Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Cálculo del momento angular total para la molécula del agua: obtención del estado base y primer estado excitado

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

Yuridia Flores Orea

Asesorado por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Puebla Pue.
Abril 2022

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Cálculo del momento angular total para la molécula del agua: obtención del estado base y primer estado excitado

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

Yuridia Flores Orea

Asesorado por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Puebla Pue.
Abril 2022

Título: Cálculo del momento angular total para la molécula del agua: obtención del estado base y primer estado excitado
Estudiante: Yuridia Flores Orea

COMITÉ

Dr. Javier Miguel Hernández López
Presidente

Dr. Eduardo Moreno Barbosa
Secretario

Dr. Jorge Velázquez Castro
Vocal

Dr. Mario Rodríguez Cahuantz
Vocal

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández
Asesor

Dedicatoria

A Marquelia Orea, mi madre.

Agradecimientos

Primeramente doy gracias a mi madre que me ha apoyado y brindado ánimos en en esta etapa de mi vida, también agradezco a mis hermanos; Jayro por siempre hacer mi vida más fácil, Tabita y Mohamed. Así mismo agradezco a mi padre y a mis abuelos por estar cerca.

Gracias a la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por permitirme ser empapada de conocimiento en el área que me apasiona, a cada docente que hizo parte de este proceso integral de formación y a todos mis amigos por estar siempre presentes, en especial a P. Bryant por tantas risas que hacen más ameno el tiempo.

Un agradecimiento muy especial a mi asesor de tesis, Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández, por toda la paciencia y ayuda brindada y a todo el jurado revisor de esta tesis; Dr. Javier Miguel Hernández López, Dr. Eduardo Moreno Barbosa, Dr. Jorge Velázquez Castro y Dr. Mario Rodríguez Cahuantzi.

Finalmente agradezco al lector de este apartado y más de esta tesis, espero que mi trabajo incurra dentro de su repertorio de información mental.

A todos ustedes, muchas gracias.

Índice general

Resumen **xi**

1. Introducción **1**
1.1. Formalismo general del Momento angular 2
1.1.1. Espín 2
1.1.2. Suma de momento angular 3
1.1.3. Principio de exclusión de Pauli 9

2. Modelo de la molécula de agua **11**

3. Resultados **13**
3.1. Calculo del estado base y primer estado excitado 13
3.1.1. Estado base 13
3.1.2. Primer estado excitado 13
3.1.3. Valores encontrados 22

4. Conclusión **25**

Bibliografía **27**

Resumen

La molécula de agua ha sido estudiada desde distintas disciplinas, dicha frecuencia de estudio se debe a su importancia para la humanidad, el cuerpo humano está compuesto en un 60 por ciento de agua, también conforma la mayor parte de nuestro planeta y es necesaria para la vida de ecosistemas.

En este trabajo es necesario marcar la importancia del agua en estudios que ayudan al diagnostico en medicina y así la conservación y mejora de la vida, en especial, la resonancia magnética[7, 8], en este estudio se hace uso de la radiofrecuencia emitida por los protones que componen los núcleos de los átomos de hidrógeno acoplados al oxígeno mediante un campo magnético para la obtención de imágenes.

En el caso de este estudio, encontraremos los valores del primer estado y el estado base de la suma de el momento angular orbital con el espín de nuestro modelo de la molécula de agua[3], el cual consistió en dos protones de los núcleos de los átomos de hidrógeno orbitando alrededor del núcleo de oxígeno doblemente cargado y sin estructura con una distancia constante[9].

El cuerpo académico de física médica de la BUAP ha impulsado el estudio centrado en la molécula de agua, este trabajo tiene como objetivo principal completar el estudio que lleva el titulo *"Niveles de energía y funciones de onda de los protones de los átomos de hidrógeno asociados a la molécula del agua: rompimiento de la degeneración en presencia de un campo magnético producido en una resonancia magnética."*[4], el cual fue la tesis para obtención de licenciatura del compañero Aguilar Cuevas, Jorge Luis. En dicha tesis se encuentran los valores de energıa de la molécula de agua cuando se aplica un campo magnético.

