



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Estudio de la molécula del agua en presencia de un campo
eléctrico

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

José de Jesús Hernández Higuera

Asesorado por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Puebla Pue.
Mayo de 2024



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Estudio de la molécula del agua en presencia de un campo
eléctrico

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

José de Jesús Hernández Higuera

Asesorado por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Puebla Pue.
Mayo de 2024

Título: Estudio de la molécula del agua en presencia de un campo eléctrico

Estudiante: JOSÉ DE JESÚS HERNÁNDEZ HIGUERA

COMITÉ

Dr. Javier Miguel Hernández López
Presidente

Dr. Héctor Novales Sánchez
Secretario

Dr. Jorge Velázquez Castro
Vocal

Dr. Mario Rodríguez Cahuantzi
Vocal

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández
Asesor

Al pequeño niño que siempre se hizo muchas preguntas sobre el mundo que lo rodeaba. Lo estoy logrando, campeón, cada día estoy más cerca de ser un científico.

Agradecimientos

A mi asesor, el Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández, por apoyarme con sus consejos para la realización de esta tesis, así como por motivarme a mantenerme haciendo un buen trabajo durante todo este proceso, así como por el tiempo y la paciencia dedicados para tratar mis dudas, revisiones y cuestionamientos sobre los temas relacionados a este escrito.

A mis amigos y compañeros de la carrera, Abraham, Max y Pichardo, por el apoyo, su amistad, los momentos tan divertidos y las risas que pasamos juntos los cuales, sin duda, hicieron mucho más ligera la carrera en varios momentos. Así como también a mis amigos Leo y Juanpa por incluirme dentro de sus videoconferencias durante la pandemia para estudiar y resolver tareas juntos; esa etapa habría sido mucho más difícil sin su ayuda.

A mi novia, Leslie, por estar conmigo durante la mayor parte de este trabajo y prácticamente la mitad de la carrera, acompañarme mientras trabajaba en la biblioteca, llevarme algo de comer y, sobretodo, por escucharme cada vez que le platicaba sobre mis avances o sobre algunos planteamientos que me había hecho y preguntarme por varias cosas que me ayudaron a buscar mejores formas de plantearme los problemas que se me presentaron.

A mi familia por permitirme tener todos los medios posibles para ingresar, permanecer y concluir la carrera de física, así como por preguntarme de vez en cuando qué significaban esos garabatos que tenía en mi pizarrón. Agradezco especialmente a mis abuelitas que siempre me bendijeron para que yo pudiese superar las dificultades, y a mi fallecido abuelo Rafael, quién aprovechaba para recordarme la importancia del camino de la educación cada vez que me veía.

A todos ustedes, muchas gracias.

Índice general

Resumen	IX
1. Introducción	1
1.1. Antecedentes	3
1.1.1. Exposición a la radiación electromagnética no ionizante	3
1.1.2. Estudio de la molécula del agua	4
1.1.3. Teléfonos móviles	6
1.1.4. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo	7
2. Metodología	13
2.1. Sistema sin degeneración	14
2.2. Sistema degenerado	14
3. La molécula del agua en un campo eléctrico	17
3.1. Sistema no degenerado	17
3.1.1. Eigenestados del sistema no degenerado	19
3.2. Sistema con degeneración	20
4. Discusión y conclusión	27
4.1. Sistema sin degeneración	27
4.2. Sistema con degeneración	27
4.3. Interacción del campo eléctrico de un teléfono celular con la molécula del agua . .	28
4.4. Conclusiones	29
A. Consideraciones sobre el sistema de referencia	31
B. Teorema de las integrales de senos y cosenos	33
C. Teorema para los números cuánticos	35
D. Análisis para las otras dos direcciones espaciales	41

Resumen

El incremento acelerado en el uso de teléfonos móviles desde la década de los 90's hasta la fecha, ha causado cierta inquietud en algunas personas, llevándolos a que se pregunten si este tipo de tecnología pudiese llegar a causar algún efecto que pueda resultar perjudicial para la salud pública. Al respecto se han llevado a cabo estudios y revisiones, sin embargo, estas no han sido concluyentes para determinar si, en efecto, existe algún riesgo al usar estos aparatos. En concreto, todas estas investigaciones han estado enfocadas en verificar si existe algún tipo de relación entre la radiofrecuencia de estos teléfonos y la formación de tumores cerebrales como consecuencia de su uso constante.

En este trabajo, se buscó analizar, por medio de la mecánica cuántica, si los campos eléctricos asociados a la radiofrecuencia de los teléfonos móviles son suficientes para alterar significativamente la molécula del agua, la cual se encuentra presente en la mayor parte de nuestro cuerpo. Para realizar el análisis se utilizó como herramienta la teoría de perturbaciones, de modo que se consideró al campo eléctrico emitido por los teléfonos como una perturbación a la cual se expone el sistema principal, la molécula del agua. Los resultados de este análisis, hecho tanto para las energías con degeneración como para las que no la tuviesen, sugieren que la magnitud de los campos eléctricos asociados a la radiofrecuencia de los teléfonos móviles no altera significativamente los eigenvalores ni los eigenestados de la molécula del agua y, por lo tanto, no son capaces de causar algún efecto sobre la salud.

Palabras clave: *Teoría de perturbaciones, campo eléctrico, molécula de agua, mecánica cuántica.*

Capítulo 1

Introducción

El estudio de los campos electromagnéticos ha sido de gran importancia para la física desde el siglo XIX, donde las investigaciones referentes a la teoría electromagnética se intensificaron, desde la invención de la batería, por Alessandro Volta, hasta la unificación de las investigaciones experimentales hechas al respecto realizada por James Clerk Maxwell en 1864 (y su posterior confirmación experimental al cargo de Heinrich Hertz en 1887) [1]. Dicha unificación consistió en tomar los resultados obtenidos en cuanto al estudio de los campos eléctricos y magnéticos para mostrar que estos conformaban un mismo fenómeno: el electromagnetismo [2]. Un campo electromagnético, entonces, puede entenderse como el resultado de la interacción mutua entre campos eléctricos y campos magnéticos. Este cuenta con su propia existencia en el espacio de manera independiente a las cargas o corrientes con las cuales pudiese estar relacionado [3]. Por sí solo, el término “campo” se utiliza para describir una distribución de fuerza que atraviesa una región del espacio. De esta forma, el campo eléctrico correspondería a la fuerza por unidad de carga eléctrica, y el campo magnético a la fuerza ejercida sobre un dipolo magnético [1].

Como consecuencia de la relevancia que obtuvo el estudio de los campos electromagnéticos, desde el siglo XX hasta nuestros días hemos presenciado un intenso aumento de aparatos tecnológicos que exigen una gran demanda de energía eléctrica, así como los distintos cambios en nuestro estilo de vida para poder adaptar estos aparatos a nuestra vida cotidiana. Contemplando esto, es más que evidente que las fuentes artificiales que emiten campos electromagnéticos y, en consecuencia, nuestra exposición a estos también ha ido en aumento [4]. Actualmente, estamos totalmente rodeados de aparatos tales como televisores, radios, módems de internet inalámbrico, hornos de microondas, sensores, teléfonos celulares, audífonos inalámbricos, la señal bluetooth, la misma corriente eléctrica y un largo etcétera; podemos encontrar emisores de campos electromagnéticos a casi cualquier lado que miremos.

De todos los aparatos mencionados anteriormente, existe uno cuyo uso se ha ido extendiendo en la sociedad desde la mitad de la década de los años 80's hasta la actualidad; los teléfonos móviles (y, más recientemente, los teléfonos celulares o inteligentes) [5]. Es claro que, en la actualidad, los teléfonos móviles forman parte de nuestro sistema moderno de telecomunicaciones haciendo que el número de usuarios aumente a nivel mundial en los últimos años, en especial, desde el surgimiento de los teléfonos inteligentes. Ante este hecho, la OMS ha declarado que “es importante investigar, comprender y seguir de cerca las repercusiones que podrían tener en la salud pública” [6].

Dada la demanda de la necesidad de saber si estos aparatos y los campos electromagnéticos asociados con los mismos representan realmente un riesgo para la salud o no, se han llevado a cabo diversos estudios al respecto. Por una parte, se han hecho revisiones para poder conocer las consecuencias a la exposición de los campos electromagnéticos de la radiofrecuencia [5], es decir, aquellos campos asociados con las señales telefónicas. Asimismo, respecto a este mismo tema, se han llevado a cabo experimentos en ratas y ratones para conocer estos mismos efectos [7, 8], los cuales afirman que existe un calentamiento de los tejidos de los animales en cuestión e, incluso, se

pudieron observar algunas lesiones renales.

Ahora, al hacer un enfoque específico en el estudio del potencial riesgo que pudiese tener el uso del teléfono celular, es posible encontrar trabajos interesantes al respecto. Por ejemplo, en el 2010 la Agencia Internacional de la Investigación del Cáncer (IARC, por sus siglas en inglés) llevó a cabo el estudio INTERPHONE, siendo este el “estudio más grande de casos y controles de teléfonos móviles y tumores cerebrales conducido a la fecha que incluye el mayor número de usuarios con al menos 10 años de exposición y la mayor cantidad de horas de uso que cualquier otro estudio” [5]. Dicho estudio concluyó que la evidencia no era determinante para afirmar la asociación entre los campos electromagnéticos de la radiofrecuencia (RF) bajo la cual funcionan los teléfonos móviles y los tumores cerebrales. Por otra parte, también se ha estudiado si es que existe alguna relación entre el uso de esta tecnología y el aumento en el número de casos del cáncer de tiroides, tanto a nivel local [9] como internacional [10]. No obstante, no ha sido posible afirmar que, efectivamente, estos dos fenómenos guarden entre ellos una relación causal. Con base a los estudios que se conocen en el tema, es posible afirmar que en los últimos años este ha sido un tema de profundo interés para conocer qué tan riesgoso podría ser un aparato cuya presencia se ha vuelto de muchísima importancia en nuestros días.

Un problema que pudo notarse en todos los estudios anteriores (al menos en los que fueron hechos en humanos), es que los errores (estadísticamente hablando) los limitaban para poder afirmar que el diagnóstico de los pacientes era, en efecto, una consecuencia del uso prolongado del teléfono móvil. Entonces, ¿cómo es posible estudiar los efectos de esta radiación en el humano de una manera más directa sin tener que recurrir a realizar entrevistas a los pacientes para evitar estos sesgos? Pues bien, se sabe que las células del cuerpo humano están compuestas por distintos elementos, se sabe que el 80 % del organismo es agua [11]. Teniendo esto en cuenta, el estudio de los efectos de la radiación en el cuerpo humano se puede simplificar al estudio de la interacción entre la radiación y la molécula del agua. Si la radiación es lo suficientemente energética como para poder ionizar la molécula del agua, entonces es posible hablar que esta acaba de pasar por un proceso conocido como radiólisis. A su vez, la radiólisis del agua es de particular interés en este trabajo ya que es posible, gracias a su entendimiento, detectar el daño a nivel genómico en un organismo expuesto a la radiación [11].

Si se da la radiólisis del agua, entonces, como se comentó antes, la molécula queda ionizada, lo cual implica que se ha formado un radical libre. Por definición, un radical libre es “una molécula que contiene, al menos, un electrón desapareado” [12]. La presencia excesiva de radicales libres en el cuerpo humano está asociada con distintas enfermedades crónico-degenerativas como lo son la diabetes, diversas patologías cardiovasculares y, por supuesto, cáncer [13]. Esta última es de interés para este trabajo, ya que, en concreto, se plantea indagar si es posible que los campos electromagnéticos emitidos por los teléfonos celulares sean capaces de aumentar la cantidad de radicales libres en el cuerpo humano por medio de la radiólisis del agua y, como consecuencia, de favorecer el aumento en la probabilidad de padecer algún tipo de cáncer. Conocer cómo cambia la molécula del agua bajo la acción de estos campos podría dar indicios de aquello que se está buscando.

Al tratarse este asunto de salud pública en términos de la interacción de la radiación con la materia, es posible estudiarlo desde el punto de vista de la física, en particular, desde la mecánica cuántica. Ahora bien, dado que no todos los problemas en mecánica cuántica tienen solución exacta, se hace necesario tener un método de aproximación capaz de tomar en cuenta las perturbaciones generadas por los campos externos sobre los estados estacionarios. Un método que cumple con los requisitos anteriores es la teoría de perturbaciones independiente del tiempo [14]. Así, bajo este método, el estudio de los campos provenientes de la radiofrecuencia emitida por la telefonía móvil y su relación con la formación de células cancerígenas por medio de los radicales libres se reduce al estudio del cambio en los eigenvalores y eigenestados de la molécula del agua como consecuencia de su interacción con los campos antes mencionados. Por último, cabe aclarar que en el presente trabajo, por mera simplicidad, se consideran únicamente los campos eléctricos emitidos por los teléfonos móviles, el cuál, de acuerdo con las mediciones que se le han realizado [15], va de 1 a

13 V/m.

1.1. Antecedentes

1.1.1. Exposición a la radiación electromagnética no ionizante

En nuestro organismo se producen naturalmente corrientes eléctricas minúsculas, de modo que los campos eléctricos de baja frecuencia son capaces de influir en el organismo afectando la distribución de las cargas eléctricas en su superficie (como lo hace con cualquier conductor). En consecuencia, es posible que estos campos puedan hacer que se forme una corriente que logre atravesar al organismo y llegar hasta el suelo. Por su parte, los campos magnéticos de baja frecuencia son capaces de inducir corrientes eléctricas en el organismo. Si bien ambos campos tienen efectos similares sobre nuestro cuerpo, las corrientes inducidas por estos suelen ser insignificantes.

Ahora bien, es importante diferenciar adecuadamente entre los efectos biológicos y los efectos sobre la salud que pudiesen causar los campos antes mencionados. Por una parte, los efectos biológicos simplemente corresponderían a aquellas respuestas perceptibles ante un estímulo externo y que no necesariamente representarían un riesgo para la salud. Por otra parte, los cambios irreversibles así como aquellos que perjudican al organismo, son los que constituyen los efectos sobre la salud. Se dice que un efecto es perjudicial si este produce algún tipo de disfunción detectable ya sea en las personas expuestas o en sus descendientes. En resumen, todo efecto sobre la salud es un efecto biológico, en cambio, no todo efecto biológico es un efecto sobre la salud.

De acuerdo con lo anterior, se sabe que “el principal efecto biológico de los campos electromagnéticos de radiofrecuencia es el calentamiento” [4]. Sin embargo, en general, las magnitudes de estos campos son inferiores a los que se necesitan para producir un calentamiento apreciable en los tejidos de los seres vivos. Al menos hasta 2016, la OMS no ha confirmado la presencia de efectos adversos asociados con una exposición prolongada, es decir, no hay evidencia de que estos efectos pudiesen ocurrir como una consecuencia, a largo plazo, de la exposición ante estos campos de baja frecuencia [4]. A pesar de ello, la investigación permanece abierta para verificar si una exposición a largo plazo puede, o no, ser perjudicial para la salud.

Como consecuencia de la constante preocupación que existe por parte de la sociedad respecto a los posibles efectos perjudiciales relacionados con una exposición prolongada a distintas fuentes de campos electromagnéticos, en 1996 la OMS dio inicio al Proyecto Internacional CEM. Este proyecto “reúne los conocimientos y recursos disponibles actuales de organismos e instituciones científicas de clave internacionales y nacionales” [4]. Su objetivo principal es coordinar las investigaciones a nivel mundial e integrar los distintos tipos de estudios para evaluar lo mejor posible si existen riesgos para la salud asociados con la exposición a largo plazo a campos electromagnéticos débiles.

De acuerdo con la OMS, de la revisión hecha a los, aproximadamente, 25000 artículos publicados de 1986 a 2016 respecto a los efectos biológicos y aplicaciones médicas de la radiación no ionizante, se concluyó que los resultados de estos no confirman el hecho de que los campos electromagnéticos de baja frecuencia sean responsables de algún efecto perjudicial para la salud. Sin embargo, también se sugiere que “los conocimientos sobre los efectos biológicos presentan algunas lagunas que requieren más investigaciones” [4].

