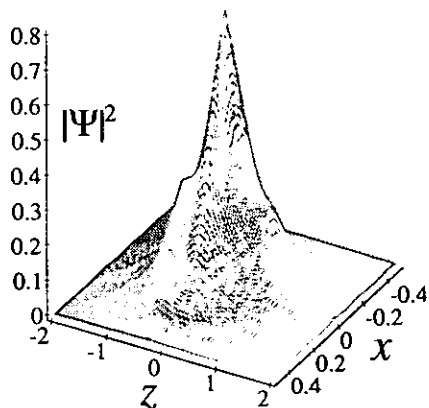


Figura 5.1: (a) Distribución electrónica para  $B = 10^{11}$  Gauss.

aprecian los efectos de los protones laterales como dos prominencias. Cuando el campo magnético aumenta, ya solo se nota el máximo en el centro de sistema como una señal de mayor probabilidad de localizar ahí al electrón.

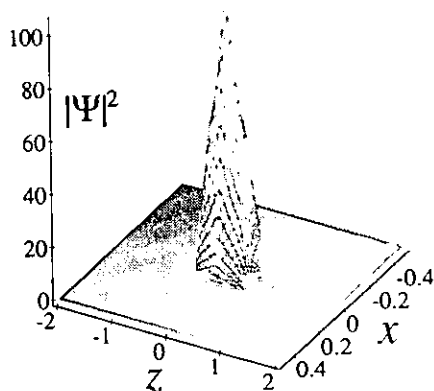


Figura 5.1: (b) Distribución electrónica para  $B = 10^{12}$  Gauss.

Si se va incrementando el campo magnético es menos probable encontrar al electrón cerca de los núcleos de los extremos y es más plausible que se encuentre próximo al protón central.

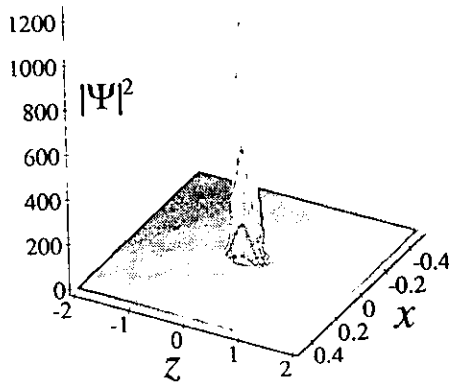


Figura 5.1: (c) Distribución electrónica para  $B = 10^{13}$  Gauss.

### 5.2.2 Energía del Electrón

En las figuras (5.2) se indican los valles y en las figuras (5.3) los perfiles de estos valles como función del campo magnético. Los puntos en cada valle se obtienen fijando una de las distancias  $R_+$  o  $R_-$  y minimizando con respecto a la otra y a los demás parámetros. Se puede ver como el mínimo de la energía se encuentra cerca de la posición de equilibrio, cuando  $R_+ = R_-$  y como aumenta lejos de ella.



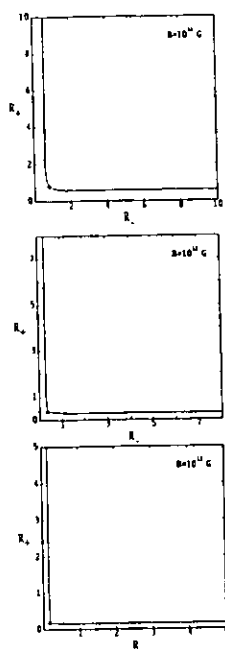


Figura 5.2: Valles en las superficies de energía potencial electrónica para campos magnéticos  $B = 10^{11}$  Gauss,  $B = 10^{12}$  Gauss y  $B = 10^{13}$  Gauss. La posición del mínimo está indicada por un punto.

Calculando la curvatura del valle en el mínimo uno puede estimar la energía vibracional en el estado base y checar si el pozo es lo bastante profundo como para conservar un nivel de energía que sea ligado.

