

A Molécula H_2^+ em Campos Magnéticos Superintensos*

Celso P. de Melo[†], Lúcia C. de Melo[†], Tapan K. Das e Ricardo Ferreira

Departamento de Física, U.F.Pe., Cidade Universitária
Recife, Pe – Brasil

Humberto S. Brandi

Departamento de Física, PUC/RJ
Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Luiz Carlos M. Miranda

Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP
Campinas, SP – Brasil

(Recebido em 20/10/77)

Nos últimos cinco anos cresceu enormemente o interesse dos físicos e astrofísicos pelas propriedades de átomos em campos magnéticos superintensos. Estes são definidos como situados no intervalo 10^8 Gauss $\leq B \leq 10^{13}$ Gauss. A razão deste interesse é que foi descoberto que campos magnéticos dessas ordens de grandeza existem em certas classes de estrelas, tais como as *anãs brancas* e, especialmente, as *estrelas de neutrons (pulsares)*. Uma revisão detalhada do problema de átomos em campos magnéticos superintensos apareceu recentemente no *Reports on Progress in Physics*¹.

Nosso interesse no problema surgiu da possibilidade de se trabalhar em conjunto, reunindo estudiosos de física do estado sólido, astrofísica e química quântica. Nos sólidos, a massa do elétron m fica substituída por uma massa efetiva m^* , que pode ser uma ou mesmo duas ordens de grandeza menor do que m ; nessas circunstâncias, condições de altos campos magnéticos podem ser duplicadas com campos mais baixos. Depois de alguma experiência de trabalho com o átomo de H, descrito por um método variacional², resolvemos estudar a molécula H_2^+ nessas condições físicas extremas.

Na presença de campos magnéticos muito fortes o Hamiltoniano do sistema H_2^+ é:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \omega_L L_Z + \frac{1}{2} m \omega_L^2 r^2 \sin^2 \theta - \frac{e^2}{r_a} - \frac{e^2}{r_b} + \frac{e^2}{r_{ab}} \quad (1)$$

onde $\omega_L = \frac{eB}{2mc}$ é a frequência ciclotrônica do electron e θ é o ângulo entre o vetor de posição do electron, r , e o eixo do campo magnético B . Isto significa que estão presentes não apenas o termo de Zeeman mas os termos magnéticos da energia cinética:

$$\hat{H} = \hat{T} - \frac{e^2}{r_a} - \frac{e^2}{r_b} + \frac{e^2}{r_{ab}} \quad (2)$$

e

$$\hat{T} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} + \frac{e\hat{A}}{c} \right)^2 \quad (3)$$