Un par de años después, bajo la premisa de que la exposición a la radiación de radiofrecuencias (RRF) es capaz de causar un aumento en la temperatura de los tejidos de los seres vivos e incluso, bajo una exposición excesivamente prolongada, la disrupción de la termorregulación en los animales, se llevó a cabo un estudio para conocer los efectos térmicos de la absorción de la energía proveniente de la RRF en los seres vivos. Para dicho estudio, se utilizaron ratas y ratones, los cuales fueron expuestos a distintas radiofrecuencias (RF, 900 MHz y 1900 MHz, respectivamente) y en distintas cantidades para, posteriormente, medir su temperatura corporal [7]. De acuerdo con los resultados de este estudio, se observó que los efectos asociados con el aumento de la temperatura dependen de las características del animal (como lo son la edad, el tamaño, la especie, la masa, el mecanismo de regulación de su organismo, etc.) y los parámetros de la señal de RF

(como la potencia, la frecuencia o la modulación). Por ejemplo, las ratas macho y, en general, las más grandes (usualmente las ratas macho son mayores en longitud que las hembras), son más sensibles a este tipo de señales. Adicionalmente, las ratas, en general, fueron más sensibles que los ratones a la RF.

En ese mismo año, se realizó otro estudio con ratas para intentar conocer los posibles efectos de la radiofrecuencia en los seres vivos [8]. Este consistió en tomar un grupo de 24 ratas y dividirlos en 3 grupos con la misma cantidad de individuos: uno de control, uno expuesto a un campo electromagnético (CEM) con frecuencia de 2100 MHz 6 horas al día, y otro expuesto al mismo CEM pero 12 horas al día. Todos los grupos estuvieron expuestos a estas condiciones durante un lapso de 30 días. Al final del periodo indicado se pudo observar un deterioro en el borde de los túbulos renales en los grupos expuestos al CEM, es decir, la exposición a un CEM por periodos de 6 y 12 horas al día fueron capaces de inducir una lesión renal aguda mediada por estrés oxidativo.

Por otra parte, en 2019 se llevó a cabo una amplia revisión de artículos de investigación con el objetivo de señalar la interacción de la radiación electromagnética (REM) con los seres vivos, así como sus aplicaciones, en particular, en las telecomunicaciones y las prácticas clínicas, aportando, de esta forma, más datos a la discusión sobre los beneficios y peligros de los efectos de la REM. De acuerdo con este estudio, “se identificó que los efectos a largo plazo de la EMR puede, posiblemente, causar diferentes enfermedades en los seres vivos”. Además, en esta revisión, se recomienda a la población seguir las pautas de seguridad propuestas por instituciones como la Organización Mundial de la Salud (OMS), la Comisión Federal de Comunicación (FCC, por sus siglas en inglés) y la Comisión Internacional de Protección de la Radiación No Ionizante (ICNIRP, por sus siglas en inglés) [16].

1.1.2. Estudio de la molécula del agua

Modelo de la molécula

Por lo general, a la molécula del agua se le considera como un dipolo eléctrico [17]; los protones de los átomos de hidrógeno constituyen la parte positiva, mientras que el átomo de oxígeno y los dos electrones conforman a la parte negativa. Estos elementos, los dos protones y el oxígeno, forman una estructura triangular como resultado de la interacción (repulsión) electrostática entre ellos mismos [18]. Se considera que distancia entre protones es de, aproximadamente, $d_p \approx 151,05$ pm, mientras que la distancia entre cualquiera de los protones y el núcleo del oxígeno es $d_o \approx 95,60$ pm. Dado que estas distancias suponen como constantes, es posible considerar al movimiento de los protones en torno al oxígeno como si fuesen un cuerpo rígido (evitando caer en el problema de los tres cuerpos).

Con todos los elementos geométricos anteriormente descritos, lo más sencillo es colocar el origen del sistema de referencia en el núcleo del átomo de oxígeno. Como se mencionó antes, no se considera que las distancias en el sistema estén cambiando, de modo que tampoco habría razón para afirmar que la energía potencial es variable, en consecuencia, esta se toma como constante. Con estos puntos ya tomados en cuenta, el hamiltoniano de la molécula del agua estaría constituido de la forma [19]:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \left(\frac{\hat{L}_i^2}{2md_o^2} + V_i(d_o, d_p) \right) + \left(\frac{\hat{L}_i^2}{2md_o^2} + V_i(d_o, d_p) \right) \quad (1.1)$$

donde los subíndices 1 y 2 hacen referencia a cada protón. Finalmente, el potencial está dado por:

$$\hat{V}(d_o, d_p) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{e^2}{d_p} - \frac{4e^2}{d_o} \right) \quad (1.2)$$

Sustituyendo los valores descritos anteriormente para d_p y d_o se obtiene que el valor para el potencial corresponde a $V = -23,4$ eV.

Con todo lo anterior ya determinado, se puede escribir una ecuación de Schrödinger para cada uno de los protones, esta tendrá la siguiente forma:

$$\left[\frac{\hat{L}_i^2}{2md_o^2} + \hat{V}_i \right] \psi_i(\theta_i, \varphi_i) = \epsilon_i \psi_i(\theta_i, \varphi_i) \quad (1.3)$$

donde $i = 1, 2$ y $\hat{L}_i^2$ es el operador de momento angular orbital de los protones. La energía total del sistema está dada por $E = \epsilon_1 + \epsilon_2$. Ya que $V < 0$, entonces $\epsilon_i - V > 0$. Luego, la solución a las ecuaciones representadas en (1.3) representan las eigenfunciones del momento angular orbital, las cuales corresponden a los armónicos esféricos:

$$\psi_i(\theta_i, \varphi_i) = Y_{l_i m_i}(\theta_i, \varphi_i) = (-1)^{m_i} \sqrt{\frac{2l_i + 1}{4\pi} \frac{(l_i - m_i)!}{(l_i + m_i)!}} P_{l_i m_i}(\cos\theta_i) e^{im_i \varphi} \quad (1.4)$$

donde $P_{l_i m_i}(\cos\theta_i)$ son los polinomios asociados de Legendre. Entonces, la eigenfunción total del sistema es:

$$\Psi_{l_1 m_1; l_2 m_2}(\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2) = Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \varphi_1) Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \varphi_2) \quad (1.5)$$

donde $m_i = -l_i, -l_i + 1, \dots, l_i - 1, l_i$. La energía del sistema está expresada de la forma:

$$E_{l_1, l_2} = \frac{\hbar^2}{2md_o} l_1(l_1 + 1) + \frac{\hbar^2}{2md_o} l_2(l_2 + 1) + V \quad (1.6)$$

Es importante notar que la degeneración para los valores dados por l_1 y l_2 es $(2l_1 + 1) \times (2l_2 + 1)$ [19].

Finalmente, es conveniente recordar primero que:

$$\langle \theta_1 \phi_1 | l_1 m_1 \rangle \langle \theta_2 \phi_2 | l_2 m_2 \rangle = \langle \theta_1 \phi_1 \theta_2 \phi_2 | l_1 m_1 l_2 m_2 \rangle = Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \varphi_1) Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \varphi_2) \quad (1.7)$$

donde $Y_{l_i m_i}$ son los armónicos esféricos. Luego, al eliminar los subíndices 1 y 2, dejando esta expresión en términos de, únicamente, dos variables en vez de cuatro (cuyo procedimiento está completamente detallado en el apéndice A), es posible ver cómo se obtiene la siguiente expresión, la cual está basada en la ecuación (C.1) hallada en el apéndice C:

$$\langle l_1 m_1 l_2 m_2 | \hat{Z} | l'_1 m'_1 l'_2 m'_2 \rangle = \int Y_{l'_1 m'_1}^* Y_{l_2 m_2} z Y_{l'_1 m'_1} Y_{l'_2 m'_2}^* d\Omega \quad (1.8)$$

Esta ecuación será la base de una gran cantidad de los cálculos mostrados posteriormente en este trabajo.

Radiólisis del agua y radicales libres

Los organismos vivos están compuestos de, aproximadamente, un 80 % de agua en peso [11], por lo tanto, si se requiere investigar los efectos de la radiación en los seres vivos (lo cual incluye, por supuesto, a los humanos), se debe tomar en cuenta la interacción entre los CEM y la molécula del agua. Es importante comprender esta última interacción ya que es de bastante utilidad, en particular, en áreas afines a la medicina. El mecanismo por el cual se realizan las imágenes de resonancia magnética, por ejemplo, hace uso de esta interacción para excitar los protones dentro de las moléculas de agua del organismo, haciendo que estos, posteriormente, emitan una señal de ondas de radio la cual es detectable por el dispositivo, haciendo posible que se construyan estas imágenes [19].

Ahora bien, para este trabajo resulta de interés analizar al cáncer y su asociación con la radiación, esto debido a que es un problema de salud que preocupa a gran parte de la población,

esto debido a que puede comprometer la vida de las personas al ser directamente un conjunto de enfermedades de origen multifactorial [13]. Precisamente, para señalar a la radiación, en especial, a la ionizante, como un integrante de esa variedad de factores capaces de causar el cáncer, es necesario comprender un fenómeno en concreto: la radiólisis del agua. Esta es un fenómeno químico que debe contemplarse ya que está presente cuando la materia que se encuentra en un medio acuoso interacciona con la energía. La radiólisis del agua puede entenderse simplemente como la ruptura de los enlaces químicos de la molécula como consecuencia de la radiación. Al ocurrir este proceso, el agua queda ionizada, lo cual contribuye a la formación del OH [11].

Como se sabe, el átomo de oxígeno tiene dos electrones de valencia, mientras que el átomo de hidrógeno tiene sólo uno, entonces, es sencillo ver que la molécula de OH tiene un electrón libre o desapareado. Lo anterior implica que, por definición, la molécula de OH es un radical libre. Justamente, los radicales libres resultan de suma importancia para el estudio de algunas enfermedades crónico-degenerativas como lo pueden ser el cáncer, la diabetes o las cardiopatías [13], por lo tanto, la formación de OH en el organismo es de interés para este trabajo. Para tener claras las razones por las cuales el OH y, en general, los radicales libres pueden causar daños al organismo es necesario comprender, en primer lugar, que en nuestro organismo se producen, de manera completamente natural, este tipo de sustancias oxidantes las cuales son altamente reactivas y, de hecho, son importantes en algunos procesos fisiológicos [13].

El cuerpo humano es capaz de neutralizar a los radicales libres por medio de la producción de enzimas antioxidantes y es por ello que, por sí solos, los radicales libres no representan un peligro para este. No obstante, cuando las especies oxidantes superan a las defensas antioxidantes se produce el estrés oxidativo, el cual tiene el potencial de dañar a las células y a las biomoléculas como lo pueden ser los ácidos nucleicos, los lípidos o las proteínas. Este estrés oxidante es capaz de causar la oxidación del material genético, esto hace que guarde una profunda relación con el proceso tumoral presente en el cáncer. Existen algunos cambios metabólicos presentes en las células tumorales, entre los cuales se pueden resaltar el incremento en cuanto a la producción de peróxido de hidrógeno y la reducción apreciable de sistemas antioxidantes. En suma, se puede decir que el estrés oxidante afecta a las moléculas de nuestro organismo y puede causar, entre otras cosas, “diversas mutaciones en el ADN, oxidación de moléculas de glucosa o peroxidación de lípidos” [13] lo cual conduce a las enfermedades crónico-degenerativas mencionadas anteriormente.

1.1.3. Teléfonos móviles

De todos los dispositivos presentes en el día a día que son capaces de emitir ondas electromagnéticas, hay uno en específico que resalta dado el aumento acelerado en su uso en los últimos años. Desde la mitad de la década de los 80's, el uso de los teléfonos móviles ha ido incrementándose de manera acelerada y, junto con ello, las preocupaciones al respecto en cuanto a temas como lo son la salud y la seguridad. A finales de la década de los 90's, se llevó a cabo una revisión en cuanto a los efectos en la salud asociados con la exposición de los campos de la radiofrecuencia, la cual llevó a la necesidad de investigar a fondo, y de manera específica, los efectos asociados con la telefonía [5].

En primer lugar, es conveniente saber que los teléfonos móviles funcionan en un intervalo de 450 y 2700 MHz y tienen un pico de potencia de 0.1 a 2 W, siendo capaces de transmitir energía únicamente cuando están encendidos. Si se quiere reducir la exposición a la intensidad de los CEM, es necesario saber que esta varía con la distancia, de modo que la exposición a la energía de estos es menor a medida que el usuario aumente su distancia respecto al teléfono. Otra medida útil es utilizar el celular en zonas que tengan buena recepción [6].

De acuerdo con la OMS [6], el primer efecto apreciable, a corto plazo, por la interacción entre la energía de los CEM y el cuerpo humano, debería de ser el calentamiento de los tejidos. Para las frecuencias con las que trabajan este tipo de teléfonos, la energía es absorbida en mayor parte por los tejidos superficiales, como la piel, así que es despreciable el calentamiento de los órganos internos, ya que gran parte de la energía ya habrá sido absorbida. Por otro lado, se ha investigado si

estos campos intervienen en la actividad eléctrica cerebral, la función cognitiva, el sueño, el ritmo cardíaco y la presión arterial. Hasta el año en que se realizaron estas investigaciones (2014) no existían pruebas claras de que estos campos de baja intensidad causasen los efectos antes descritos.

Por otra parte, también se han estudiado los efectos a largo plazo. Por ejemplo, la Agencia Internacional de la Investigación del Cáncer (IARC, en inglés) comenzó el proyecto INTERPHONE [5], realizado a partir de un conjunto internacional de estudios de casos y controles enfocado en cuatro tipos de tumores que podrían asociarse con la absorción de la energía emitida por los teléfonos móviles: cerebrales (glioma y meningioma), del nervio acústico (schwannoma) y de la glándula parótida. El objetivo fue verificar si el uso del teléfono móvil es capaz de incrementar el riesgo de la aparición de los tumores antes mencionados y ver las condiciones bajo las cuales la energía de la RF es tumorigénica. Este estudio convocó a personas que pudiesen haber utilizado de manera continua un teléfono móvil durante 5 a 10 años, es decir, personas de 30 a 59 años de edad, además de que viviesen en regiones donde el uso de esta tecnología fuese muy común y prolongado, así como a aquellos pacientes a los que se les había diagnosticado un glioma o un meningioma en un periodo de 2 a 4 años entre el 2000 y el 2004. Al final, se concluye que no se observó una asociación determinante entre los teléfonos móviles y el aumento en el riesgo de contraer un glioma o un meningioma, esto debido a los sesgos presentes. De cualquier forma, la IARC clasificó a los campos electromagnéticos de radiofrecuencia como posiblemente carcinógenos para los seres humanos, es decir, dentro del grupo 2B, la cual es una categoría utilizada cuando “se considera que una asociación causal es creíble, pero el azar, los sesgos o los factores de confusión no pueden descartarse con una confianza razonable” [6, 10].

Un estudio similar al de INTERPHONE fue publicado en 2019 [9]. Este tenía como objetivo averiguar si es que existe una relación entre el uso de los teléfonos celulares y el cáncer tiroidal. Fue también un estudio de casos y controles, pero estuvo basado en la población de Connecticut (fue un estudio de carácter local, a diferencia de INTERPHONE que lo hizo a nivel internacional) del 2010 al 2011, donde se incluyeron 462 casos confirmados de cáncer de tiroides y 498 controles de la población. Los resultados arrojaron que no fue posible asociar de manera significativa al cáncer tiroidal con el uso del teléfono celular. Tampoco se pudo hallar, de manera satisfactoria, relación alguna con el número de llamadas al día, el uso de los dispositivos de manos libres o la edad que tenían los participantes en el estudio cuando usaron, por primera vez, un teléfono móvil. No obstante, al comparar a los usuarios de teléfonos celulares con personas que no lo son, sí es posible sugerir que existe un aumento en el riesgo de padecer cáncer tiroidal para aquellos usuarios cuyo tiempo uso del aparato es muy grande a lo largo del día.