Capítulo 1

Introducción

Una de las técnicas no invasivas más importantes en medicina para obtener información de la estructura y composición de las partes del cuerpo humano mediante imágenes tridimensionales es la Resonancia Magnética (MRI), este procedimiento se encuentra en constante desarrollo para mejorar el diagnostico médico. El escáner de resonancia magnética es un dispositivo complejo, que necesita un campo magnético fuerte y constante entre 0,5 y 7 T. Este campo magnético interactúa con el espín de los en los átomos de hidrógeno que componen las moléculas de agua, que componen el cuerpo humano en un 80 %. Algunos espines se orientan en paralelo y otros otros antiparalelos con respecto a la dirección del campo magnético dirección del campo magnético. Entonces, las bobinas de radiofrecuencia (RFC) producen un campo de radiofrecuencia (RF), que invierte la orientación de los espines (los paralelos se convierten en antiparalelos y viceversa). Cuando se apaga la radiofrecuencia, los espines vuelven a su orientación original. En esta transición, los protones producen ondas de radio que son detectadas por el dispositivo de RMN y finalmente se produce la imagen.

En el presente estudio, se utiliza un modelo simple para la molécula de agua que consiste en una forma de triángulo en cuyos vértices son los dos protones y el átomo de oxígeno (doblemente cargado y no estructurado), esta forma se debe a la interacción electrostática, manteniendo constante la distancia entre los protones es constante (151,05 pm) y la distancia entre los protones y el oxígeno, también constante (95,60 pm)„ se describe la interacción entre el momento angular total ($\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$) de los protones de la molécula de agua con el campo magnético de la RM, ya que los el espin de los protones y el momento angular orbital son los que interactúan con el escaner. El modelo puede pensarse como un átomo de hidrógeno, entonces, hacemos este análisis análogo al efecto Zeeman anómalo.

Esta tesis se enmarca dentro del área de física médica, en la cual se aplican conceptos de física cuántica para el estudio de la molécula del agua, se considera que estudiar fenómenos subatómicos que son de suma importancia en las aplicaciones de la física, como es la medicina, puede tener una mejora si lo hacemos con las herramientas que la física cuántica nos brinda.

La organización de este escrito es la siguiente: En este capitulo, encontramos la introducción, la cual esta conformada por 2 subsecciones, el modelo de la molécula de agua y el formalismo del momento angular. En este ultimo tenemos la teoría que abarca; espín, suma de momento angular y el principio de Pauli. En el capitulo 2 tenemos la sección de cálculos y resultados, en esta se muestran los valores calculados del estado base y el primer estado excitado. Finalmente se hace una conclusión de los resultados obtenidos.

1.1. Formalismo general del Momento angular

El momento angular es tan importante en la mecánica clásica como en la mecánica cuántica. Es es particularmente útil para estudiar la dinámica de los sistemas que se mueven bajo la influencia de simétricos esféricos, o centrales, en particular para el átomo de hidrógeno (en el que el electrón se mueve en el potencial de Coulomb del protón, un potencial central) se basa en la cuantización del momento angular.
Introducimos un operador para momento angular más general $\hat{\vec{J}}$ que es definido por tres componentes $\hat{J}_x, \hat{J}_y \text{y} \hat{J}_z$, que satisfacen las siguientes relaciones de conmutación:

$$\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] = i\hbar\hat{J}_z, \quad \left[\hat{J}_y, \hat{J}_z\right] = ih\hat{J}_x, \quad \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] = i\hbar\hat{J}_y \tag{1.1}$$

o equivalentemente

$$\hat{\vec{J}} \times \hat{\vec{J}} = i\hbar\hat{\vec{J}} \tag{1.2}$$

Dado que $\hat{J}_x, \hat{J}_y \text{y} \hat{J}_z$ no conmutan entre si, no pueden ser diagonalizados simultáneamente; es decir, no poseen eigenestados comunes. El cuadrado de momento angular es:

$$\hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \tag{1.3}$$

el cual es un operador escalar y se sabe que conmuta con $\hat{J}_x, \hat{J}_y \text{y} \hat{J}_z$

$$\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_k\right] = 0 \tag{1.4}$$

donde k sustituye x, y y z, por ejemplo, en caso de $k = x$ tenemos

$$\begin{aligned}\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_x\right] &= \left[\hat{J}_x^2, \hat{J}_x\right] + \hat{J}_y\left[\hat{J}_y, \hat{J}_x\right] + \left[\hat{J}_y, \hat{J}_x\right]\hat{J}_y + \hat{J}_z\left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right] + \left[\hat{J}_z, \hat{J}_x\right]\hat{J}_z \\ &= \hat{J}_y\left(-i\hbar\hat{J}_z\right) + \left(-i\hbar\hat{J}_z\right)\hat{J}_y + \hat{J}_z\left(i\hbar\hat{J}_y\right) + \left(i\hbar\hat{J}_y\right)\hat{J}_z \\ &= 0\end{aligned} \tag{1.5}$$