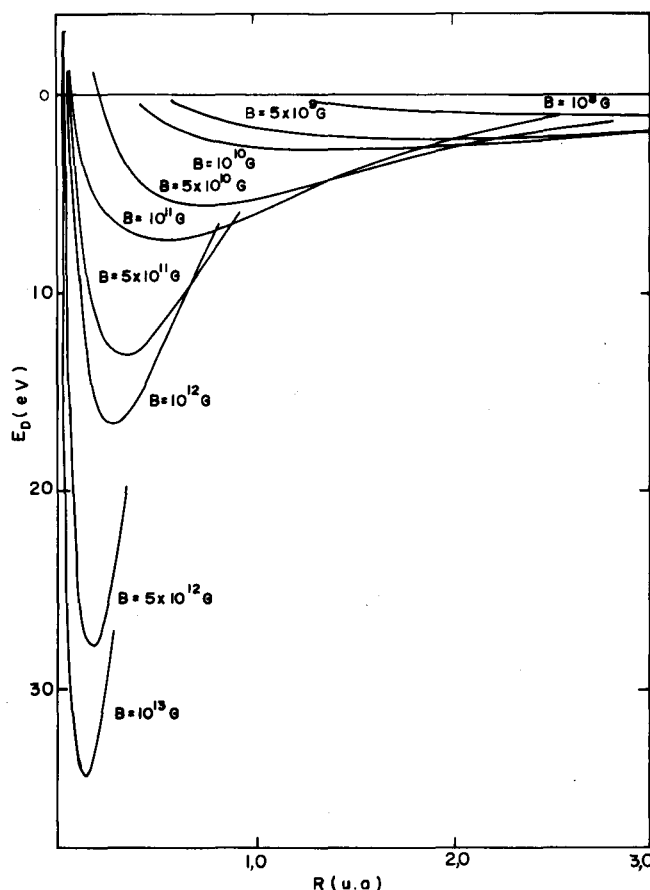


Fig. 1. Curvas de potencial da molécula H_2^+ em diferentes campos magnéticos. As curvas representam na realidade os valores de $E(H_2) - E(H) = D_E$.

onde \hat{A} é o operador do vetor potencial:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (4)$$

Na primeira parte do trabalho³ estudamos a região superior do nosso intervalo de campo magnético, $10^{10} \text{ G} \leq B \leq 10^{13} \text{ G}$. A função variacional finalmente escolhida foi de forma $\Phi_{\eta,\nu}(\rho, \phi) f(z)$, onde $\Phi_{\eta,\nu}(\rho, \phi)$ é um orbital de Landau⁴ e $f(z)$ é uma gaussiana ao longo de z , o eixo do campo magnético. Como indicado na Figura 1, foram obtidas curvas de $E_{H_2^+}$ em função de R (distância internuclear) que apresentam mínimos acentuados, desde que se trabalhe na faixa de $10^9 \text{ G} \leq B \leq 10^{13} \text{ G}$. Como resultado da diminuição da distância internuclear de equilíbrio ($R_e = 0,1a_0$ para $B = 10^{13} \text{ G}$; $R_e = 0,3a_0$ para $B = 10^9 \text{ G}$) e do aumento na constante de força k , a molécula H_2^+ pode vibrar com frequências muito altas, indo até a faixa dos raios-X moles (Figura 2). Como resultado do confinamento magnético do movimento do elétron, a "nuvem eletrônica" correspondente à densidade de carga vai se alongando na direção z , como mostra a Figura 3. Pela Figura 1 se observa que para valores de $B < 10^9 \text{ G}$ a função variacional adotada não conduz a um mínimo na curva $E_{H_2^+}(R)$. Para campos magnéticos no intervalo $10^8 \text{ G} \leq B \leq 10^{10} \text{ G}$

tada não conduz a um mínimo na curva $E_{H_2^+}(R)$. Para campos magnéticos no intervalo $10^8 \text{ G} \leq B \leq 10^{10} \text{ G}$ usamos uma outra função de onda variacional⁵. Trata-se simplesmente da combinação linear

$$\Psi = c_a 1s'_a + c_b 1s'_b \quad (5)$$

onde $1s'_a$ e $1s'_b$ são orbitais $1s$ do átomo de hidrogênio tais como usados por Rajagopal *et al*⁶ no seu tratamento