Otro trabajo que intentó verificar la misma relación que se mencionó anteriormente fue publicado un año más tarde. Este estudio fue enfocado completamente en la población de los países nórdicos dado el aumento abrupto de casos de cáncer tiroidal en estos países. Se tomó en cuenta a la población con dicho diagnóstico en el periodo de 1970 a 2017. Se hace mención de que el uso tan frecuente de los teléfonos móviles y, en particular, de los teléfonos inteligentes expone continuamente a la glándula tiroidal a la RRF. Esto lleva a concluir que lo anterior podría ser un indicio de que existe una asociación entre estos teléfonos y el aumento en los casos de cáncer tiroidal en la región geográfica en que se llevó a cabo el estudio [10].

1.1.4. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo

Dentro de la mecánica cuántica, existen muchísimos sistemas a los cuales no se les pueden hallar soluciones haciendo uso de los métodos exactos. Para poder resolver problemas cuyos sistemas presenten esta característica, se hace necesario recurrir a los métodos de aproximación. Un método de este tipo que resultará de bastante utilidad en lo siguiente es la teoría de perturbaciones, la cual se basa en suponer que el sistema a tratar es muy similar a un sistema equivalente que pueda resolverse exactamente. Si la variación entre ambos problemas no es mucha, entonces la teoría de perturbaciones será de gran ayuda para poder encontrar una solución.

Al resolver problemas con este método, es posible notar que aparece una contribución que se

añade como una corrección a la energía y a la función de onda del hamiltoniano asociado al sistema que sí tiene una solución exacta. En sí, lo que se busca al utilizar este (y cualquier otro) método de aproximación es hallar los eigenvalores de la energía E_n y las eigenfunciones $|\psi_n\rangle$ asociadas a un hamiltoniano independiente del tiempo $\hat{H}$ que no tiene soluciones exactas, esto es, el hamiltoniano del sistema al que se le está aplicando este método, de tal modo que se pueda resolver la ecuación de eigenvalores:

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (1.9)$$

Sea $\hat{H}_0$ el hamiltoniano perteneciente al sistema que tiene solución exacta (el cual recibe el nombre de *sistema no perturbado*), entonces:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p$$

donde $\hat{H}_p$ es muy pequeño en comparación con $\hat{H}_0$. $\hat{H}_p$ corresponde entonces a la minúscula diferencia que existe entre el sistema por estudiar y el sistema no perturbado, por tanto, a esta pequeña variación le llamaremos *Hamiltoniano de la perturbación*. Notemos entonces que si $\hat{H}_p$ es pequeño, entonces su efecto sobre el espectro de energía y las eigenfunciones también lo son. Es posible poner a $\hat{H}_p$ en términos de un parámetro real adimensional λ , de modo que $\hat{H}_p = \lambda\hat{W}$, para $\lambda \ll 1$. La ecuación (1.9) quedaría entonces de la forma:

$$(\hat{H}_0 + \lambda\hat{W})|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (1.10)$$

El resto del procedimiento dependerá del tipo de sistema no perturbado con el que se esté tratando, en concreto, de si $\hat{H}_0$ presenta eigenvalores degenerados o no. Los cálculos presentados a continuación son basados en los desarrollos hechos en el libro *Quantum Mechanics* de N. Zettili [14].

Teoría de perturbaciones sin degeneración

En lo siguiente, se considera que $\hat{H}_0$ no tiene eigenvalores degenerados, esto es, que a cada eigenvalor de la energía $E_n^{(0)}$ le corresponde sólo un eigenestado $|\phi_n\rangle$:

$$\hat{H}_0|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n\rangle \quad (1.11)$$

donde $E_n^{(0)}$ y $|\phi_n\rangle$ son exactos y conocidos.

A continuación, se procede con la idea de que tanto los eigenvalores perturbados como los eigenestados pueden expandirse en una serie de potencias respecto al parámetro λ , de modo que se pueden expresar como:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (1.12)$$

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (1.13)$$

Se deben de tomar en cuenta los siguientes puntos importantes:

- No es necesariamente cierto que las expresiones (1.12) y (1.13) puedan realizarse para toda publicación que sea suficientemente débil.
- Las series (1.12) y 1.13 con frecuencia no son convergentes. Sin embargo, para un λ lo suficientemente pequeño, es conveniente que se tomen solamente los primeros terminos del sistema ya que estos bastan para tener una buena descripción del sistema.

De acuerdo con lo antes mencionado, la teoría de perturbaciones se reduce a calcular únicamente los $E_n^{(1)}, E_n^{(2)}, \dots$ y $|\psi_n^{(1)}\rangle, |\psi_n^{(2)}\rangle, \dots$. Suponiendo que los estados no perturbados $|\phi_n\rangle$ son no degenerados y sustituyendo (1.12) y (1.13) en la ecuación de eigenvalores (1.11), se obtiene que:

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + \lambda \hat{W})(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) \\ = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots)(|\phi_n\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots) \end{aligned} \quad (1.14)$$

Tomando como referencia los coeficientes λ de cada lado de la ecuación, podemos separar las ecuaciones de modo que se tenga una para orden cero:

$$\hat{H}_0 |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\phi_n\rangle \quad (1.15)$$

para el primer orden:

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle + \hat{W} |\phi_n\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(1)} |\phi_n\rangle \quad (1.16)$$

y para el segundo orden:

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{W} |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\phi_n\rangle \quad (1.17)$$

De acuerdo con lo que se ha hecho hasta ahora, la ecuación (1.13) implica que $|\psi_n\rangle$ no es muy diferente de $|\phi_n\rangle$, en consecuencia se puede afirmar que:

$$\langle \phi_n | \psi_n \rangle \approx 1 \quad (1.18)$$

Sustituyendo la expresión (1.13) en la (1.18) obtenemos:

$$\lambda \langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle + \lambda^2 \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle + \dots = 0$$

de modo que, para los coeficientes de λ se cumple que:

$$\langle \phi_n | \psi_n^{(1)} \rangle = \langle \phi_n | \psi_n^{(2)} \rangle = \dots = 0$$

Con todo los resultados anteriores ya determinados, es posible hallar los eigenvalores $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$ y el eigenestado $|\psi_n^{(1)}\rangle$, respectivamente. Utilizando la corrección a primer orden, es decir, la ecuación (1.16), y multiplicándola por $\langle \phi_n |$ se obtiene:

$$E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \hat{W} | \phi_n \rangle \quad (1.19)$$

Al combinar las expresiones (1.19) con (1.12), es posible obtener la perturbación de la energía a primer orden:

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | \hat{H}_p | \phi_n \rangle \quad (1.20)$$

Debido a que el conjunto de los estados no perturbados forma una base completa y ortonormal, podemos expandir $|\psi_n^{(1)}\rangle$ en la base $\{|\phi_m\rangle\}$:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle |\phi_m\rangle \quad (1.21)$$

Luego, el coeficiente $\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle$ se puede obtener mediante la ecuación (1.16) al multiplicarla por $\langle \phi_m |$:

$$\langle \phi_m | \psi_n^{(1)} \rangle = \frac{\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.22)$$

Sustituyendo esto último en (1.21) se llega a que:

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle \quad (1.23)$$

Por lo tanto, la eigenfunción $|\psi_n\rangle$ de $\hat{H}$ a primer orden puede ser obtenida combinando las expresiones (1.23) y (1.13):

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle \quad (1.24)$$

Ahora bien, para poder determinar $E_n^{(2)}$, es necesario multiplicar ambos lados de la ecuación (1.17) por $\langle \phi_n |$:

$$E_n^{(2)} = \langle \phi_n | \hat{W} | \psi_n^{(1)} \rangle \quad (1.25)$$

Combinando (1.23) con (1.25) se obtiene:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.26)$$

La eigenenergía a segundo orden de $\hat{H}_p$ se obtiene sustituyendo las expresiones (1.26) y (1.19) en (1.12):

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle \phi_n | \hat{H}_p | \phi_n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \phi_m | \hat{W} | \phi_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.27)$$

Teoría de perturbaciones con degeneración

A continuación, se aplicará la teoría de perturbaciones a los estados de un hamiltoniano $\hat{H}_0$ el cual se considera como degenerado:

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}_p)|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (1.28)$$

Si el nivel de energía $E_n^{(0)}$ tiene una degeneración de grado f , esto es, que existe un conjunto de f eigenestados distintos $|\phi_{n_\alpha}\rangle$, donde $\alpha = 1, 2, \dots, f$, que corresponden a la misma eigenenergía $E_n^{(0)}$, entonces tenemos lo siguiente:

$$\hat{H}_0|\phi_{n_\alpha}\rangle = E_n^{(0)}|\phi_{n_\alpha}\rangle \quad (1.29)$$

donde $\alpha = 1, 2, \dots, f$ se mantiene para uno o más números cuánticos, pero, por otro lado, los eigenvalores de energía son independientes de α .

Para la aproximación a orden cero, es posible escribir la eigenfunción $|\psi_n\rangle$ como una combinación lineal en términos de $|\phi_{n_\alpha}\rangle$:

$$|\psi_n\rangle = \sum_{\alpha=1}^f a_\alpha |\phi_{n_\alpha}\rangle \quad (1.30)$$

Considerando a los estados $|\phi_{n_\alpha}\rangle$ como ortonormales respecto al subíndice α y que $|\psi_n\rangle$ está normalizado, podemos ver que los coeficientes cumplen la siguiente relación:

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \sum_{\alpha, \beta} a_\alpha^* a_\beta \delta_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha=1}^f |a_\alpha|^2 = 1 \quad (1.31)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (1.28), (1.29) y (1.30), es posible hallar estos coeficientes así como las correcciones de la energía a primer orden:

$$\sum_{\alpha} \left(E_n^{(0)} |\phi_{n_{\alpha}}\rangle + \hat{H}_p |\phi_{n_{\alpha}}\rangle \right) a_{\alpha} = E_n \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\phi_{n_{\alpha}}\rangle \quad (1.32)$$

Al multiplicar ambos lados por $\langle \phi_{n_{\beta}} |$ y simplificar los resultados, se llega a:

$$a_{\beta} E_n = a_{\beta} E_n^{(0)} + \sum_{\alpha=1}^f a_{\alpha} \langle \phi_{n_{\beta}} | \hat{H}_p | \phi_{n_{\alpha}} \rangle \quad (1.33)$$

Esta última ecuación puede reescribirse de la forma:

$$\sum_{\alpha=1}^f (\hat{H}_{p_{\beta\alpha}} - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta}) a_{\alpha} = 0 \quad (1.34)$$

donde $\beta = 1, 2, \dots, f$, $\hat{H}_{p_{\beta\alpha}} = \langle \phi_{n_{\beta}} | \hat{H}_p | \phi_{n_{\alpha}} \rangle$ y $E_n^{(1)} = E_n - E_n^{(0)}$. Este es un sistema de f ecuaciones lineales homogéneas para los coeficientes a_{α} . Dichos coeficientes no son cero si y sólo si el determinante $|\hat{H}_{p_{\beta\alpha}} - E_n^{(1)} \delta_{\alpha\beta}|$ es cero, esto es:

$$\begin{vmatrix} \hat{H}_{p_{11}} - E_n^{(1)} & \hat{H}_{p_{12}} & \dots & \hat{H}_{p_{1f}} \\ \hat{H}_{p_{21}} & \hat{H}_{p_{22}} - E_n^{(1)} & \dots & \hat{H}_{p_{2f}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{H}_{p_{f1}} & \hat{H}_{p_{f2}} & \dots & \hat{H}_{p_{ff}} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.35)$$

Esta es una ecuación de grado f para $E_n^{(1)}$ y en general tiene f raíces reales distintas, $E_{n_{\alpha}}^{(1)}$. Dichas raíces son las correcciones a primer orden de los eigenvalores $E_{n_{\alpha}}^{(1)}$ de $\hat{H}$. Para hallar los coeficientes a_{α} , basta con sustituir las raíces en (1.34) y resolver. Al obtener los coeficientes, ya podemos determinar las eigenfunciones con (1.30).

Las raíces de $E_{n_{\alpha}}^{(1)}$ son distintas en general. En este caso, los eigenvalores de $\hat{H}$ no están degenerados, en consecuencia la degeneración de grado f del nivel $E_n^{(0)}$ del problema no perturbado se divide en f niveles distintos: $E_{n_{\alpha}} = E_n^{(0)} + E_{n_{\alpha}}^{(1)}$, con $\alpha = 1, 2, \dots, f$. Podemos decir entonces que la perturbación se encarga de "descomponer" la degeneración. Dicha "descomposición" puede ser total o parcial según si todas las raíces son distintas o si sólo algunas de ellas lo son [14].

Capítulo 2

Metodología

Como se ha mencionado anteriormente, muchos de los problemas de la mecánica cuántica no pueden resolverse de manera exacta, de manera que se vuelve indispensable recurrir a los métodos de aproximación para lograr hacerlo. Bajo este argumento, lo primero que se realizó fue revisar la teoría de perturbaciones independiente del tiempo tanto para sistemas degenerados como para los que no lo son. La aplicación de este método permite suponer que el sistema por estudiar es ligeramente distinto a la solución de manera exacta, de manera que se pudieron hallar los eigenvalores E_n y las eigenfunciones $|\psi_n\rangle$ de un hamiltoniano sin solución exacta. Una vez hecha y entendida la revisión anterior, fue posible analizar lo ocurrido en el efecto Stark para el átomo de hidrógeno. La elección de este elemento se debió a: 1) su simplicidad -tener un solo electrón orbitando al núcleo lo hace más simple que cualquier otro elemento- y 2) porque conforma a la molécula del agua, que es el principal objeto de estudio de este trabajo.

Posteriormente, se llevó a cabo una revisión del comportamiento de los protones de la molécula del agua bajo la interacción de esta con un campo magnético, para ello se tomó como referencia el proceso ocurrido en las imágenes de resonancia magnética (MRI) [19], proceso en el cual, las moléculas de agua del cuerpo humano interactúan con un campo magnético externo. De esta revisión fue muy importante poner atención a la forma en la que se modeló la molécula del agua, ya que de esto derivaron datos muy relevantes asociados con esta, como lo son su estructura dipolar, su geometría, la forma en la que se considera el movimiento de los protones, la carga eléctrica del sistema, el hamiltoniano sin la presencia de alguna perturbación y el valor del potencial. Ya con esta información, junto con el repaso de algunas herramientas matemáticas necesarias, se tuvo todo listo para abordar el problema principal.

Se comenzó utilizando todos los datos mencionados anteriormente respecto a la molécula del agua y se hizo uso de la expresión con la cual se puede calcular la energía de este sistema para cualquier estado en el que este se encuentre, es decir, la ecuación (1.6). De esta forma, las bases de esta investigación están conformadas por el hamiltoniano del sistema sin perturbación y la energía para cualquier estado en el que se encuentren los protones, definido por los números cuánticos l_1 y l_2 , asociados con los protones 1 y 2, respectivamente. Con esto en mente, se construyó el hamiltoniano del sistema, ocupando el hamiltoniano no perturbado y el hamiltoniano de la perturbación, recordando que este último representa, en este caso, la energía de un campo eléctrico uniforme en dirección del eje z . A partir de esto, se hizo el análisis del comportamiento de la molécula del agua tanto en el sistema sin degeneración como en el que sí la presenta. Debido a la diferencia entre ambos procedimientos (la cual queda más explícita en la teoría de perturbaciones), es conveniente dividir este trabajo en dos partes.