porque $[\hat{J}_x^2, \hat{J}_x] = 0, [\hat{J}_y, \hat{J}_x] = -i\hbar\hat{J}_z$ y $[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$. Notemos que los operadores $\hat{J}_x, \hat{J}_y \hat{J}_z \text{y} \hat{\vec{J}}^2$ son todos hermitianos; sus eigenvalores son reales.

Como $\hat{J}^2$ conmuta con sus componentes, por convención se usa a $\hat{J}_z$ para tener eigenfunciones simultaneas.

1.1.1. Espín

El espín es una propiedad fundamental de la naturaleza como la carga eléctrica o la masa. El espín toma valores enteros y semienteros. Los protones, electrones y neutrones poseen espín. Para electrones, protones y neutrones tiene un valor de 1/2. Dos o más partículas con espín de signo opuesto pueden aparearse para eliminar la manifestación observable del espín. Un ejemplo es el helio.
En la resonancia magnética nuclear, los espines nucleares no apareados son los que tienen importancia, pues su interacción con el campo magnético es parte de la física para producir imágenes.
El espín al ser un momento angular, sigue la teoría de momento angular previamente mencionada (sección 1.2). En analogía con el vector del momento angular $\hat{\vec{J}}$, el espín es representado por el operador $\hat{\vec{S}}$ con componentes que obedecen a las mismas relaciones de conmutación

$$\left[\hat{S}_x, \hat{S}_y\right] = i\hbar\hat{S}_z, \quad \left[\hat{S}_y, \hat{S}_z\right] = ih\hat{S}_x, \quad \left[\hat{S}_z, \hat{S}_x\right] = i\hbar\hat{S}_y \tag{1.6}$$

o equivalentemente

$$\hat{\vec{S}} \times \hat{\vec{S}} = i\hbar\hat{\vec{S}}. \tag{1.7}$$

Ademas, $\hat{\vec{S}}^2$ y $\hat{S}_z$ conmutan, por lo que tienen eigenvalores comunes, denotados por:

$$\hat{\vec{S}}^2 |s, m_s\rangle = \hbar s(s+1) |s, m_s\rangle , \quad \hat{S}_z |s, ms\rangle = \hbar m_s |s, m_s\rangle \tag{1.8}$$

donde $m_s = -s, -s+1, ..., s$. Se encuentra muy útil el trabajar con los operadores de ascenso y descenso como:

$$\hat{S}_\pm |s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s (m_s \pm 1)} |s, m_s \pm 1\rangle \tag{1.9}$$

donde $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x + i\hat{S}_y$ y

$$\langle \hat{S}_x^2 \rangle = \langle \hat{S}_y^2 \rangle = \frac{1}{2}(\langle \hat{\vec{S}}^2 \rangle - \langle \hat{S}_z^2 \rangle) = \frac{\hbar^2}{2} \left[s(s+1) - m_s^2 \right] \tag{1.10}$$

donde $\langle \hat{S}_i \rangle = \langle s, m_s | \hat{S}_i | s, m_s \rangle$.
Los estados del espín forman una base ortonormal y completa

$$\langle s', m_s' \mid s, m_s \rangle = \delta_{s',s}\delta_{m_s',m_s}, \quad \sum_{m_s=-s}^{s} = |s, m_s\rangle \langle s, m_s| = I \tag{1.11}$$

donde I es la matriz unitaria.

1.1.2. Suma de momento angular

Para poder entender los diversos fenómenos subatómicos, es necesario entender la suma de momento angular, como ya se mencionó en nuestro modelo de la molécula del agua,los protones de los átomos de hidrógeno son las partículas de nuestro análisis, es decir, cada protón consta de dos partes, una parte orbital l_1, l_2;, que se debe al movimiento orbital de este, y una parte de espín s_1, s_2;, que se debe al movimiento de giro del protón alrededor de sí mismo.
Las propiedades de la molécula del agua no pueden discutirse adecuadamente sin saber cómo sumar las partes orbital y de espín, para así tener el momento angular total de los protones que la conforman. En lo que sigue se presenta el formalismo de la adición del momento angular.