Los resultados de los cálculos mostraron que para campo magnético  $B = 10^{11}$  Gauss, el pozo no es tan hondo para conservar la energía del estado base; esto puede ocurrir si, como se explicó en la introducción, la energía vibracional hace que el ion  $H_3^{++}$  no sea estable.

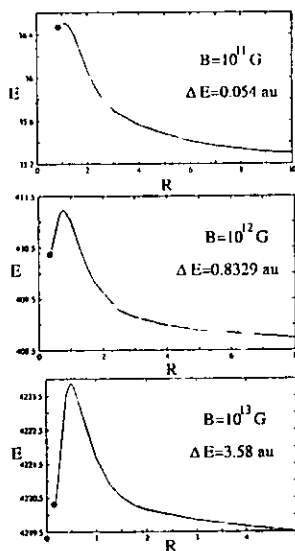


Figura 5.3: Perfil de los valles como función del campo magnético.

La energía para campos magnéticos del orden de  $10^{12} - 10^{13}$  Gauss adquiere otra dimensión, para estos valores del campo el pozo es lo suficientemente profundo y el ion tiene una vida media en un estado ligado.

### 5.2.3 Pozos de Potencial

También en las figuras 5.4 se muestran la forma del pozo de potencial al que está sujeto el electrón. En ellas se gráfica la energía del ion  $H_3^{++}$  en una superficie dada por  $R_-$  y  $R_+$ .

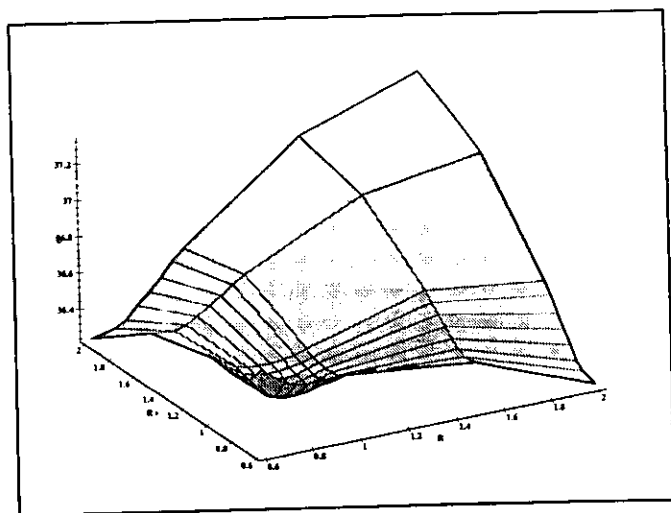


Figura 5.4: (a) Pozo de energía potencial electrónica del estado base para  $B = 10^{11}$  Gauss, como función de  $R_-$  y  $R_+$ .

El estado estable del ion molecular ocurre a la distancia en equilibrio, en las figuras se nota el mínimo para la energía y cómo alrededor de este punto la energía aumenta. Se espera que no en todos lados la energía aumente sin parar, sino que para algunas direcciones llegue hasta unos máximos y luego comience a disminuir, lo que indicaría que el ion molecular  $H_3^{++}$  puede disociarse a otra configuración más estable.

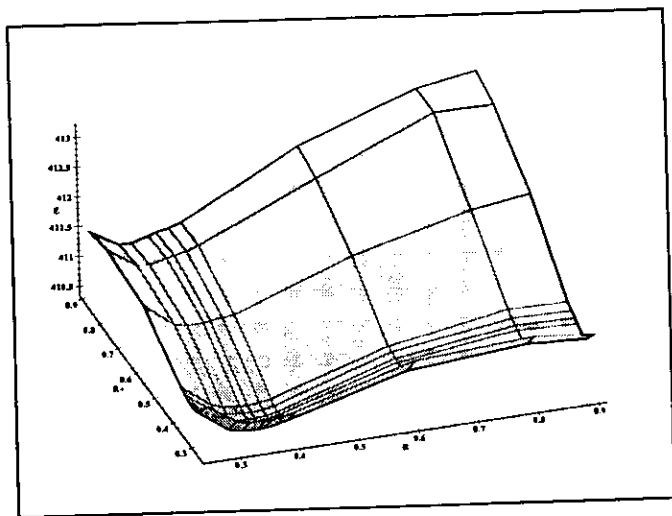


Figura 5.4: (b) Pozo de energía potencial electrónica del estado base para  $B = 10^{12}$  Gauss, como función de  $R_-$  y  $R_+$ .