Antes de proceder con la descripción de los procesos seguidos para el análisis de cada tipo de sistema, es importante comentar el uso de un teorema bastante relevante. Se hizo la propuesta de este mientras se iban haciendo los cálculos ya que, al obtener varios resultados iguales a cero, en los cuales destacaba la presencia de la función exponencial en los armónicos esféricos que conformaban

a los estados del sistema utilizados en el momento. Por otra parte, posteriormente se comenzó a notar otro patrón similar (en cuanto a resultados nulos) en el que se veían involucrados los polinómios asociados de Legendre, de modo que esto llevó a la elaboración de un teorema general para los armónicos esféricos. La formulación completa y detallada del mismo puede encontrarse en el apéndice B, así como su respectiva demostración. Este teorema representa un pilar importante dentro de este trabajo ya que, si bien forma parte del proceso de los cálculos realizados, resulta fundamental para poder explicar los resultados y las conclusiones presentadas posteriormente. En lo siguiente, se hará uso y mención del mismo pues, como se indicó antes, ayuda a reducir el número de cálculos que deben hacerse. Cabe resaltar que se desconoce si este teorema ya exista, el mismo no fue hallado ni mencionado en las referencias consultadas.

2.1. Sistema sin degeneración

Acorde con la teoría de perturbaciones, lo primero que se llevó a cabo fue conocer la expresión de la eigenenergía correspondiente al estado base, pues lo que queremos calcular son los términos a primer y segundo orden de la ecuación (1.27). Para el término a primer orden no hay mayor problema ya que sólo hay un elemento por calcular, simplemente se sustituyó por los armónicos esféricos correspondientes y se resolvió la integral resultante. Sin embargo, para el término a segundo orden, se tiene una sumatoria que, en principio, es infinita. Afortunadamente, gracias al teorema que aparece en el apéndice B, se notó que la mayor parte de estos son cero. Para los pocos términos distintos de cero se puede apreciar que, cuanto mayor eran los valores que se tomaron de l_i , menor era el resultado obtenido, por lo tanto, se consideraron como representativos los dos valores más grandes (es decir, los dos primeros valores distintos de cero que se obtuvieron) de la serie.

Para los estados que dieron un resultado distinto de cero, se buscó calcular su energía correspondiente por medio de la ecuación (1.6), así, esta pudo compararse con la energía del estado base, $E_{0,0}$. Se sustituyeron los resultados obtenidos para las respectivas energías en la ecuación (1.27) de tal forma que la expresión resultante correspondiese a la corrección de la energía de nuestro sistema debida a la perturbación producida por la presencia de un campo eléctrico constante.

Después de lo anterior, se procedió a determinar los eigenestados aproximados al primer orden para este sistema. Estos se obtuvieron mediante la expresión (1.24). Para ello simplemente se hizo uso de los resultados ya calculados previamente pues, en esencia, son los mismos, sólo hay que recordar que, en este contexto, $|\phi_n\rangle$ corresponde al estado base y $|\phi_m\rangle$ a cualquier otro estado. Siguiendo este procedimiento, se volvieron a usar los resultados obtenidos para los elementos de la forma $\langle l_1 m_1 l_2 m_2 | \hat{H}_p | 0 0 0 0 \rangle$, así como los valores de las energías asociados a los mismos. Sustituyendo estos resultados en la ecuación (1.24) y, una vez más, tomando sólo los dos términos representativos utilizados anteriormente, se logró obtener la ecuación que describe los eigenestados de este sistema.

2.2. Sistema degenerado

Ahora bien, haciendo uso de la expresión (1.6), se puede conocer la energía asociada a los estados correspondientes al sistema con degeneración. Es conveniente recordar que esta solamente depende de los números cuánticos l_i y la degeneración la determinan los m_i , en consecuencia, de esta manera se tienen tanto la energía como el número de estados asociados a la misma, es decir, su grado de degeneración. Esto último es muy importante ya que es el criterio mediante el cual se puede determinar la forma que tiene la matriz de la perturbación H_p . Una vez obtenido lo anterior, se procedió a hallar los elementos que conforman a la matriz H_p con ayuda de la expresión (3.5), los cuales, a su vez, están determinados por los estados asociados a la energía obtenida.

Al igual que en el apartado anterior, resultó conveniente hacer uso del teorema del apéndice B para determinar inmediatamente los elementos nulos, de modo que se calculasen sólo los elementos

que, en apariencia, serían distintos de cero (en este punto, el teorema no estaba completo, de modo que únicamente estaba formulado y demostrado todo aquello que hace referencia a la variable φ). A pesar de que se intentaron las combinaciones $(l_1 = 0, l_2 = 1)$, $(l_1 = 1, l_2 = 1)$, $(l_1 = 0, l_2 = 2)$ y $(l_1 = 1, l_2 = 2)$, se determinó que la matriz de perturbación es nula para todos los casos (cosa que se llegó a confirmar después cuando el teorema tomó su forma final). Cabe destacar que la última combinación, $(l_1 = 1, l_2 = 2)$, requirió de un procedimiento demasiado laborioso puesto que se trataba de determinar los elementos de una matriz de 25×25 , es decir, esta tarea exigía calcular 625 elementos (aunque, de manera honesta, el número de elementos por calcular es menor a este si se considera el criterio mencionado anteriormente para la variable φ).

Prestando atención a los cálculos, tras determinar todos los estados posibles, se podía ver que algunos elementos conducían a las mismas integrales pero con los armónicos esféricos en un orden distinto, de modo que fue bastante útil clasificar estas integrales para simplificar el trabajo y evitar repetir elementos que, a final de cuentas, estaban repetidos. Dicha clasificación, así como la lista de estados posibles, fueron plasmados en una tabla con el fin de mantener el orden, en esta se muestran los valores de m'_1 , m'_2 , m_1 y m_2 , así como la clasificación asignada en la columna con el nombre "Grupo", la cual va desde la A hasta la M, añadiendo un elemento especial clasificado como T (que corresponde al caso trivial donde todos los números valen cero). Como se mencionó anteriormente, para todas las combinaciones que se intentaron se obtuvo que las matrices H_p con nulas, por lo tanto, fue imposible obtener eigenvalores para la energía. En consecuencia, sus respectivos eigenestados asociados tampoco pudieron ser hallados con este método, de manera que este apartado queda inconcluso para el sistema degenerado.

Tras todo el análisis realizado, se procedió a buscar una aplicación práctica dentro de algún aparato o instrumento de la vida cotidiana. Se eligió a los teléfonos celulares por su uso tan común y extendido en el mundo durante las últimas décadas, el objetivo entonces se transformó en verificar si, de acuerdo con lo obtenido en este trabajo de manera teórica, es posible que los campos eléctricos asociados a estos aparatos puedan causar alteraciones en la molécula del agua y, en consecuencia, que representen algún tipo riesgo para la salud pública. Se comenzó entonces una recopilación de información al respecto, en concreto, sobre la asociación entre el uso de los teléfonos celulares y el desarrollo de los tumores cerebrales más comunes asociados con la absorción de la energía proveniente de la RF. Adicionalmente, se hizo una búsqueda de las magnitudes del campo eléctrico que manejan los celulares para tener todas las cantidades necesarias para hacer los cálculos. En seguida, se buscó verificar si la contribución del campo eléctrico de un teléfono celular es significativa como para modificar la energía asociada con el estado base así como el eigenestado asociado. Por supuesto, sólo se está considerando el sistema sin degeneración, para el cual sí se tiene una expresión detallada tanto para la corrección de la energía debido a la perturbación, como para la eigenfunción asociada al hamiltoniano de este sistema.

Capítulo 3

La molécula del agua en un campo eléctrico

Se añade el campo eléctrico como una perturbación en el sistema, de esta forma, el hamiltoniano de la perturbación es $\hat{H}_p = q\varepsilon\hat{Z}$. Siguiendo el método de teoría de perturbaciones, obtenemos que

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_p = \hat{H}_0 + q\varepsilon\hat{Z} \quad (3.1)$$

3.1. Sistema no degenerado

Se analizará primero el caso del estado base ya que no tiene degeneración. De acuerdo con la ecuación 1.6, la energía correspondiente a este estado es:

$$E_{00}^{(0)} = V \quad (3.2)$$

donde $E_{00}^{(0)}$ corresponde a $E_n^{(0)}$ en este contexto. En adelante se hará uso de esta notación. Ahora bien, de acuerdo con la teoría de perturbaciones, la energía asociada a este estado sería:

$$E_{00} = E_{00}^{(0)} + q\varepsilon\langle 0\ 0\ 0\ 0|\hat{Z}|0\ 0\ 0\ 0\rangle + q^2\varepsilon^2 \sum \frac{|\langle l_1\ m_1\ l_2\ m_2|\hat{Z}|0\ 0\ 0\ 0\rangle|^2}{E_{00} - E_{l_1l_2}} \quad (3.3)$$

Se obtendrá primero el término lineal. Recordemos primero que:

$$|l_1\ m_1\rangle|l_2\ m_2\rangle = |l_1\ m_1\ l_2\ m_2\rangle = Y_{l_1m_1}Y_{l_2m_2} \quad (3.4)$$

donde $Y_{l_im_i}$ son los armónicos esféricos. Además,

$$\langle l_1\ m_1\ l_2\ m_2|\hat{Z}|l'_1\ m'_1\ l'_2\ m'_2\rangle = \int Y_{l_1m_1}^* Y_{l_2m_2} z Y_{l'_1m'_1} Y_{l'_2m'_2}^* d\Omega \quad (3.5)$$

Dado el modelo que se está considerando, $d\Omega$ corresponde al diferencial de superficie angular en coordenadas esféricas. Sin embargo, sólo se pretende integrar dentro del espacio correspondiente a las órbitas de los protones, por tanto, se va a considerar que, $r = a_0$, donde a_0 es el radio de la molécula del agua. En lo siguiente, la integral sólo se hará sobre el cascarón esférico, es decir sólo se usarán las coordenadas angulares θ y φ . Cabe aclarar que, en lo siguiente, se hará uso de las condiciones sobre el sistema de referencia hechas en el apéndice A, esto es, en todos los cálculos presentados a partir de este punto se partirá de los resultados obtenidos en dicha sección, los cuales están representados en las ecuaciones A.2 y A.3. Haciendo uso de (3.5), se obtiene el término lineal:

$$\begin{aligned}
 \langle 0 \ 0 \ 0 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle &= \int Y_{00}^* Y_{00} z Y_{00} Y_{00}^* d\Omega \\
 &= \int \frac{1}{4\pi} a_0 \cos \theta \frac{1}{4\pi} \sin \theta d\theta d\varphi \\
 &= \frac{a_0}{16\pi^2} \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 0
 \end{aligned}$$

Es decir, el término lineal es nulo. Se calcularán ahora algunos términos de la sumatoria para la parte cuadrática. Se tomará primero $l_1 = 1$, así $m_1 = -1, 0, 1$ y $l_2 = m_2 = 0$. De esta forma:

$$\begin{aligned}
 \langle 1 \ 0 \ 0 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle &= \int Y_{10}^* Y_{00} z Y_{00} Y_{00}^* d\Omega \\
 &= \frac{a_0 \sqrt{3}}{16\pi^2} \int_0^\pi \cos \theta^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
 &= \frac{\sqrt{3}}{12\pi} a_0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 1 \ \pm 1 \ 0 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle &= \int Y_{1\pm 1}^* Y_{00} z Y_{00} Y_{00}^* d\Omega \\
 &= \mp \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{a_0}{16\pi^2} \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta^2 d\theta \int_0^{2\pi} e^{\mp i\varphi} d\varphi = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2 \ 0 \ 0 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle &= \int Y_{20}^* Y_{00} z Y_{00} Y_{00}^* d\Omega \\
 &= \frac{\sqrt{5} a_0}{32\pi^2} \int_0^\pi (3 \cos \theta^3 \sin \theta - \cos \theta \sin \theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2 \ \pm 1 \ 0 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle &= \int Y_{2\pm 1}^* Y_{00} z Y_{00} Y_{00}^* d\Omega \\
 &= \mp \sqrt{\frac{15}{2}} \frac{a_0}{16\pi^2} \int_0^\pi \cos \theta^2 \sin \theta^2 d\theta \int_0^{2\pi} e^{\mp i\varphi} d\varphi = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2 \ \pm 2 \ 0 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle &= \int Y_{2\pm 2}^* Y_{00} z Y_{00} Y_{00}^* d\Omega \\
 &= \sqrt{\frac{15}{8}} \frac{a_0}{16\pi^2} \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta^3 d\theta \int_0^{2\pi} e^{\mp 2i\varphi} d\varphi = 0
 \end{aligned}$$

Nótese que aquellos términos donde $m_i = \pm 1, \pm 2, \dots$ son automáticamente cero, tal como se menciona en la ecuación C.5 del apéndice C. En lo siguiente se hará uso de ello. Se tomará ahora el caso donde $l_1 = l_2 = 1$, luego, $m_i = -1, 0, 1$ para $i = 1, 2$.

$$\begin{aligned}
 \langle 1 \ 0 \ 1 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle &= \int Y_{10}^* Y_{10} z Y_{00} Y_{00}^* d\Omega \\
 &= \frac{3a_0}{16\pi^2} \int_0^\pi \cos \theta^3 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 0
 \end{aligned}$$

$$\langle 1 \ 0 \ 1 \ \pm 1 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle = 0$$

$$\langle 1 \ \pm 1 \ 1 \ \pm 1 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle = 0$$

$$\begin{aligned} \langle 2 \ 0 \ 1 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle &= \int Y_{20}^* Y_{10} z Y_{00} Y_{00}^* d\Omega \\ &= \frac{3a_0}{16\pi^2} \sqrt{\frac{15}{4}} \int_0^\pi (3 \cos \theta^4 \sin \theta - \cos \theta^2 \sin \theta) d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= \frac{a_0}{2\sqrt{15}\pi} \end{aligned}$$

Se continúa el procedimiento obteniendo la energía correspondiente a los estados distintos de cero, para ello se utiliza la ecuación (1.6):

$$\begin{aligned} E_{1,0} &= \frac{\hbar^2}{md_o^2} + V \\ E_{2,1} &= 4 \frac{\hbar^2}{md_o^2} + V \end{aligned}$$

Entonces:

$$\begin{aligned} E_{0,0} - E_{1,0} &= -\frac{\hbar^2}{md_o^2} \\ E_{0,0} - E_{2,1} &= -4 \frac{\hbar^2}{md_o^2} \end{aligned}$$

Juntando todos los resultados anteriores, se pueden obtener algunos de los términos de la sumatoria:

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= E_{0,0} + q^2 \varepsilon^2 \left(\frac{|\langle 1 \ 0 \ 0 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle|^2}{E_{0,0}^{(0)} - E_{1,0}^{(0)}} + \frac{|\langle 2 \ 0 \ 1 \ 0 | \hat{Z} | 0 \ 0 \ 0 \ 0 \rangle|^2}{E_{0,0}^{(0)} - E_{2,1}^{(0)}} + \dots \right) \\ &= V - \frac{q^2 \varepsilon^2 a_0^2 m d_o^2}{\hbar^2 \pi^2} \left(\frac{1}{48} + \frac{1}{240} + \dots \right) \end{aligned}$$

O bien, simplificando y aproximando al primer término,

$$E_0 \approx V - \left(\frac{q \varepsilon d_o^2}{\hbar \pi} \right)^2 \frac{m}{48} \quad (3.6)$$

3.1.1. Eigenestados del sistema no degenerado

Se hallará el eigenestado $|\psi_n\rangle$ mediante la ecuación:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \phi_m | \hat{H}_p | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\phi_m\rangle \quad (3.7)$$

lo cual es una aproximación a primer orden. Para ello, se ocuparan algunos de los valores calculados anteriormente. Así:

$$\begin{aligned} |\psi_{0,0}\rangle &= |0\ 0\ 0\ 0\rangle + \sum_{l_1 \neq 0, l_2 \neq 0} \frac{\langle l_1\ m_1\ l_2\ m_2 | \hat{H}_p | 0\ 0\ 0\ 0 \rangle}{E_{0,0} - E_{l_1, l_2}} |l_1\ m_1\ l_2\ m_2\rangle \\ &= |0\ 0\ 0\ 0\rangle + q\varepsilon \left(\frac{\langle 1\ 0\ 0\ 0 | \hat{Z} | 0\ 0\ 0\ 0 \rangle}{E_{0,0} - E_{1,0}} + \frac{\langle 2\ 0\ 1\ 0 | \hat{Z} | 0\ 0\ 0\ 0 \rangle}{E_{0,0} - E_{1,0}} + \dots \right) \end{aligned}$$

O bien,

$$|\psi_{0,0}\rangle = |0\ 0\ 0\ 0\rangle - \frac{q\varepsilon a_0 m d_o^2}{4\pi\hbar^2} \left(\frac{\sqrt{3}}{3} |1\ 0\ 0\ 0\rangle + \frac{\sqrt{15}}{30} |2\ 0\ 1\ 0\rangle + \dots \right) \quad (3.8)$$

que corresponde al eigenestado a primer orden del sistema no degenerado.