Adición de dos momentos angulares: Formalismo general

Consideremos dos momentos angulares $\hat{\vec{J}}_1, \hat{\vec{J}}_2$, los cuales pertenecen a dos diferentes subespacios $1, 2$, $\hat{\vec{J}}_1, \hat{\vec{J}}_2$ pueden referirse a dos partículas distintas o a dos propiedades diferentes de la misma partícula, este ultimo va a representar lo que hacemos ya que se refiere a los momentos angulares orbital y de espín del mismo protón. Las componentes de $\hat{\vec{J}}_1, \hat{\vec{J}}_2$ satisfacen las relaciones de conmutación ya descritas en la sección 1.1 en la ecuación (1.1), también, como $\hat{\vec{J}}_1, \hat{\vec{J}}_2$ pertenecen a dos diferentes espacios, sus componentes conmutan:

$$\left[\hat{J}_{1_j}, \hat{J}_{2_k} \right] = 0, \quad (j, k = x, y, z)$$

Denotamos los estados conjuntos de $\hat{\vec{J}}_1^2$ y $\hat{J_{1z}}$ por $|j_1, m_1\rangle$, así mismo $\hat{\vec{J}}_2^2$ y $\hat{J_{2z}}$ por $|j_2, m_2\rangle$

$$\begin{aligned}
&\hat{\vec{J}}_1^2 |j_1, m_1\rangle = j_1 (j_1 + 1) \hbar^2 |j_1, m_1\rangle , \\
&\hat{J}_{1_z} |j_1, m_1\rangle = m_1\hbar |j_1, m_1\rangle , \\
&\hat{\vec{J}}_2^2 |j_2, m_2\rangle = j_2 (j_2 + 1) \hbar^2 |j_2, m_2\rangle , \\
&\hat{J}_{2z} |j_2, m_2\rangle = m_2\hbar |j_2, m_2\rangle .
\end{aligned} \tag{1.12}$$

Las dimensiones de los espacios para $\hat{\vec{J}}_1$ y $\hat{\vec{J}}_1$ están dados por $(2j_1+1)$ y $(2j_2+1)$, respectivamente. Consideremos ahora dos partículas (o dos subespacios), 1 y 2 juntas. Los cuatro operadores $\hat{\vec{J}}_1^2$, $\hat{\vec{J}}_2^2$, $\hat{J}_{1z}$ y $\hat{J}_{2z}$ forman un conjunto completo de operadores conmutados; por lo tanto, pueden ser diagonalizados conjuntamente por los mismos estados. Denotando los eigenestados conjuntos por $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ podemos escribirlo como el *producto directo* de $|j_1, m_1\rangle$ y $|j_2, m_2\rangle$

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle\, |j_2, m_2\rangle\,, \tag{1.13}$$

porque las coordenadas de $\hat{\vec{J}}_1$ y $\hat{\vec{J}}_2$ son *independientes* entonces podemos reescribir la ecuación (1.12) como:

$$\begin{aligned}
&\hat{\vec{J}}_1^2\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = j_1\,(j_1+1)\,\hbar^2\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\,,\\
&\hat{J}_{1z}\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = m_1\hbar\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\,,\\
&\hat{\vec{J}}_2^2\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = j_2\,(j_2+1)\,\hbar^2\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\,,\\
&\hat{J}_{2z}\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = m_2\hbar\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\,.
\end{aligned} \tag{1.14}$$

Los kets $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ forman una base completa y ortogonal. Usando

$$\sum_{m_1 m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\, \langle j_1, j_2; m_1, m_2| = \left(\sum_{m_1} |j_1, m_1\rangle\, \langle j_1, m_1|\right) \left(\sum_{m_2} |j_2, m_2\rangle\, \langle j_2, m_2|\right) \tag{1.15}$$

y como $\{|j_1, m_1\rangle\}$ y $\{|j_2, m_2\rangle\}$ son completos y ortonormales vemos que la base $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ es completa,

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\, \langle j_1, j_2; m_1, m_2| = 1 \tag{1.16}$$

y ortonormal

$$\begin{aligned}
\langle j_1', j_2'; m_1', m_2' \mid j_1, j_2; m_1, m_2\rangle &= \langle j_1', m_1' \mid j_1, m_1\rangle\, \langle j_2', m_2' \mid j_2, m_2\rangle\\
&= \delta_{j_1', j_1}\delta_{j_2', j_2}\delta_{m_1', m_1}, \delta_{m_2', m_2}.
\end{aligned} \tag{1.17}$$