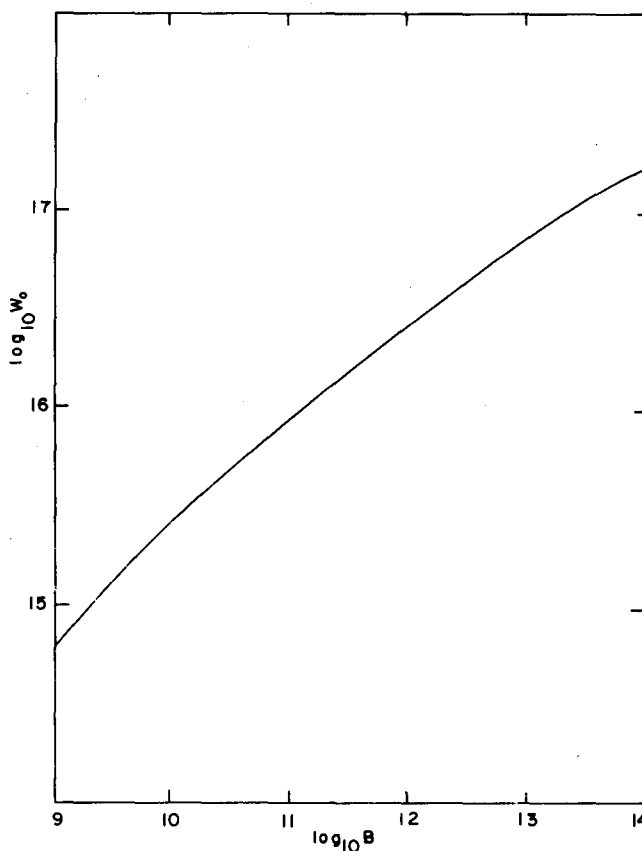


Fig. 2. Variação da frequência de vibração (W_0) com o campo magnético (B).