3.2. Sitema con degeneración

Es conveniente recordar que la energía de la molécula del agua depende únicamente de los números cuánticos l_i y que $m_i = -l_i, -l_i + 1, \dots, l_i - 1, l_i$, donde $i = 1, 2$. Se comenzará por analizar el caso donde $l_1 = 0$, $m_1 = 0$, $l_2 = 1$ y $m_2 = -1, 0, 1$. Como se sabe, la energía del sistema está dada por la ecuación (1.6), de modo que, la energía correspondiente al caso que está por estudiarse está dada por:

$$E_{0,1} = \frac{\hbar^2}{2md_o^2}(0)(1) + \frac{\hbar^2}{2md_o^2}(1)(2) + V = \frac{\hbar^2}{2md_o^2} + V$$

Es importante notar que hay 3 estados asociados a esta energía, es decir, este nivel de energía tiene una degeneración de grado 3, de manera que se puede construir una matriz 3×3 . Recordemos que $\hat{H}_p = q\varepsilon \hat{Z}$. Sean $|1\rangle = |0\ 0\ 1\ -1\rangle$, $|2\rangle = |0\ 0\ 1\ 0\rangle$ y $|3\rangle = |0\ 0\ 1\ 1\rangle$ los estados asociados a esta energía, la matriz debe tener la siguiente forma:

$$H_p = \begin{pmatrix} \langle 1 | \hat{H}_p | 1 \rangle & \langle 1 | \hat{H}_p | 2 \rangle & \langle 1 | \hat{H}_p | 3 \rangle \\ \langle 2 | \hat{H}_p | 1 \rangle & \langle 2 | \hat{H}_p | 2 \rangle & \langle 2 | \hat{H}_p | 3 \rangle \\ \langle 3 | \hat{H}_p | 1 \rangle & \langle 3 | \hat{H}_p | 2 \rangle & \langle 3 | \hat{H}_p | 3 \rangle \end{pmatrix}$$

Se calcularán los elementos de la matriz con ayuda de la expresión (3.5), para ello, con el objetivo de reducir la cantidad de elementos por determinar, se hará uso del resultado expuesto en el apéndice C, en específico, de la condición descrita en [].

Con este resultado ya contemplado, se pretende hallar entonces los elementos de matriz que, al menos en principio, serían distintos de cero de acuerdo con el cirterio antes mencionado. De este punto en adelante, se mostrarán solamente los cálculos relacionados a los elementos de matriz donde $\alpha = 0$:

$$\begin{aligned} \langle 1 | \hat{H}_p | 1 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{00}^* Y_{1-1} z Y_{00} Y_{1-1}^* d\Omega \\ &= q\varepsilon \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin\theta \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin\theta a_0 \cos\theta \sin\theta d\theta d\varphi \\ &= -\frac{3q\varepsilon a^3}{16\pi} \int_0^\pi \sin^3\theta \cos\theta d\theta = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 2|\hat{H}_p|2\rangle &= q\varepsilon \int Y_{00}^* Y_{10} z Y_{00} Y_{10}^* d\Omega \\
 &= q\varepsilon \int_0^\pi \frac{1}{4\pi} \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta a_0 \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
 &= \frac{3q\varepsilon a^3}{8\pi} \int_0^\pi \cos^3 \theta \sin \theta d\theta = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 3|\hat{H}_p|3\rangle &= q\varepsilon \int Y_{00}^* Y_{11} z Y_{00} Y_{11}^* d\Omega \\
 &= q\varepsilon \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{4\pi} \left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\right) e^{i\varphi} \sin \theta \left(-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\right) e^{-i\varphi} \sin \theta a_0 \cos \theta \sin \theta d\theta d\varphi \\
 &= -\frac{3q\varepsilon a^3}{16\pi} \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos \theta d\theta = 0
 \end{aligned}$$

Se puede concluir entonces que H_p es una matriz nula. Es posible pasar, entonces, al siguiente nivel de energía para el cual $l_1 = 1$ y $l_2 = 1$, de modo que:

$$E_{1,1} = \frac{\hbar^2}{2md_o^2}(1)(2) + \frac{\hbar^2}{2md_o^2}(1)(2) + V = 2\frac{\hbar^2}{md_o^2} + V$$

Los estados correspondientes a esta energía tienen la forma $|1 m_1 1 m_2\rangle$, donde $m_1 = -1, 0, 1$ y $m_2 = -1, 0, 1$, es decir, son 9 estados distintos con lo cual se construye una matriz de 9×9 cuyos elementos tienen la forma $\langle 1 m'_1 1 m'_2 | \hat{H}_p | 1 m_1 1 m_2 \rangle$. Los únicos elementos que vale la pena analizar son los siguientes:

$$\begin{aligned}
 \langle 1 0 1 0 | \hat{H}_p | 1 0 1 0 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{10}^* Y_{10} z Y_{10} Y_{10}^* d\Omega \\
 &= q\varepsilon \int_0^\pi \left(\frac{3}{4\pi}\right)^2 \cos^4 \theta a_0 \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
 &= \frac{9q\varepsilon a_0}{8\pi} \int_0^\pi \cos^5 \theta \sin \theta d\theta = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 1 1 1 1 | \hat{H}_p | 1 -1 1 -1 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{11}^* Y_{11} z Y_{1-1} Y_{1-1}^* d\Omega \\
 &= q\varepsilon \int_0^\pi \left(\frac{3}{8\pi}\right)^2 \sin^4 \theta a_0 \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
 &= \frac{9q\varepsilon a_0^3}{32\pi} \int_0^\pi \sin^5 \theta \cos \theta d\theta = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle 1 1 1 0 | \hat{H}_p | 1 -1 1 0 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{11}^* Y_{10} z Y_{11} Y_{10}^* d\Omega \\
 &= q\varepsilon \int_0^\pi \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta a_0 \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\
 &= -\frac{9q\varepsilon a_0^3}{16\pi} \int_0^\pi \cos^3 \theta \sin^3 \theta d\theta = 0
 \end{aligned}$$

El resto de los elementos son cero y, en consecuencia, esta matriz también es nula. Se tomarán ahora los valores $l_1 = 0$ y $l_2 = 2$, así, la energía correspondiente a estos valores está dada como:

$$E_{0,2} = \frac{\hbar^2}{2md_o^2}(0)(1) + \frac{\hbar^2}{2md_o^2}(2)(3) + V = 3\frac{\hbar^2}{md_o^2} + V$$

Los estados asociados a esta energía tienen la forma $|0\ 0\ 2\ m_2\rangle$, donde $m_2 = -2, -1, 0, 1, 2$, lo cual implica que la matriz H_p es una matriz 5×5 . A continuación, se calcularán entonces los elementos que, en principio, serían distintos de cero:

$$\begin{aligned} \langle 0\ 0\ 2\ 0 | \hat{H}_p | 0\ 0\ 2\ 0 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{00}^* Y_{20} z Y_{00} Y_{20}^* d\Omega \\ &= q\varepsilon \int_0^\pi \frac{1}{4\pi} \frac{5}{16\pi} (3\cos^3\theta - 1)^2 a_0 \cos\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= \frac{5q\varepsilon a_0}{32} \left[9 \int_0^\pi \cos^5\theta \sin\theta d\theta - 6 \int_0^\pi \cos^3\theta \sin\theta d\theta + \int_0^\pi \cos\theta \sin\theta d\theta \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 0\ 0\ 2\ -1 | \hat{H}_p | 0\ 0\ 2\ 1 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{00}^* Y_{21} z Y_{00} Y_{21}^* d\Omega \\ &= q\varepsilon \int_0^\pi \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos\theta \sin\theta a_0 \cos\theta \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= \frac{15q\varepsilon a_0^3}{32\pi} \int_0^\pi \cos^5\theta \sin\theta d\theta = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle 0\ 0\ 2\ -2 | \hat{H}_p | 0\ 0\ 2\ 2 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{00}^* Y_{22} z Y_{00} Y_{22}^* d\Omega \\ &= q\varepsilon a_0 \frac{15}{32\pi} \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \cos^3\theta \sin^3\theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{-2i\varphi} e^{2i\varphi} d\varphi \\ &= \frac{15q\varepsilon a_0^3}{64\pi} \int_0^\pi \cos^3\theta \sin^3\theta d\theta = 0 \end{aligned}$$

De modo que esta matriz también es nula. Se ocupará ahora el caso donde $l_1 = 1$ y $l_2 = 2$, así $m_1 = -1, 0, 1$ y $m_2 = -2, -1, 0, 1, 2$. La energía estaría dada de la forma:

$$E_{1,2} = \frac{\hbar^2}{2md_o^2}(1)(2) + \frac{\hbar^2}{2md_o^2}(2)(3) + V = 4\frac{\hbar^2}{md_o^2} + V$$

Se puede apreciar que existirían 15 estados asociados a esta, los cuales tendrían la forma $|1\ m_1\ 2\ m_2\rangle$, esto implica que la matriz formada debería de ser de 15×15 . Se buscan algunos estados que serían distintos de cero, para ello se investigaron los estados donde la suma de los números m , en la forma en la que se define para la variable α (como se expuso en el apéndice C), en $\langle 1\ m'_1\ 2\ m'_2 | \hat{H}_p | 1\ m_1\ 2\ m_2 \rangle$ sea igual a cero y se concentraron en la tabla mostrada en el cuadro (3.1).

En esta, se puede apreciar que aparecen los posibles valores para los números m según su posición y, por lo tanto, todas las configuraciones posibles. Asimismo, puede verse que se han clasificado en la columna "Grupo" de acuerdo a su similitud, cada grupo es un tipo de integral que depende de la variable θ , es decir, cada grupo indica cuáles de las integrales tienen, por su composición, los mismos exponentes para las funciones trigonométricas $\sin\theta$ y $\cos\theta$, tras la

simplificación del producto de polinomios asociados de Legendre que se tenga, sin tomar en cuenta las constantes que los acompañen. La intención es que no se calculen las integrales para θ más veces de las necesarias. Por ejemplo, se considera que la configuración $m_1 = 1, m_2 = -2, m'_1 = 1, m'_2 = -2$ es la misma que $m_1 = 1, m_2 = 2, m'_1 = 1, m'_2 = 2$ ya que ambas hacen que aparezca el factor $\sin^7 \theta \cos \theta$ en el integrando. Por lo tanto, la integral de la primera configuración será igual a la de la segunda, no así sus constantes, por ello ambas están clasificadas dentro del grupo A.

m_1	m_2	m'_1	m'_2	Grupo
1	-2	1	-2	A
	-1	0	-2	B
		1	-1	B
	0	-1	-2	D
		0	-1	C
		1	0	E
	1	-1	-1	B
		0	0	C
		1	1	B
	2	-1	0	D
0		1	B	
1		2	A	
0	-2	0	-2	B
		1	-1	B
	-1	-1	-2	B
		0	-1	F
		1	0	C
	0	-1	-1	C
		0	0	T
		1	1	C
	1	-1	0	C
		0	1	F
		1	2	B
	2	-1	1	B
0		2	B	
-1	-2	-1	-2	A
		0	-1	B
		1	0	D
	-1	-1	-1	B
		0	0	C
		1	1	B
	0	-1	0	E
		0	1	C
		1	2	D
	1	-1	1	B
		0	2	B
	2	-1	2	A

Tabla 3.1: Configuraciones para los números m las cuales pueden dar resultados distintos de cero. Cada una de estas clasificaciones está configurada dentro de un grupo que las clasifica de acuerdo a los resultados que produzcan, es decir, las configuraciones de un mismo Grupo producen el mismo resultado por que los elementos que conforman las integrales que producen son los mismos.

Con base en la tabla antes vista, en lo siguiente se procede a determinar sólo una integral

representativa de cada grupo. Con los resultados ya depurados, se tiene:

■ Clasificación A

$$\begin{aligned}\langle 1 \ 1 \ 2 \ 2 | \hat{H}_p | 1 \ -1 \ 2 \ -2 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{11} Y_{22} z Y_{1-1} Y_{2-2} \, d\Omega \\ &= \frac{45q\varepsilon a_0}{128\pi} \int_0^\pi \sin^7 \theta \cos \theta \, d\theta \\ &= 0\end{aligned}$$

■ Clasificación B

$$\begin{aligned}\langle 1 \ -1 \ 2 \ 2 | \hat{H}_p | 1 \ 0 \ 2 \ -1 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{1-1} Y_{22} z Y_{10} Y_{2-1} \, d\Omega \\ &= \frac{45q\varepsilon a_0}{8\sqrt{2}\pi} \int_0^\pi \sin^5 \theta \cos^3 \theta \, d\theta \\ &= 0\end{aligned}$$

■ Clasificación C

$$\begin{aligned}\langle 1 \ -1 \ 2 \ 0 | \hat{H}_p | 1 \ 0 \ 2 \ 1 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{1-1} Y_{20} z Y_{10} Y_{21} \, d\Omega \\ &= -\frac{15\sqrt{3}q\varepsilon a_0}{32\pi} \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^3 \theta (3\cos^2 \theta - 1) \, d\theta \\ &= -\frac{15\sqrt{3}q\varepsilon a_0^3}{32\pi} \left[3 \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^5 \theta \, d\theta - \int_0^\pi \sin^3 \theta \cos^3 \theta \, d\theta \right] \\ &= 0\end{aligned}$$

■ Clasificación D

$$\begin{aligned}\langle 1 \ -1 \ 2 \ 0 | \hat{H}_p | 1 \ -1 \ 2 \ 2 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{1-1} Y_{20} z Y_{1-1} Y_{22} \, d\Omega \\ &= \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{15q\varepsilon a_0}{64\pi} \int_0^\pi \sin^5 \theta \cos \theta (3\cos^2 \theta - 1) \, d\theta \\ &= \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{15q\varepsilon a_0}{64\pi} \left[3 \int_0^\pi \sin^5 \theta \cos^3 \theta \, d\theta - \int_0^\pi \sin^5 \theta \cos \theta \, d\theta \right] \\ &= 0\end{aligned}$$

■ Clasificación E

$$\begin{aligned}\langle 1 \ -1 \ 2 \ 0 | \hat{H}_p | 1 \ 1 \ 2 \ 0 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{1-1} Y_{20} z Y_{11} Y_{20} \, d\Omega \\ &= -\frac{15q\varepsilon a_0}{64\pi} \int_0^\pi \cos \theta \sin^3 \theta (3\cos^2 \theta - 1)^2 \, d\theta \\ &= -\frac{15q\varepsilon a_0}{64\pi} \int_0^\pi [9\sin^3 \theta \cos^5 \theta - 6\sin^3 \theta \cos^3 \theta + \sin^3 \theta \cos \theta] \, d\theta \\ &= 0\end{aligned}$$

■ Clasificación F

$$\begin{aligned}\langle 1 \ 0 \ 2 \ -1 | \hat{H}_p | 1 \ 0 \ 2 \ 1 \rangle &= q\varepsilon \int Y_{10} Y_{2-1} z Y_{10} Y_{21} \, d\Omega \\ &= -\frac{45q\varepsilon a_0}{16\pi} \int_0^\pi \cos^5 \theta \sin^3 \theta \, d\theta \\ &= 0\end{aligned}$$

El resto de los elementos de matriz calculados también vale cero. Por lo tanto, se concluye que esta matriz es nula.