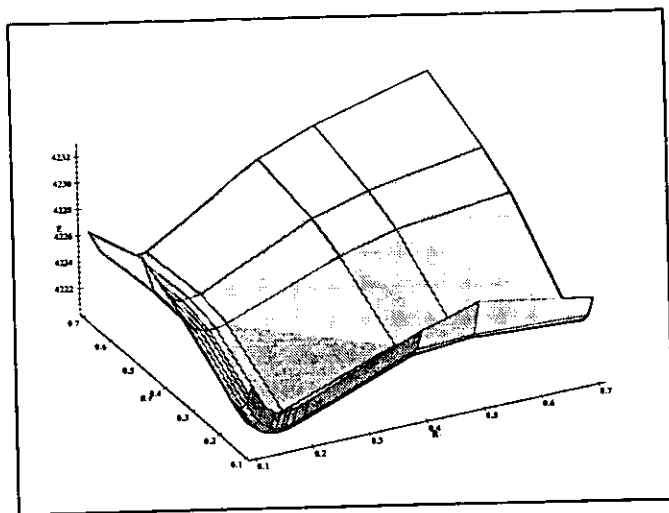


Figura 5.4: (c) Pozo de energía potencial electrónica del estado base para  $B = 10^{13}$  Gauss, como función de  $R_-$  y  $R_+$ .

Para hacer estas gráficas y las de los contornos, se tuvo que considerar que el sistema no estaba en la configuración donde  $R_- = R_+ = R_{eq}$ . Por tanto utilizamos el programa que comprende las 10 regiones de integración del cual se habló en el Capítulo 4.

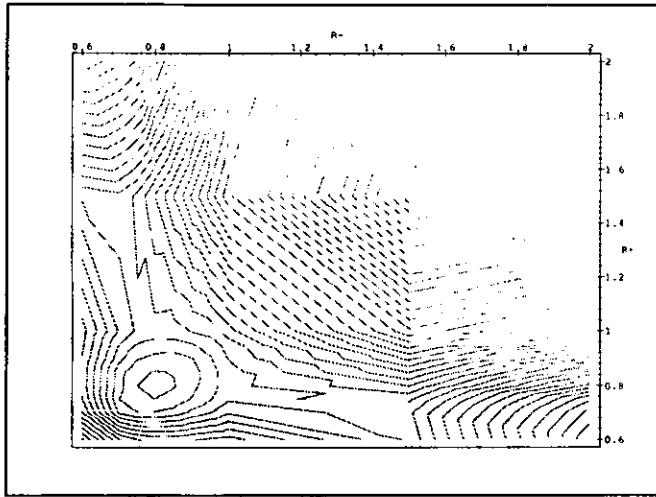


Figura 5.5: (a) Diagrama de contornos del pozo de energía potencial del estado base para  $B = 10^{11}$  Gauss, como función de  $R_-$  y  $R_+$ .

Las gráficas 4.5 muestran los contornos de energía para los distintos campos que ocupamos.

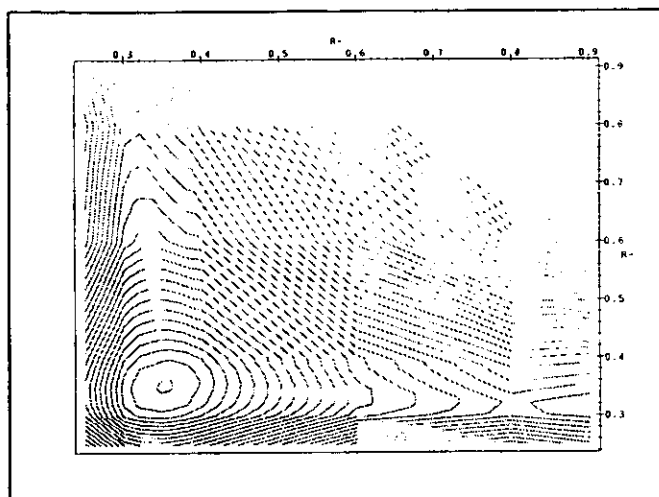


Figura 5.5: (b) Diagrama de contornos del pozo de energía potencial electrónica del estado base para  $B = 10^{12}$  Gauss, como función de  $R_-$  y  $R_+$ .