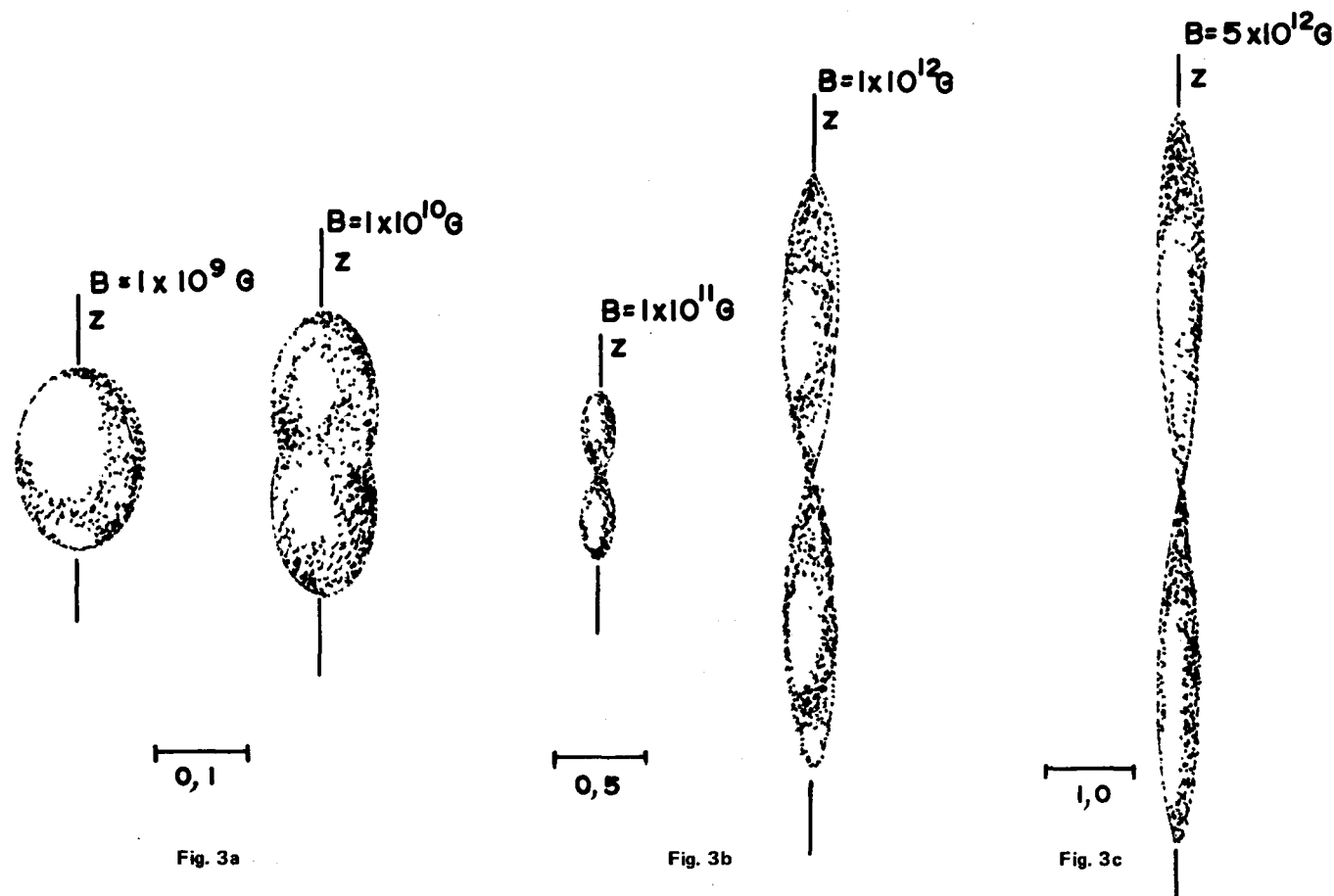


Fig. 3. Densidade eletrônica na molécula H_2^+ em função de B .

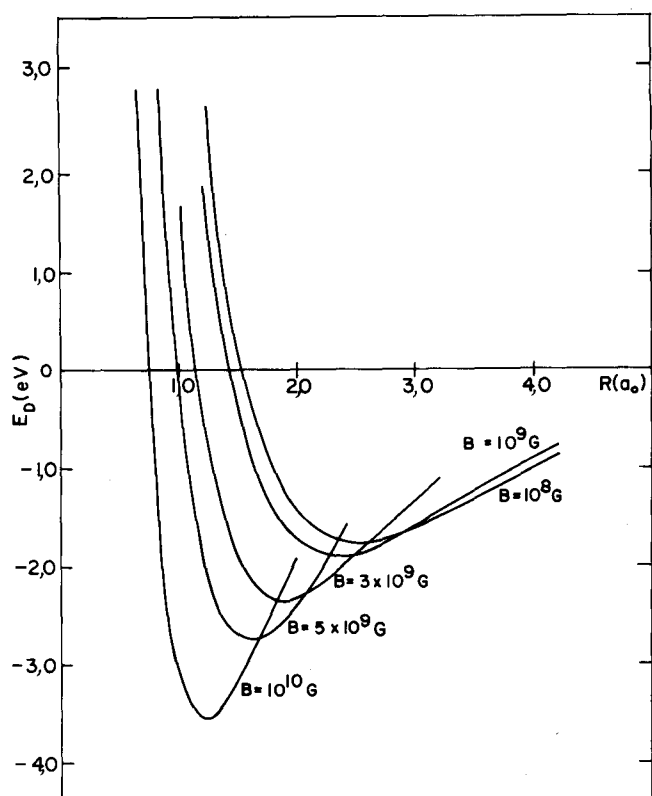


Fig. 4. Curvas de potencial da molécula H_2^+ no intervalo $10^8 G \leq B \leq 10^{10} G$.

do átomo de H em campos magnéticos muito fortes:

$$1s' = \beta^{3/2} R_{10}(\beta, r) Y_{00}(\theta, \phi) \quad (6)$$

onde β é um parâmetro variacional escolhido para que minimize E_H na presença de B . A função (5) é essencialmente uma C.L.O.A. com os orbitais atômicos contraídos pelo campo B . A Figura 4 mostra as curvas de $E_{H_2^+}(R)$ neste segundo caso. A contração em R_e é observada, mas as frequências de vibração caem na faixa do visível e do U.V. vizinho (Figura 5).