Capítulo 4

Discusión y conclusión

4.1. Sistema sin degeneración

La energía del estado base de la molécula del agua, donde $l_1 = l_2 = 0$, está dada de la siguiente forma:

$$E_{00}^{(0)} = V = -23,4 \text{ eV}$$

Luego, la eigenenergía del hamiltoniano de la perturbación para la molécula del agua, donde la perturbación corresponde a un campo eléctrico externo, obtenida por medio de la teoría de perturbaciones y manejada a segundo orden sería:

$$E_{00} \approx V - \left(\frac{q\varepsilon d_o^2}{\hbar\pi} \right)^2 \frac{m}{48}$$

En consecuencia, es posible encontrar que el eigenestado del sistema no degenerado, aproximado a primer orden, está dado de la forma:

$$|\psi_{0,0}\rangle = |0\ 0\ 0\ 0\rangle - \frac{q\varepsilon a_0 m d_o^2}{4\pi\hbar^2} \left(\frac{\sqrt{3}}{3} |1\ 0\ 0\ 0\rangle + \frac{\sqrt{15}}{30} |2\ 0\ 1\ 0\rangle + \dots \right)$$

4.2. Sistema con degeneración

Es imposible construir una matriz de estados H_p distinta a la matriz nula para los estados correspondientes a las energías $E_{0,1}$, $E_{1,1}$, $E_{0,2}$ y $E_{1,2}$ las cuales tienen degeneración. De hecho, por la forma en que están contruidos los estados que se están tomando en cuenta, donde $l_1 = l'_1$ y $l_2 = l'_2$, o bien, $l_1 = l_3$ y $l_2 = l_4$, entonces, $\beta = l_1 + l_2 + l_3 + l_4 = 2l_1 + 2l_2 = 2(l_1 + l_2)$, el cual es un número par sin importar los valores de l_1 y l_2 , haciendo que se cumpla siempre la condición expresada en (C.6) dentro del teorema ubicado en el apéndice C. Como consecuencia de lo anterior, el resultado de las integrales resultantes siempre va a ser cero, lo cual implica que los elementos de la matriz de perturbación, H_p , serán únicamente ceros. Por lo tanto, dada la imposibilidad de construir una matriz de la perturbación distinta a la matriz nula para cualquier estado que se proponga, determinar los eigenvalores de esa matriz y las funciones de onda asociadas a los estados correspondientes tampoco es posible.

4.3. Interacción del campo eléctrico de un teléfono celular con la molécula del agua

Como se puede apreciar en los resultados descritos anteriormente, sólo es posible obtener valores concretos con la parte del sistema que no presenta degeneración. A continuación, se usará lo que ya se ha obtenido para determinar si existe algún tipo de alteración significativa en la molécula del agua debido a los campos eléctricos emitidos por los teléfonos celulares, en concreto, se intentarán ver estas alteraciones en los eigenvalores de la energía y sus eigenestados. Es importante tener presente en todo momento que, si la presencia de estos campos eléctricos altera de manera significativa a la molécula del agua, esto podría representar un riesgo para la salud pública. Estas alteraciones podrán apreciarse en la corrección al eigenvalor de la energía del sistema no perturbado, es decir, determinando qué tanta energía se obtiene por parte de la perturbación, y en la forma en la que cambia la eigenfunción de este mismo sistema.

Los teléfonos celulares convencionales emiten un campo eléctrico con una magnitud que va de 1 a 13 V/m, de modo que, en lo siguiente, se trabajará con este rango de magnitudes. Otras cantidades que es necesario precisar son: $a_0 = d_0$ (por la forma en la que se modeló la molécula) y $m = 2,99 \times 10^{-26} \text{ kg}$ (lo cual corresponde a 18 una que es la masa de una molécula de agua).

De esta manera, ya es posible obtener $\left(\frac{q\varepsilon d_o^2}{\hbar\pi}\right)^2 \frac{m}{48}$ dentro de la ecuación (3.6). Se comenzará utilizando la cantidad de 13 V/m para obtener el valor máximo. Sustituyendo todas las cantidades se obtiene que:

$$\left(\frac{q\varepsilon d_o^2}{\hbar\pi}\right)^2 \frac{m}{48} \approx 1,29 \times 10^{-27} \text{ eV}$$

Es importante notar que, siendo este el valor máximo para la magnitud del campo eléctrico, al sustituir con el valor mínimo, 1 V/m, el resultado obtenido será aun menor. Ambos resultados, entonces, están muy lejos (a varios ordenes de magnitud) de poder ser parecidos a la magnitud del potencial V . En consecuencia,

$$E_0 \approx V - \left(\frac{q\varepsilon d_o^2}{\hbar\pi}\right)^2 \frac{m}{48} \approx -23,4 \text{ eV}$$

Por lo tanto, los eigenvalores de la energía de la molécula del agua prácticamente no se ven modificados debido a la interacción con los campos eléctricos de estas magnitudes.

Ahora, es turno de realizar este mismo proceso para los eigenestados. Nótese que, de acuerdo con los resultados de la primera sección de este capítulo, la cantidad por determinar ahora es $\frac{q\varepsilon m d_o^3}{4\pi\hbar^2}$. Sustituyendo con los valores ya conocidos y ocupando la magnitud máxima del campo eléctrico, se obtiene que:

$$\frac{q\varepsilon m d_o^3}{4\pi\hbar^2} \approx 3,92 \times 10^{-7}$$

Una vez más, ocupar la magnitud mínima haría que el resultado fuese menor. Luego, ambos resultados son tan pequeños que no aportan una contribución significativa para modificar el eigenestado de la molécula del agua, así:

$$|\psi_{0,0}\rangle = |0\ 0\ 0\ 0\rangle - \frac{q\varepsilon a_0 m d_o^2}{4\pi\hbar^2} \left(\frac{\sqrt{3}}{3} |1\ 0\ 0\ 0\rangle + \frac{\sqrt{15}}{30} |2\ 0\ 1\ 0\rangle + \dots \right) \approx |0\ 0\ 0\ 0\rangle$$

4.4. Conclusiones

Las herramientas proporcionadas por la teoría de perturbaciones, en conjunto con las consideraciones que se tomaron para poder modelar el sistema en cuestión (el cual, por su puesto, ha permitido obtener el hamiltoniano que caracteriza a este sistema), han sido de utilidad para analizar la forma en la que un campo eléctrico interactúa con la molécula del agua a nivel cuántico. Por una parte, es claro ver que, tras el estudio que se realizó de la única configuración de la molécula del agua a la cual le corresponde una energía sin degeneración, se puede mostrar que, para el caso de interés, el campo eléctrico de los teléfonos celulares, añadidos como una perturbación, es incapaz de alterar significativamente los eigenvalores y los eigenestados asociados con el hamiltoniano no perturbado de la molécula.

En el primer caso, la corrección que se hace a los eigenvalores de la energía, tomando como perturbación un campo eléctrico de 13 V/m , es de $1,29 \times 10^{-27} \text{ eV}$, la cual es una cantidad ínfima en comparación a los $-23,4 \text{ eV}$ del estado base. En el segundo caso, los eigenestados asociados con el hamiltoniano de la perturbación tienen como factor común una constante cuyo valor es de $3,92 \times 10^{-7}$ (una vez más, asociada con el valor de 13 V/m para el campo eléctrico), la cual es muy pequeña comparada con 1, por lo tanto, es posible despreciar a estos eigenestados ya que no representan una contribución importante. En consecuencia, el campo eléctrico de un teléfono celular difícilmente podría llegar a hacer que la molécula del agua, estando en el estado base, inicie el proceso de la radiólisis y que forme un radical libre. Lo anterior sugiere que la radiación asociada a los teléfonos inteligentes difícilmente podría llegar a contribuir en el aumento de la probabilidad de padecer algún tipo de cáncer, al menos, a corto plazo.

Por otra parte, para las energías que sí presentan degeneración no fue posible formar una matriz de perturbación para poder aplicar el método de la teoría de perturbaciones. Lo anterior se debe a que todos los estados posibles en los que pudiese estar la molécula del agua, descritos por los números cuánticos correspondientes a cada protón, l_i , m_i , l'_i y m'_i , donde $i = 1, 2$, cumplen, de una manera u otra, las condiciones (C.5) y (C.6) expresadas en el teorema del apéndice C. Es conveniente recordar que dichas condiciones son, por sí solas, suficientes para obtener un cero como resultado. En otras palabras, todas las configuraciones posibles llevan obtener elementos nulos dentro de la matriz de perturbaciones. Ahora bien, al analizar este problema en los ejes restantes, se llega a un resultado análogo al análisis realizado en el eje z . Al final, se determina que las condiciones (D.1) y (D.3), junto con (D.2) y (D.4), son idénticas entre sí dada la simetría con la que fue construido el presente análisis.

Finalmente, se concluye que, de acuerdo con la teoría de perturbaciones y los análisis teóricos que se siguen de esta, la molécula del agua es incapaz de ser alterada considerablemente al interactuar con los campos eléctricos. En consecuencia, los campos eléctricos asociados a la telefonía difícilmente podrían llegar a ser un riesgo considerable para la salud pública dado que, en el cuerpo humano, esta molécula se encuentra en su estado base, razón por la cual este fue el estado de mayor interés a lo largo de este trabajo. Sin embargo, no se descarta la posibilidad de que este problema deba ser estudiado con algún otro método de aproximación o, incluso, de manera experimental con el objetivo de que se puedan corroborar los resultados que se han presentado.

Apéndice A

Consideraciones sobre el sistema de referencia

En esta sección se detallará el proceso mediante el cual fue posible reducir la cantidad de variables angulares. Recordemos que, de acuerdo con la ecuación (1.4), los armónicos esféricos están dados de la forma:

$$Y_{l_i m_i}(\theta_i, \varphi_i) = (-1)^{m_i} \sqrt{\frac{2l_i + 1}{4\pi} \frac{(l_i - m_i)!}{(l_i + m_i)!}} P_{l_i m_i}(\cos \theta_i) e^{im_i \varphi}$$

donde $i = 1, 2$, es decir, la ecuación anterior en realidad concentra 2 ecuaciones de dos variables cada una. Como se ha mencionado anteriormente, cada subíndice hace referencia a cada uno de los protones los cuales no se mueven de manera libre, pues ya se dijo que existe una restricción la cual hace que las distancias entre los protones y de cada uno de estos al núcleo de oxígeno permamezcan inmutables. Conocer las limitantes que presenta nuestro sistema en cuanto a su movimiento resulta de bastante importancia, ya que con esto podemos esperar que la forma triangular que caracteriza a la molécula del agua se mantenga en todo momento.

Anteriormente, se había comentado que el sistema de referencia está centrado en el núcleo del átomo de oxígeno, así que si mantenemos esta idea, ya se tiene el lugar donde se ha posicionado el marco inercial, lo único que falta por determinar es su orientación. Juntando los hechos de que los protones orbitan al átomo de oxígeno, que la forma entre estos cuerpos siempre se mantiene igual y que se cuenta con la libertad de poder elegir la orientación del sistema de referencia, se tienen todos los elementos necesarios para obtener el resultado deseado. Por último, es conveniente, por simplicidad, escribir la ecuación (1.4) de la siguiente forma:

$$Y_{l_i m_i}(\theta_i, \varphi_i) = A_{l_i m_i} P_{l_i m_i}(\cos \theta_i) Q_{m_i}(\varphi_i) \quad (\text{A.1})$$

En primer lugar, los primeros dos hechos que se consideraron en el párrafo pasado aseguran que siempre podamos hallar un plano en el que los protones estén orbitando al oxígeno. Si estos protones se mueven siempre en un plano en común, entonces la variable θ_i queda fija tanto para el protón 1 como para el 2, por lo tanto, no tiene sentido mantener un subíndice que indique el ángulo azimutal de cada protón si es el mismo en ambos casos. De lo anterior se concluye entonces que $\theta_1 = \theta_2 = \theta$.

En segundo lugar, se verá que resulta conveniente acomodar el sistema de referencia de la manera que se muestra en la figura A.1. Como se puede apreciar en dicha figura, el ángulo φ_1 y el φ_2 son, esencialmente, los mismos, pues se está ocupando al eje x como la bisectriz del ángulo formado por la configuración protón-oxígeno-protón. Sin embargo, de acuerdo con la convención utilizada, en realidad se tiene que $\varphi_2 = -\varphi_1$. De acuerdo con la ecuación (A.1), este cambio sólo

puede repercutir en las funciones exponenciales, de tal forma que, para estas, cuando $i = 2$, se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} Q_{m_2}(\varphi_2) &= e^{im_2\varphi_2} \\ &= e^{im_2(-\varphi_1)} \\ &= e^{-im_2\varphi_1} \end{aligned}$$

Es fácil notar que esto último correspondería al conjugado de la función Q_{m_2} , pero con la variable φ_1 , entonces:

$$Q_{m_2}(\varphi_2) = Q_{m_2}^*(\varphi_1)$$

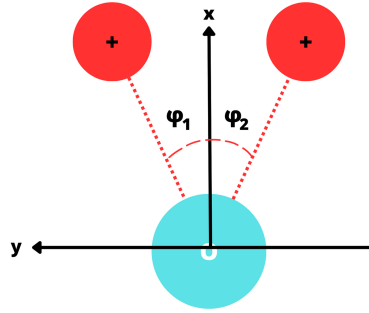


Figura A.1: El sistema de referencia se orienta de tal forma que el eje x actúa como una bisectriz, haciendo que $\varphi_2 = -\varphi_1$.