En estas gráficas de contornos se aprecia al pozo visto desde arriba, con lo que se muestra la simetría en las líneas. El mínimo en la energía es indicado claramente por los contornos.

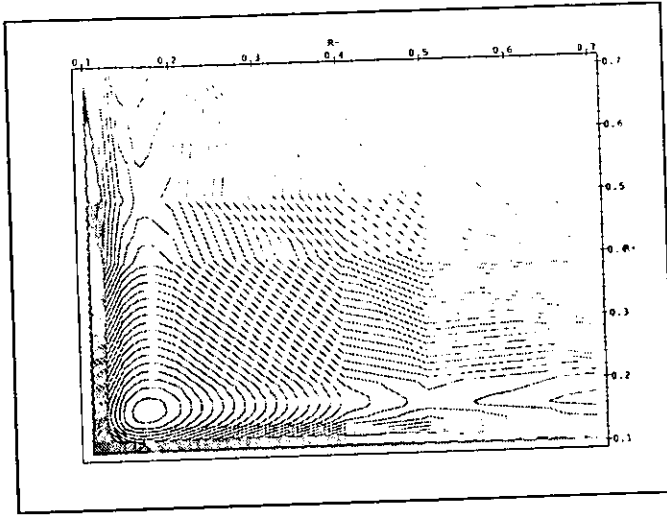


Figura 5.5: (c) Diagrama de contornos del pozo de energía potencial electrónica del estado base para  $B = 10^{13}$  Gauss, como función de  $R_-$  y  $R_+$ .

#### 5.2.4 Tamaño del Sistema

La siguiente tabla nos da una idea de la dependencia del tamaño del sistema cuando variamos el campo magnético externo. Se muestran los casos para  $H_2^+$  y  $H_3^{++}$ . A  $L = R_- + R_+$  lo consideramos como el tamaño *natural* del sistema. Es interesante comparar este tamaño natural con el valor de expectación de la posición del electrón,

$$\langle |z| \rangle = \frac{\int_V |z| \psi^2 d\mathbf{r}}{\int_V \psi^2 d\mathbf{r}}, \quad (5.1)$$

ahí se puede ver que éste es siempre mucho menor que  $L$ . No se sabe de las razones físicas para este tipo de relación.



Las últimas figuras dan una idea del tamaño de los iones  $H_2^+$  y  $H_3^{++}$  comparado con las nubes electrónicas en ambos sistemas.

| B (Gauss) | $H_2^+$               |         | $H_3^{++}$            |                 |
|-----------|-----------------------|---------|-----------------------|-----------------|
|           | $\langle  z  \rangle$ | $L = R$ | $\langle  z  \rangle$ | $L = R_+ + R_-$ |
| $10^{11}$ | 0.312                 | 0.593   | 0.432                 | 1.606           |
| $10^{12}$ | 0.174                 | 0.283   | 0.219                 | 0.692           |
| $10^{13}$ | 0.107                 | 0.147   | 0.121                 | 0.330           |

Tabla 11. Tamaños naturales de dos distintos sistemas para campos magnéticos diferentes.