O estudo da molécula H_2^+ em campos magnéticos superintensos foi retomado por outros grupos⁷, e sua extensão para sistemas mais complicados está à vista. Sua importância para a astrofísica pode ser considerável; no presente momento os valores de B analisados não podem ainda

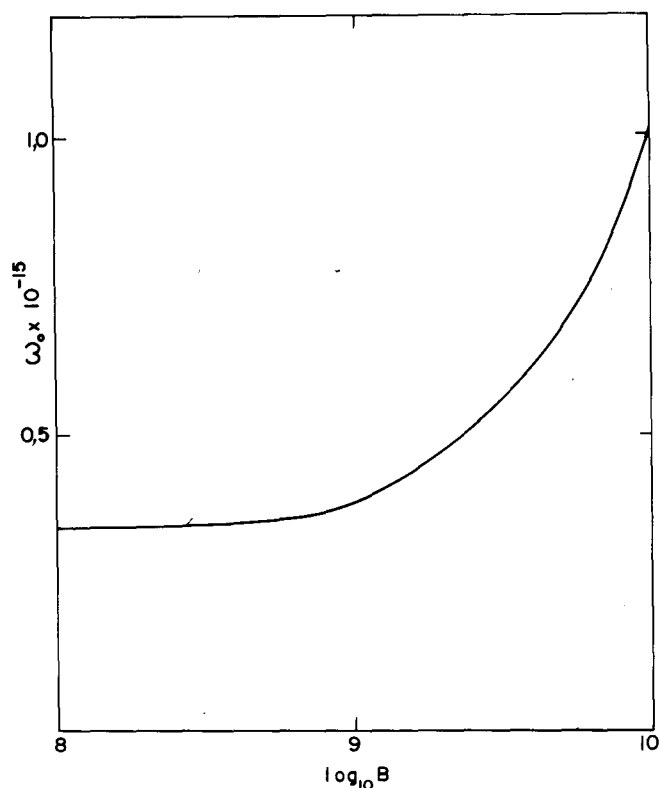


Fig. 5. Variação da frequência de vibração em função de B .

ser obtidos experimentalmente nos laboratórios de magnetismo.

* Trabalho apoiado financeiramente pelo CNPq, CAPES, BNDE e FINEP.

+ Presentemente na Universidade da Califórnia em Santa Barbara, com bolsa de Doutorado do CNPq.

- ¹ R. H. Garstang, *Reports Prog. Phys.*, **40**, 105 (1977).
- ² R. R. dos Santos e H. S. Brandi, *Phys. Rev. A* **13**, 1970 (1976).
- ³ C. P. de Melo, R. Ferreira, H. S. Brandi e L. C. M. Miranda, *Phys. Rev. Letters*, **37**, 676 (1976).
- ⁴ L. D. Landau e E. M. Lifshitz, "Quantum Mechanics", Pergamon Press, Oxford, 1965, p. 421.
- ⁵ L. C. de Melo, T. K. Das, R. Ferreira, L. C. M. Miranda e H. S. S. Brandi, *Phys. Rev.*, no prelo.
- ⁶ E. R. Smith, R. J. W. Henry, G. L. Surmeliam, R. F. O'Connell e A. K. Rajagopal, *Phys. Rev.*, **D6**, 3700 (1972).
- ⁷ Y. Nogami (McMaster University, Canada), comunicação particular.

NOVIDADES CIENTÍFICAS

REARRANJOS BIOMIMÉTICOS EM NEOLIGNANAS*

Cacilda J. Aiba, Marden A. de Alavarenga, Óscar Castro C.,
João B. Fernandes, Otto R. Gottlieb, Frida M. Pagliosa e Massayoshi Yoshida
Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Cxa. Postal 20.780

São Paulo, SP - Brasil
(Recebido em 17/10/77; 18/11/77)

Raimundo Braz Filho e Roberto Figliuolo

*Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro,
Município de Itaguaí, RJ - Brasil*

Estrutura e química de neolignanas em que as duas unidades em $C_6.C_3$ são ligadas pelo menos através das posições 8.8' (1, 44 representantes descritos) e 3.3' (2, 3 repr. desc.) são conhecidas há tempos. Em oposição data de

época recente a descoberta de neolignanas ostentando ligações 8.1' (47 repr. desc.) e 8.3' (23 repr. desc.)¹. A estes grupos pertencem hidrobenzofuranos, biciclo [3, 2, 1] octanos e um espiro [5, 5] undecano, tais como, na série²