Sustituyendo con lo obtenido anteriormente, respecto a θ_2 y $Q_{m_2}(\varphi_2)$, en la ecuación (A.1) con $i = 2$, se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \varphi_2) &= A_{l_2 m_2} P_{l_2 m_2}(\cos \theta_2) Q_{m_2}(\varphi_2) \\ &= A_{l_2 m_2} P_{l_2 m_2}(\cos \theta_1) Q_{m_2}^*(\varphi_1) \\ &= Y_{l_2 m_2}^*(\theta_1, \varphi_1) \end{aligned}$$

Siendo que para $i = 1$ se tiene:

$$Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \varphi_1) = A_{l_1 m_1} P_{l_1 m_1}(\cos \theta_1) Q_{m_1}(\varphi_1)$$

no tiene sentido mantener el subíndice en los ángulos como se había mencionado anteriormente. De esta forma, obtenemos las expresiones para los armónicos esféricos en términos de dos variables angulares:

$$\boxed{Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \varphi_1) = Y_{l_1 m_1}(\theta, \varphi) = A_{l_1 m_1} P_{l_1 m_1}(\cos \theta) Q_{m_1}(\varphi)} \quad (\text{A.2})$$

$$\boxed{Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \varphi_2) = Y_{l_2 m_2}^*(\theta, \varphi) = A_{l_2 m_2} P_{l_2 m_2}(\cos \theta) Q_{m_2}^*(\varphi)} \quad (\text{A.3})$$

Apéndice B

Teorema de las integrales de senos y cosenos

En este apartado se determinará si, en general, las integrales de senos y cosenos en donde estas funciones trigonométricas tienen exponentes impares, es decir, las integrales de la forma

$$\int_0^\pi (\sin \theta)^{2r+1} (\cos \theta)^{2s+1} d\theta$$

son iguales a cero, siendo r y s valores enteros no negativos. A continuación, se muestra el proceso para resolver la integral:

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\pi (\sin \theta)^{2r+1} (\cos \theta)^{2s+1} d\theta \\ &= \int_0^\pi (\cos \theta)^{2s+1} (\sin^2 \theta)^r \sin \theta d\theta \\ &= \int_0^\pi (\cos \theta)^{2s+1} (1 - \cos^2 \theta)^r \sin \theta d\theta \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de la identidad pitagórica $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$. Haciendo uso del binomio de Newton se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\pi (\cos \theta)^{2s+1} \sum_{k=0}^r \binom{r}{k} (1)^{r-k} (-\cos^2 \theta)^k \sin \theta d\theta \\ &= \int_0^\pi (\cos \theta)^{2s+1} \sum_{k=0}^r \binom{r}{k} (-1)^k (\cos^2 \theta)^k \sin \theta d\theta \\ &= \sum_{k=0}^r \binom{r}{k} (-1)^k \int_0^\pi (\cos \theta)^{2(s+k)+1} \sin \theta d\theta \end{aligned}$$

Se hace el cambio de variable $u = \cos \theta \Rightarrow du = -\sin \theta d\theta$. Adicionalmente, es necesario cambiar los límites de la integral; veamos que si $\theta = 0$ entonces $u = 1$ y, por otra parte, si $\theta = \pi$, entonces $u = -1$. Aplicando estos cambios en la integral se obtiene:

$$\begin{aligned}
 I &= \sum_{k=0}^r \binom{r}{k} (-1)^k \int_{-1}^1 u^{2(s+k)+1} du \\
 &= \sum_{k=0}^r \binom{r}{k} (-1)^k \left[\frac{u^{2(s+k)+1}}{(2(s+k)+1)+1} \right]_{-1}^1 \\
 &= \sum_{k=0}^r \binom{r}{k} (-1)^k \left[\frac{u^{2(s+k+1)}}{2(s+k+1)+1} \right]_{-1}^1 \\
 &= \sum_{k=0}^r \binom{r}{k} (-1)^k \left[\frac{(1)^{2(s+k+1)} - (-1)^{2(s+k+1)}}{2(s+k+1)+1} \right] \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

ya que $2(s+k+1)$ es un número par para cualquier valor que tome k . Por lo tanto, en este apartado se concluye que:

$$\therefore \int_0^\pi (\sin \theta)^{2r+1} (\cos \theta)^{2s+1} d\theta = 0, \quad \forall r, s \in \mathbb{N}$$

Apéndice C

Teorema para los números cuánticos

En este apéndice se probará el teorema formulado como resultado de los cálculos realizados en este trabajo y que, a su vez, sustenta las conclusiones del mismo así como a los propios resultados. Como se podrá apreciar, en lo siguiente se utilizan los resultados obtenidos de los apéndices anteriores. Finalmente, antes de enunciar el teorema, es conveniente presentar primero algunas definiciones: $l_3 \equiv l'_1$; $l_4 \equiv l'_2$; $\alpha \equiv -m_1 + m_2 + m_3 - m_4$; $\beta \equiv \sum_{j=1}^4 l_j$.

Teorema: Si $\alpha \neq 0$ o β es un número par, entonces $\langle l_1 \ m_1 \ l_2 \ m_2 | \hat{Z} | l_3 \ m_3 \ l_4 \ m_4 \rangle = 0$.

Demostración:

Se desarrolla primero la integral relacionada con los estados involucrados:

$$\begin{aligned} \langle l_1 \ m_1 \ l_2 \ m_2 | \hat{Z} | l_3 \ m_3 \ l_4 \ m_4 \rangle &= \int Y_{l_1 m_1}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{l_2 m_2}^*(\theta_2, \varphi_2) z Y_{l_3 m_3}(\theta_1, \varphi_1) Y_{l_4 m_4}(\theta_2, \varphi_2) d\Omega \\ &= \int Y_{l_1 m_1}^*(\theta, \varphi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \varphi) a_0 \cos \theta Y_{l_3 m_3}(\theta, \varphi) Y_{l_4 m_4}^*(\theta, \varphi) d\Omega \quad (C.1) \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de los resultados expuestos en las ecuaciones (A.2) y (A.3). Posteriormente, usando la ecuación (A.1), es posible separar la integral para θ de la integral para φ obteniendo lo siguiente:

$$= a_0 \left(\prod_{j=1}^4 A_{l_j m_j} \right) \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta \left(\prod_{j=1}^4 P_{l_j m_j} \right) d\theta \int_0^{2\pi} e^{-im_1 \varphi} e^{im_2 \varphi} e^{im_3 \varphi} e^{-im_4 \varphi} d\varphi$$

Se le asigna un nombre a cada integral de la siguiente forma:

$$I_1(\varphi) = \int_0^{2\pi} e^{-im_1 \varphi} e^{im_2 \varphi} e^{im_3 \varphi} e^{-im_4 \varphi} d\varphi \quad (C.2)$$

$$I_2(\theta) = \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta \left(\prod_{j=1}^4 P_{l_j m_j} \right) d\theta \quad (C.3)$$

de tal forma que se tiene la siguiente ecuación:

$$\langle l_1 \ m_1 \ l_2 \ m_2 | \hat{Z} | l_3 \ m_3 \ l_4 \ m_4 \rangle = a_0 \left(\prod_{j=1}^4 A_{l_j m_j} \right) I_1(\varphi) I_2(\theta) \quad (\text{C.4})$$

Se puede ver claramente que la ecuación (C.4) es cero si y sólo si $I_1(\varphi) = 0$ o $I_2(\theta) = 0$, de modo que se procede a buscar las condiciones para las cuales se dan los casos anteriores. Se comenzará analizando el caso de $I_1(\varphi)$ en primer lugar. Partiendo de la ecuación (C.2) se obtiene:

$$\begin{aligned} I_1(\varphi) &= \int_0^{2\pi} e^{-im_1\varphi} e^{im_2\varphi} e^{im_3\varphi} e^{-im_4\varphi} d\varphi \\ &= \int_0^{2\pi} e^{i(-m_1+m_2+m_3-m_4)\varphi} d\varphi \\ &= \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} d\varphi \end{aligned}$$

donde $\alpha \equiv -m_1 + m_2 + m_3 - m_4$. Luego:

$$\begin{aligned} I_1(\varphi) &= \left[\frac{1}{i\alpha} e^{i\alpha\varphi} \right]_0^{2\pi} \\ &= \frac{e^{i\alpha} - 1}{i\alpha} \\ &= \frac{\cos 2\pi\alpha + i \sin 2\pi\alpha - 1}{i\alpha} \end{aligned}$$

Es necesario notar que α es, por definición, un número entero, por lo tanto, $2\pi\alpha$ son múltiplos pares de π , de modo que:

$$I_1(\varphi) = \frac{1 - 1}{i\alpha} = 0$$

para $\alpha \neq 0$. Finalmente, la conclusión del análisis de la integral $I_1(\varphi)$ es:

$$\boxed{\alpha \neq 0 \Rightarrow I_1(\varphi) = 0} \quad (\text{C.5})$$

Ahora bien, se procede a continuar con el análisis para la integral $I_2(\theta)$, para ello es conveniente recordar que los polinomios asociados de Legendre se pueden representar, en este caso, como:

$$P_{lm}(\cos \theta) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1 - \cos^2 \theta)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\cos^2 \theta - 1)^l$$

donde se está tomando la convención donde aparece la fase de Condon-Shortley, $(-1)^m$, y se está considerando $m \geq 0$. Los polinomios asociados de Legendre cuando $m < 0$ son proporcionales a los anteriores:

$$P_{lm}(\cos \theta) = (-1)^{|m|} \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!} P_{l|m|}(\cos \theta)$$

es decir,

$$P_{lm}(\cos \theta) = \frac{(-1)^{2|m|}}{2^l l!} \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!} \sin^{|m|} \theta \frac{d^{l+|m|}}{d(\cos \theta)^{l+|m|}} (\cos^2 \theta - 1)^l$$

Como se puede ver, lo que diferencia a estos polinomios del caso donde m es positivo es un factor constante el cual no altera el exponente de $\sin \theta$ ni el orden del polinomio.

Se define Ξ_{lm} como:

$$\Xi_{lm} = \begin{cases} (-1)^{|m|} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} & \text{cuando } m < 0 \\ 1 & \text{cuando } m \geq 0 \end{cases}$$

de tal forma que

$$P_{lm}(\cos \theta) = \Xi_{lm} P_{l|m|}(\cos \theta) = \begin{cases} (-1)^{|m|} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} P_{l|m|}(\cos \theta) & \text{cuando } m < 0 \\ P_{lm}(\cos \theta) & \text{cuando } m \geq 0 \end{cases}$$

Entonces, $I_2(\theta)$ se expresa de la forma:

$$\begin{aligned} I_2(\theta) &= \int_0^\pi d\theta \cos \theta \sin \theta \prod_{j=1}^4 \left[\frac{(-1)^{|m_j|} \Xi_{l_j m_j}}{2^{l_j} l_j!} (\sin^2 \theta)^{|m_j|/2} \frac{d^{l_j+|m_j|}}{d(\cos \theta)^{l_j+|m_j|}} (\cos^2 \theta - 1)^{l_j} \right] \\ &= \int_0^\pi d\theta \cos \theta \sin \theta (\sin \theta)^{\sum_{j=1}^4 |m_j|} \frac{(-1)^{|m_j|}}{2^{\sum_{j=1}^4 l_j}} \left(\prod_{j=1}^4 \frac{\Xi_{l_j m_j}}{l_j!} \right) \prod_{j=1}^4 \left[\frac{d^{l_j+|m_j|}}{d(\cos \theta)^{l_j+|m_j|}} (\cos^2 \theta - 1)^{l_j} \right] \\ &= \frac{(-1)^\lambda}{2^\beta} \left(\prod_{j=1}^4 \frac{\Xi_{l_j m_j}}{l_j!} \right) \int_0^\pi d\theta \cos \theta (\sin \theta)^{\lambda+1} \prod_{j=1}^4 \left[\frac{d^{l_j+|m_j|}}{d(\cos \theta)^{l_j+|m_j|}} (\cos^2 \theta - 1)^{l_j} \right] \end{aligned}$$

donde $\beta = \sum_{j=1}^4 l_j$ y $\lambda = \sum_{j=1}^4 |m_j|$. Usando el binomio de Newton se obtiene:

$$\begin{aligned} I_2(\theta) &= \frac{(-1)^\lambda}{2^\beta} \left(\prod_{j=1}^4 \frac{\Xi_{l_j m_j}}{l_j!} \right) \int_0^\pi d\theta \cos \theta (\sin \theta)^{\lambda+1} \\ &\quad \prod_{j=1}^4 \left[\frac{d^{l_j+|m_j|}}{d(\cos \theta)^{l_j+|m_j|}} \left\{ \sum_{k_j=0}^{l_j} \binom{l_j}{k_j} (\cos^2 \theta)^{l_j-k_j} (-1)^{k_j} \right\} \right] \\ &= \frac{(-1)^\lambda}{2^\beta} \left(\prod_{j=1}^4 \frac{\Xi_{l_j m_j}}{l_j!} \right) \int_0^\pi d\theta \cos \theta (\sin \theta)^{\lambda+1} \\ &\quad \prod_{j=1}^4 \left[\sum_{k_j=0}^{l_j} \binom{l_j}{k_j} (-1)^{k_j} \frac{d^{l_j+|m_j|}}{d(\cos \theta)^{l_j+|m_j|}} (\cos \theta)^{2(l_j-k_j)} \right] \end{aligned}$$

Notemos que, al derivar, el límite superior de la sumatoria debe cambiar pues se tiene la restricción de que el orden de la derivada debe ser menor o igual al orden máximo del polinomio, de lo contrario, el resultado de la derivación sería cero directamente, es decir, $l_j + |m_j| \leq 2(l_j - k_j)$, entonces se tiene que $-l_j + |m_j| \leq -2k_j$, o bien, $k_j \leq \frac{l_j - |m_j|}{2} \equiv \tilde{k}_j$, lo cual constituye el valor máximo que podría adquirir k_j . Los valores mayores a este harían que el exponente de la función coseno sea negativo, cosa que en este contexto no tendría sentido. Entonces:

$$\begin{aligned}
 I_2(\theta) &= \frac{(-1)^\lambda}{2^\beta} \left(\prod_{j=1}^4 \frac{\Xi_{l_j m_j}}{l_j!} \right) \int_0^\pi d\theta \cos \theta (\sin \theta)^{\lambda+1} \\
 &\quad \prod_{j=1}^4 \left[\sum_{k_j=0}^{\tilde{k}_j} \binom{l_j}{k_j} (-1)^{k_j} \frac{(2(l_j - k_j))!}{(l_j - |m_j| - 2k_j)!} \cos \theta^{l_j - |m_j| - 2k_j} \right] \\
 &= \frac{(-1)^\lambda}{2^\beta} \left(\prod_{j=1}^4 \frac{\Xi_{l_j m_j}}{l_j!} \right) \int_0^\pi d\theta \cos \theta \sin \theta \\
 &\quad \prod_{j=1}^4 \left[\sum_{k_j=0}^{\tilde{k}_j} \binom{l_j}{k_j} (-1)^{k_j} \frac{(2(l_j - k_j))!}{(l_j - |m_j| - 2k_j)!} (\sin \theta)^{|m_j|} (\cos \theta)^{l_j - |m_j| - 2k_j} \right]
 \end{aligned}$$

A continuación se probará que los exponentes correspondientes a los términos del polinomio que resulta de la productoria son pares tanto para el seno como para el coseno. Por una parte, se puede ver que β siempre es par ya que, por la forma en la que se eligen los estados, $l_1 = l_3$ y $l_2 = l_4$, luego, de acuerdo con la forma en la que se definió β :

$$\beta = \sum_{j=1}^4 l_j = l_1 + l_2 + l_3 + l_4 = 2l_1 + 2l_2 = 2(l_1 + l_2)$$

que es un número par para cualquier valor que tomen l_1 y l_2 .

Ahora bien, es posible probar que λ es para dado que $\alpha = 0$. Es necesario recordar que $\alpha \equiv -m_1 + m_2 + m_3 - m_4$. Sean $\tilde{m}_1 = -m_1$, $\tilde{m}_2 = m_2$, $\tilde{m}_3 = m_3$ y $\tilde{m}_4 = -m_4$, entonces $\alpha = \sum_{j=1}^4 \tilde{m}_j = 0$. Luego, es posible ver que $|\tilde{m}_j| = |m_j|$, entonces $\lambda \equiv \sum_{j=1}^4 m_j = \sum_{j=1}^4 \tilde{m}_j$. Si $\alpha = 0$, esto quiere decir que el valor absoluto de la suma de los números positivos es igual a la de los números negativos para que así puedan anularse entre sí, entonces, es posible reescribir α como:

$$\alpha = \sum_{j=1}^4 \delta_{|m_j|, m_j} |\tilde{m}_j| - \sum_{j=1}^4 \delta_{-|m_j|, m_j} |\tilde{m}_j| = 0$$

donde δ es la delta de Kronecker. Entonces, se deduce que:

$$\sum_{j=1}^4 \delta_{|m_j|, m_j} |\tilde{m}_j| = \sum_{j=1}^4 \delta_{-|m_j|, m_j} |\tilde{m}_j|$$

Reescribiendo λ de forma análoga se obtiene:

$$\lambda = \sum_{j=1}^4 \tilde{m}_j = \sum_{j=1}^4 \delta_{|m_j|, m_j} |\tilde{m}_j| + \sum_{j=1}^4 \delta_{-|m_j|, m_j} |\tilde{m}_j| = 2 \sum_{j=1}^4 \delta_{|m_j|, m_j} |\tilde{m}_j|$$

donde se ha utilizado el resultado proveniente de la ecuación para α . Este último resultado demuestra que, efectivamente, λ siempre es un número par, en consecuencia, $(\sin \theta)^\lambda$ siempre tiene exponente par y, luego, $(\sin \theta)^{\lambda+1}$ tiene exponente impar.