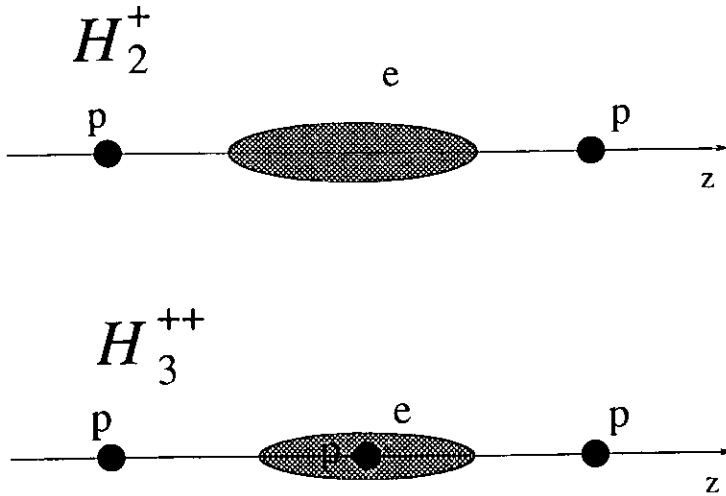


Figura 5.6: Nubes electrónicas para dos sistemas de un electrón.

## Conclusión

Todos los cálculos se hicieron empleando el Método Variacional usando funciones de prueba que intentan describir al sistema y cuyos potenciales correspondientes exhiben las mismas singularidades que el potencial de Coulomb.

Este método ha sido especialmente útil para estudiar al ion molecular  $H_3^{++}$  y descubrir si es posible su existencia en campos magnéticos del orden de  $10^{11} - 10^{13}$  Gauss, bajo las consideraciones de que se tiene la Aproximación de Born-Oppenheimer y se trabaja en la configuración cuando  $R_- = R_+$ , donde claramente se tiene la energía mínima pues otra configuración ocasionaría movimientos de precesión aumentando la energía.

Para que sea posible que una molécula de este tipo exista y sea estable, se necesitan campos magnéticos muy grandes, imposibles de conseguir en un laboratorio terrestre. De hecho sólo para campos magnéticos iguales o mayores a  $10^{12}$  Gauss, el ion molecular puede llegar a tener una vida media alta; para  $B = 10^{11}$  Gauss, el pozo de potencial no es lo suficientemente profundo como para mantener un estado de energía estable. En este caso, la energía vibracional del electrón es más grande que su potencial de ionización, de esta manera, es posible que la energía de la molécula rebase el máximo de la energía electrónica; entonces, cabe la posibilidad de que el electrón pueda escapar de un estado ligado.

Es claro que para todos los campos magnéticos considerados hay un mínimo en la energía del estado base, si estos mínimos los comparamos para los mismos campos para el átomo de hidrógeno y el ion molecular  $H_2^+$ , notamos que la energía del estado base del ion  $H_3^{++}$  es siempre menor que la del átomo de hidrógeno pero mayor que la del ion del hidrógeno. Esto quiere decir que puede haber una disociación del ion  $H_3^{++}$  al ion  $H_2^+$  pues la energía tiene un límite que es precisamente la energía mínima correspondiente al ion  $H_2^+$ . Así, no es posible que ocurra la separación de nuestro ion al sistema  $H + p + p$ .

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

## Apéndice A

### Unidades

A lo largo de esta exposición usaremos unidades atómicas (a.u.). Con estas unidades es más fácil trabajar, pues como ya se hizo notar, los ordenes de magnitud para campos magnéticos intensos son muy grandes.

- La unidad de carga eléctrica es la carga del electrón  $e = 1.6 \times 10^{-20} C$ .
- La unidad de masa es la masa del electrón  $m_e = 9.108 \times 10^{-28} gm$ .
- Para la longitud, la unidad es el radio de la primera órbita de Bohr,  $a_0 = \hbar^2/m_e e^2 = 5.2917 \times 10^{-9} cm$ .
- La unidad de velocidad resulta ser la velocidad del electrón en la primera órbita de Bohr  $v_e = e^2/\hbar = \alpha c = 2.1877 \times 10^8 cm/s$ , de donde se puede ver que si tomamos  $c = 1$ , entonces  $\alpha = 1/137.037$ , llamada la constante de estructura fina.
- La unidad de campo eléctrico es  $e/a_0 = 5.142 \times 10^9 Volt/cm$ .

- La unidad de energía atómica es dos veces el Rydberg, o sea, dos veces el potencial de ionización del átomo de hidrógeno,  $2Ry = e^2/a_0 = me^4/\hbar^2 = 4.359 \times 10^{-11} \text{erg}$ .
- Y la unidad que se emplea para el campo magnético es  $B_0 = m_e^2 e^3 c / \hbar = 2.3505 \times 10^9 \text{Gauss}$ . La unidad  $B_0$ , es el campo  $B$  para el cual la longitud magnética  $l = (\hbar c / eB)^{1/2}$  (radio ciclotrónico para un electrón en el nivel más bajo de Landau), es igual al radio de Bohr  $a_0$ . En  $B = B_0$ , la energía de Landau  $\hbar\omega_c$ , con  $\omega_c = eB/mc$  la frecuencia ciclotrónica, es igual a dos veces la energía de Rydberg.

# Apéndice B

## Métodos de Aproximación

### B.1 Aproximación de Integrales

Las Integrales definidas pueden ser aproximadas a través de un procedimiento conocido como *cuadratura numérica*, reemplazando la integral por una suma apropiada, esto es,

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n a_k f(x_k). \quad (\text{B.1})$$

Estas aproximaciones se basan en la interpolación de polinomios. Es decir, dados el valor de una función  $f(x)$  en un conjunto de puntos  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , con frecuencia se requiere saber el valor de la función en valores intermedios a estos puntos. La *interpolación* estima estos valores desconocidos ajustando los parámetros de una función conocida para aproximar el comportamiento local de  $f(x)$ .

Una de las más útiles representaciones de una función utiliza los *polinomios algebraicos*,  $P(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ , donde los coeficientes son constantes reales y los exponentes son enteros no negativos. La utilidad está en el hecho de que dada una función continua definida en un intervalo cerrado, existe un polinomio algebraico el cual es tan cercano a la función como se desee ( Teorema de Weierstrass).

## B.2 Interpolación de Lagrange

Los polinomios de grado  $n - 1$  que pasan a través de todos los  $n$  puntos  $(x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), \dots, (x_n, f(x_n))$ , están dados por

$$P(x) = \sum_{k=1}^n \prod_{i=1, i \neq k}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} = \sum_{k=1}^n f(x_k) L_{nk}(x), \quad (\text{B.2})$$

donde  $L_{nk}$  se llaman *Polinomios de interpolación de Lagrange*. Con una de estas interpolaciones se tiene

$$a_x = \int_a^b L_{nk}(x_k) dx. \quad (\text{B.3})$$

## B.3 Cuadratura Gaussiana

La *Cuadratura Gaussiana* es un método en el cual el error en la aproximación es minimizado por la libertad de escoger los puntos de la abscisa y los coeficientes. Utilizando polinomios y escogiendo las abscisas en las raíces de estos polinomios en el intervalo considerado, se puede demostrar que los coeficientes pueden ser óptimamente escogidos resolviendo un conjunto de ecuaciones lineales. Esto es, una Cuadratura Gaussiana aproxima la integral definida por la función de peso apropiada a el polinomio ortogonal usado como:

$$\int_a^b W(x) f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n a_k f(x_k), \quad (\text{B.4})$$

donde la función es evaluada en los puntos dados por las raíces de los polinomios ortogonales.

Puesto que los polinomios de Lagrange son ortogonales en el intervalo  $[-1, 1]$  respecto a la función de peso  $W(x) = 1$ , esta ecuación tiene una forma simple, conduciendo a la cuadratura de Gauss-Lagrange.

Si  $f(x)$  contiene como un factor la función de peso de otro de los polinomios ortogonales, la cuadratura de Laguerre o de Gauss-Chebyshey debería ser usada.

## Apéndice C

# Tipos de Enlaces en Física Molecular

Podemos intentar describir a las moléculas usando mecánica cuántica. Tomemos como ejemplo el ion  $H_2^+$ . Suponemos que los centros están en reposo y que el ion se ha formado de manera que alcanzó el estado estable.

Primero pensamos en el electrón en el estado  $\psi_A(\mathbf{r})$  alrededor del núcleo A, y el resto del tiempo alrededor del núcleo B, lo que se describe con  $\psi_B(\mathbf{r})$ .