Finalmente, el exponente de $\cos \theta$ de cualquier término del polinomio resultante de la productoria se puede expresar de la forma $\beta - \lambda - 2 \sum_{j=1}^4 k_j$ el cual siempre es un número ya que, como se probó anteriormente, β y λ lo son, y $2 \sum_{j=1}^4 k_j$ lo es por definición. Luego, se puede ver que $(\cos \theta)^{\beta - \lambda - 2(\sum_{j=1}^4 k_j) + 1}$ tiene exponente impar. Esto conduce a que dentro de la integral se tenga un polinomio cuyos términos están representados por $(\sin \theta)^{\lambda+1} (\cos \theta)^{\beta - \lambda - 2(\sum_{j=1}^4 k_j) + 1}$ donde los exponentes son impares. Es decir, lo anterior nos da una integral de la forma:

$$\int_0^\pi (\sin \theta)^{2r+1} \cos \theta^{2s+1} d\theta$$

la cual, como se mostró en el apéndice B, vale cero, entonces $I_2(\theta) = 0$.

La conclusión del análisis para la integral $I_2(\theta)$ es:

$$\boxed{\text{Si } \beta \text{ es un número par} \Rightarrow I_2(\theta) = 0} \quad (\text{C.6})$$

Finalmente, de acuerdo con las condiciones expresadas en (C.5) y (C.6), se puede deducir fácilmente, de la ecuación (C.4), que $\langle l_1 \ m_1 \ l_2 \ m_2 | \hat{Z} | l_3 \ m_3 \ l_4 \ m_4 \rangle$ vale cero si α es distinto de cero o si β es un número par.

Q.E.D

Apéndice D

Análisis para las otras dos direcciones espaciales

A manera de complemento, vale la pena indagar qué es lo que sucede tanto en el eje x como en el y al aplicar la teoría de perturbaciones. En otras palabras, es interesante saber si este método puede ayudar a encontrar algo importante en todo el espacio tridimensional. Se comienza con el eje x, para ello es importante recordar que $x = r \sin \theta \cos \theta$. Luego:

$$\begin{aligned} \langle l_1 \ m_1 \ l_2 \ m_2 | \hat{X} | l_3 \ m_3 \ l_4 \ m_4 \rangle &= \int Y_{l_1, m_1}^* Y_{l_2, m_2} x Y_{l_3, m_3} Y_{l_4, m_4}^* d\Omega \\ &= \left(\prod_{j=1}^4 A_{l_j m_j} \right) a_0 \int_0^\pi \sin^2 \theta \left(\prod_{j=1}^4 P_{l_j m_j} \right) d\theta \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} \cos \varphi d\varphi \\ &= a_0 \left(\prod_{j=1}^4 A_{l_j m_j} \right) I_x(\theta) I_x(\varphi) \end{aligned}$$

donde:

$$\begin{aligned} I_x(\theta) &= \int_0^\pi \sin^2 \theta \left(\prod_{j=1}^4 P_{l_j m_j} \right) d\theta \\ I_x(\varphi) &= \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} \cos \varphi d\varphi \end{aligned}$$

Resolviendo $I_x(\varphi)$ por partes se obtiene:

$$\begin{aligned}
I_x(\varphi) &= \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} \cos \varphi \, d\varphi \\
&= \frac{1}{i\alpha} [e^{i\alpha\varphi} \cos \varphi]_0^{2\pi} + \frac{1}{i\alpha} \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} \sin \varphi \, d\varphi \\
&= \frac{1}{i\alpha} \left(\frac{1}{i\alpha} [e^{i\alpha\varphi} \sin \varphi]_0^{2\pi} - \frac{1}{i\alpha} \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} \cos \varphi \, d\varphi \right) \\
&= \frac{1}{\alpha^2} I_x(\varphi) \\
&\Rightarrow I_x(\varphi) = \frac{1}{\alpha^2} I_x(\varphi) \\
&\Rightarrow \left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right) I_x(\varphi) = 0
\end{aligned}$$

Lo primero que se puede notar es que este procedimiento no es válido para $\alpha = 0$, ya que habría una indefinición. En dicho caso, el valor de la integral vale cero puesto que conduce a la forma:

$$\int_0^{2\pi} \cos \varphi \, d\varphi$$

Por otra parte, si $\alpha = \pm 1$ entonces tenemos el caso más interesante, puesto que la integral se vuelve de la forma:

$$\begin{aligned}
I_x(\varphi) &= \int_0^{2\pi} e^{\pm i\varphi} \cos \varphi \, d\varphi \\
&= \int_0^{2\pi} (\cos^2 \varphi \pm i \sin \varphi \cos \varphi) \, d\varphi \\
&= \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi \, d\varphi \pm i \int_0^{2\pi} \sin \varphi \cos \varphi \, d\varphi \\
&= \left[\frac{\varphi}{2} + \frac{\sin 2\varphi}{4} \right]_0^{2\pi} \\
&= \pi
\end{aligned}$$

Finalmente, de la condición $\left(1 - \frac{1}{\alpha^2}\right) I_x(\varphi) = 0$ se puede ver que para cualquier caso, que sea distinto a los tratados anteriormente, $I_x(\varphi)$ el resultado es directamente cero. Por lo tanto, la condición que se obtiene de este análisis es:

$$\boxed{\alpha \neq \pm 1 \Rightarrow I_x(\varphi) = 0} \quad (\text{D.1})$$

Siguiendo el mismo proceso que para el eje z, la integral $I_x(\theta)$ puede obtenerse de la forma:

$$\begin{aligned}
I_x(\theta) &= \int_0^\pi \sin^2 \theta \left(\prod_{j=i}^4 P_{l_j m_j} \right) d\theta \\
&= \int_0^\pi d\theta \sin^2 \theta \sin^2 \theta \sin^2 \theta \frac{(-1)^{|m_j|} \Xi_{l_j m_j}}{l_j^2 l_j!} (\sin \theta)^{|m_j|} \frac{d^{l_j+|m_j|}}{d(\cos \theta)^{l_j+|m_j|}} (\cos^2 \theta - 1)^{l_j} \\
&= \frac{(-1)^\lambda}{2^\beta} \left(\prod_{j=1}^4 \frac{\Xi_{l_j m_j}}{l_j!} \right) \int_0^\pi d\theta \sin^2 \theta \prod_{j=i}^4 \left[\sum_{k_j=0}^{\tilde{k}_j} \binom{l_j}{k_j} (-1)^{k_j} \frac{(2(l_j - k_j))!}{(l_j - |m_j| - 2k_j)!} (\sin \theta)^{|m_j|} (\cos \theta)^{l_j - |m_j| - 2k_j} \right]
\end{aligned}$$

Recordando que $\alpha = \pm 1$, siguiendo las mismas definiciones que antes para $\tilde{m}_j$ se tiene:

$$\alpha = \sum_{j=1}^4 \tilde{m}_j = \pm 1$$

o bien,

$$\begin{aligned} \alpha &= \sum_{j=1}^4 \delta_{|\tilde{m}_j|, \tilde{m}_j} |\tilde{m}_j| - \sum_{j=1}^4 \delta_{-|\tilde{m}_j|, \tilde{m}_j} |\tilde{m}_j| = \pm 1 \\ &\Rightarrow \sum_{j=1}^4 \delta_{|\tilde{m}_j|, \tilde{m}_j} |\tilde{m}_j| = \pm 1 + \sum_{j=1}^4 \delta_{-|\tilde{m}_j|, \tilde{m}_j} |\tilde{m}_j| \end{aligned}$$

Luego:

$$\begin{aligned} \lambda &= \sum_{j=1}^4 |\tilde{m}_j| \\ &= \sum_{j=1}^4 \delta_{|\tilde{m}_j|, \tilde{m}_j} |\tilde{m}_j| + \sum_{j=1}^4 \delta_{-|\tilde{m}_j|, \tilde{m}_j} |\tilde{m}_j| \\ &= \pm 1 + 2 \sum_{j=1}^4 \delta_{-|\tilde{m}_j|, \tilde{m}_j} |\tilde{m}_j| \end{aligned}$$

es decir, λ siempre es impar. Adicionalmente, se sabe que β siempre es par para los casos con degeneración. Entonces, las funciones $(\sin \theta)^{\lambda+2}$ dentro de $I_x(\theta)$ tienen siempre un exponente impar.

Finalmente, el exponente de $\cos \theta$, $\beta - \lambda - 2 \sum_{j=1}^4 k_j$ también es impar, para todo k_j pues es la suma de dos números pares y un impar. En consecuencia, los términos del polinomio resultante forman integrales del tipo $\int_0^\pi (\sin \theta)^{2r+1} (\cos \theta)^{2s+1} d\theta$, luego, de acuerdo con lo demostrado en el apéndice B, $I_x(\theta) = 0$. La conclusión para la integral $I_x(\theta)$ es:

Si β es un número par $\Rightarrow I_x(\theta) = 0$

(D.2)

Por lo tanto, al juntar las condiciones (D.1) y (D.2), se concluye de este análisis en la dirección del eje x que $\langle l_1 \ m_1 \ l_2 \ m_2 | \hat{X} | l_3 \ m_3 \ l_4 \ m_4 \rangle = 0$ si $\alpha \neq \pm 1$ o si β es un número par.

Ahora bien, por otra parte, para el análisis en el eje y se debe recordar que $y = r \sin \theta \sin \theta$. Después:

$$\begin{aligned} \langle l_1 \ m_1 \ l_2 \ m_2 | \hat{Y} | l_3 \ m_3 \ l_4 \ m_4 \rangle &= \int Y_{l_1, m_1}^* Y_{l_2, m_2} Y_{l_3, m_3} Y_{l_4, m_4}^* d\Omega \\ &= a_0 \left(\prod_{j=1}^4 A_{l_j m_j} \right) \int_0^\pi \sin^2 \theta \left(\prod_{j=1}^4 P_{l_j m_j} \right) d\theta \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} \sin \varphi d\varphi \\ &= a_0 \left(\prod_{j=1}^4 A_{l_j m_j} \right) I_y(\theta) I_y(\varphi) \end{aligned}$$

donde:

$$I_y(\theta) = \int_0^\pi \sin^2 \theta \left(\prod_{j=1}^4 P_{l_j m_j} \right) d\theta$$

$$I_y(\varphi) = \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} \sin \varphi d\varphi$$

Resolviendo primero la integral $I_y(\varphi)$ se tiene:

$$\begin{aligned} I_y(\varphi) &= \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} \sin \varphi d\varphi \\ &= \left[\frac{1}{i\alpha} e^{i\alpha\varphi} \sin \varphi \right]_0^{2\pi} - \frac{1}{i\alpha} \int_0^{2\pi} e^{i\alpha\varphi} \cos \varphi d\varphi \\ &= \frac{i}{\alpha} I_x(\varphi) \\ &= \begin{cases} \pm i\pi & \text{cuando } \alpha = \pm 1 \\ 0 & \text{cuando } \alpha \neq \pm 1 \end{cases} \end{aligned}$$

Es importante aclarar que el caso donde $\alpha = 0$ no sigue este mismo procedimiento, ya que conduciría a una indefinición, sin embargo, sí conduce al mismo resultado. Entonces, la primera condición sería:

$$\boxed{\alpha \neq \pm 1 \Rightarrow I_y(\varphi) = 0} \quad (\text{D.3})$$

Es notable que $I_x(\theta) = I_y(\theta)$, por lo tanto, las condiciones para ésta integral son las mismas, así:

$$\boxed{\text{Si } \beta \text{ es un número par} \Rightarrow I_y(\theta) = 0} \quad (\text{D.4})$$

En consecuencia, las condiciones (D.3) y (D.4) son las mismas que (D.1) y (D.2), respectivamente, entonces $\langle l_1 m_1 l_2 m_2 | \hat{Y} | l_3 m_3 l_4 m_4 \rangle = 0$ si $\alpha \neq 1$ o si β es un número par. Por lo tanto, las condiciones para x y y son las mismas puesto que el sistema tiene simetría respecto al eje z.

Bibliografía

- [1] C.R. Paul y S.A. Nasar. *Introduction to Electromagnetic Fields*. McGraw-Hill International Editions. WCB/McGraw-Hill, 1982, págs. 1-2. ISBN: 0070458847.
- [2] R López Valverde. «Historia del electromagnetismo». En: *Ediciones IES, Pablo Picasso* (2001).
- [3] T. Editors of Encyclopaedia Britannica. «electromagnetic field». En: *Encyclopedia Britannica* (2023). URL: <https://www.britannica.com/science/electromagnetic-field>.
- [4] Organización Mundial de la Salud. «¿Qué son los campos electromagnéticos?» En: (ago. de 2016). URL: <https://www.who.int/es/news-room/questions-and-answers/item/electromagnetic-fields>.
- [5] The INTERPHONE Study Group. «Brain tumour risk in relation to mobile telephone use: results of the INTERPHONE international case-control study». En: *International Journal of Epidemiology* 39.3 (mayo de 2010), págs. 675-694. ISSN: 0300-5771. DOI: 10.1093/ije/dyq079. eprint: <https://academic.oup.com/ije/article-pdf/39/3/675/14113072/dyq079.pdf>. URL: <https://doi.org/10.1093/ije/dyq079>.
- [6] Organización Mundial de la Salud. «Campos electromagnéticos y salud pública: teléfonos móviles». En: (oct. de 2014). URL: <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/electromagnetic-fields-and-public-health-mobile-phones>.
- [7] Michael E Wyde et al. «Effect of cell phone radiofrequency radiation on body temperature in rodents: Pilot studies of the National Toxicology Program's reverberation chamber exposure system». En: *Bioelectromagnetics* 39.3 (2018), págs. 190-199.
- [8] Recep Bedir et al. «Pathological findings observed in the kidneys of postnatal male rats exposed to the 2100 MHz electromagnetic field». En: *Archives of Medical Research* 49.7 (2018), págs. 432-440.
- [9] Jiajun Luo et al. «Cell phone use and risk of thyroid cancer: a population-based case-control study in Connecticut». En: *Annals of epidemiology* 29 (2019), págs. 39-45.
- [10] Michael Carlberg et al. «Is the increasing incidence of thyroid cancer in the Nordic countries caused by use of mobile phones?» En: *International Journal of Environmental Research and Public Health* 17.23 (2020), pág. 9129.
- [11] Z-H Loh et al. «Observation of the fastest chemical processes in the radiolysis of water». En: *Science* 367.6474 (2020), págs. 179-182.
- [12] Cheves T. Walling. «radical». En: *Encyclopedia Britannica* (2023). URL: <https://www.britannica.com/science/radical-chemistry.%20Accessed%2023%20March%202023..>
- [13] Octavio Maldonado Saavedra et al. «Radicales libres y su papel en las enfermedades crónico-degenerativas». En: (2010).
- [14] N. Zettili. *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*. Wiley, 2009, págs. 489-498. ISBN: 9780470026786.

- [15] José Manuel González Rayas. «Medición del campo magnético y eléctrico generado por teléfonos móviles». En: (). URL: <https://repositorio.tec.mx/handle/11285/637244>.
- [16] S Batool et al. «Benefits and hazards of electromagnetic waves, telecommunication, physical and biomedical: a review». En: *European review for medical and pharmacological sciences* 23.7 (2019), pág. 3121.
- [17] D. Halliday, R. Resnick y J. Walker. *Fundamentals of Physics*. Fundamentals of Physics. Wiley, 2013, pág. 648. ISBN: 9781118230718.
- [18] S.S. Zumdhal. «water». En: *Encyclopedia Britannica* (2023). URL: <https://www.britannica.com/science/water>.
- [19] C.H. Zepeda Fernández, J.L. Aguilar Cuevas y E. Moreno Barbosa. «Proton wave function in a water molecule: Breakdown of degeneration caused by interactions with the magnetic field of a Magnetic Resonance Imaging device». En: *arXiv e-prints* (2021), arXiv-2109.