La función de onda total será

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_A(\mathbf{r}) + \psi_B(\mathbf{r}), \quad (\text{C.1})$$

olvidándonos de la constante de normalización.

Entonces se tiene uno de los núcleos sólo y un ion positivo o negativo, es decir, un enlace iónico.

A las funciones así construidas mediante una combinación lineal de orbitales atómicos se les llama *orbitales moleculares* y al método descrito como *Combinación Lineal de Orbitales Moleculares* (LCAO).

Otro punto de vista alterno fue propuesto por W. Heitler y F. London y ve a la molécula como una estructura formada por átomos. Ahora imaginemos que en la molécula  $H_2$ , en promedio, alrededor de cada núcleo se encuentra uno de los electrones orbitales; la mitad de tiempo el electrón 1 se encontrará más próximo al núcleo A que al B, formando el orbital atómico  $\psi_A(1)$ , mientras que el otro electrón estará ligado al núcleo B, en el estado  $\psi_B(2)$ ; este estado compuesto se describe con la función de onda

$$\psi_I = \psi_A(1)\psi_B(2), \quad (\text{C.2})$$

el resto del tiempo los electrones habrán intercambiado sus papeles y el sistema queda descrito por la función de onda

$$\psi_{II} = \psi_B(1)\psi_A(2). \quad (C.3)$$

Por lo tanto, la función de onda que describe estadísticamente a la molécula durante todo el tiempo se puede aproximar con

$$\psi(1,2) = \psi_I + \psi_{II}, \quad (C.4)$$

éste es un acoplamiento covalente.



## Bibliografía

- [1] B.B. Kadomtsev, V.S. Kudryavtsev, *Pis'ma ZhETF* **13**, 15, 61 (1971);  
*Sov. Phys. JETP Lett.* **13**, 9, 42 (1971) (Traducción Inglesa)  
*ZhETF* **62**, 144 (1972);  
*Sov. Phys. JETP* **35**, 76 (1972) (Traducción Inglesa)
- [2] M. Ruderman, *Phys. Rev. Lett.* **27**, 1306 (1971);  
in IAU Symp. 53, *Physics of Dense Matter*, ed. by C.J.Hansen  
(Dordrecht: Reidel, 1974) p.117
- [3] L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*,  
tercera edición. (Pergamon, Oxford, 1977).
- [4] D. Lai, E. Salpeter, *Phys. Rev.* **A52**, 2611 (1995); *ibid* **A53**, 152 (1995)
- [5] D. Lai, E. Salpeter, *Astrophys. Journ.* **491**, 270 (1997)
- [6] J.-C. Lopez, P.O. Hess, A. Turbiner, *Phys. Rev.* **A56**, 4496 (1997)  
(astro-ph/9707050)
- [7] A.V. Turbiner, *Usp. Fiz. Nauk.* **144**, 35 (1984);  
*Sov. Phys. Uspekhi* **27**, 668 (1984) (Traducción Inglesa).
- [8] A.V. Turbiner, *Soviet Phys. - Yad. Fiz.* **46**, 204 (1987);  
*Sov. Journ. of Nucl. Phys.* **46**, 125 (1987) (Traducción Inglesa).
- [9] A.V. Turbiner, *Pisma ZhETF* **38**, 510 (1983);  
*Soviet Phys. - JETP Lett.* **38**, 618 (1983) (Traducción Inglesa).
- [10] A.V. Turbiner, Tesis de Doctor en Ciencias, ITEP, Moscow, 1989 (Sin publicar)

- [11] A. Turbiner, J.C. López, U. Solis, 'Predicted existence of  $H_3^{++}$  molecular ions in strong magnetic fields', *JETP Letters*, **69**, 844-850 (1999).
- [12] J.C. López and A. Turbiner, 'One electron linear systems in a strong magnetic field', *Phys. Rev. A*, Agosto 2000 (en prensa).
- [13] J.C. López, ' $H_3^{2+}$  molecular ion in strong magnetic field: a triangular configuration', *Rev. Mex. Fís*, **46**, 2068 (2000).