La base $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ abarca el espacio total formado por los subespacios 1y 2, de la ecuación (1.13) vemos que la dimensión N de este espacio es igual al producto de las dimensiones de los dos subespacios abarcados por $\{|j_1, m_1\rangle\}$ y $\{|j_1, m_1\rangle\}$:

$$N = (2j_1+1)(2j_2+1) \tag{1.18}$$

Ahora podemos introducir los operadores *escalera* $\hat{J}_{1\pm} = \hat{J}_{1x} \pm i\hat{J}_{1y}$ y $\hat{J}_{2\pm} = \hat{J}_{2x} \pm i\hat{J}_{2y}$ actuando en $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ como:

$$\begin{aligned}
&\hat{J}_{1\pm}\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar\sqrt{(j_1 \mp m_1)\,(j_1 \pm m_1 + 1)}\, |j_1, j_2; m_1 \pm 1, m_2\rangle\,,\\
&\hat{J}_{2\pm}\, |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \hbar\sqrt{(j_2 \mp m_2)\,(j_2 \pm m_2 + 1)}|j_1, j_2; m_1, m_2 \pm 1\rangle.
\end{aligned} \tag{1.19}$$

El problema de sumar dos momentos angulares, $\hat{J}_1$ y $\hat{J}_2$

$$\hat{\vec{J}}_z = \hat{\vec{J}}_{z1} + \hat{\vec{J}}_{z2} \tag{1.20}$$

consiste en encontrar los eigenvalores y eigenvectores de $\hat{\vec{J}}^2$ y $\hat{J}_z$ en terminos de eigenvalores y eigenvectores de $\hat{\vec{J}}_1^2$, $\hat{\vec{J}}_2^2$, $\hat{J}_{1z}$ y $\hat{J}_{2z}$. Dado que las matrices de $\hat{\vec{J}}_1$ y $\hat{\vec{J}}_2$ en general tienen diferentes dimensiones, la suma especificada por la ecuación (1.20) no es una suma de matrices; es una suma simbólica. La suma de los momentos angulares también satisface las relaciones de conmutación

dadas en la ecuación (1.1).
Ahora bien, como $\hat{\vec{J}}_1^2$, $\hat{\vec{J}}_2^2$, $\hat{\vec{J}}^2$ y $\hat{J}_z$ forman un conjunto completo de operadores conmutativos, pueden ser diagonalizados simultáneamente por los mismos estados; designando estos eigenestados conjuntos por $|j_1, j_2; j, m\rangle$, tenemos entonces:

$$\begin{aligned}
&\hat{\vec{J}}_1^2 \,|j_1, j_2; j, m\rangle = j_1\,(j_1+1)\,\hbar^2\,|j_1, j_2; j, m\rangle\,,\\
&\hat{\vec{J}}_2^2 \mid j_1, j_2; j, m\rangle = j_2\,(j_2+1)\,\hbar^2\,|j_1, j_2; j, m\rangle\,,\\
&\hat{J}^2\,|j_1, j_2; j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2\,|j_1, j_2; j, m\rangle\,,\\
&\hat{J}z \mid j_1, j_2; j, m\rangle = m\hbar\,|j_1, j_2; j, m\rangle
\end{aligned} \tag{1.21}$$

Por cada j, el número m tiene $(2j+1)$ valores permitidos: $m = -j, -j+1, ..., j-1, j$. Dado que j_1 y j_2 suelen ser fijos se utilizara la notación $|j, m\rangle$ para referirnos a $|j_1, j_2; j, m\rangle$, el conjunto de vectores $\{|j, m\rangle\}$ forman una base completa y ortonormal:

$$\sum_j \sum_{m=-j}^{j} |j, m\rangle\langle j, m| = 1$$

$$\langle j', m' \mid j, m\rangle = \delta_{j,j'}\delta_{m',m}. \tag{1.22}$$

El espacio donde opera el momento angular $\hat{\vec{J}}$ se extiende por la base $\{|j, m\rangle\}$; este espacio se conoce como *espacio del producto* Es importante saber que este espacio es el mismo que el que abarcan las bases $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$, es decir, el espacio que incluye los dos subespacios 1 y 2. Por lo tanto la dimensión de $\{|j, m\rangle\}$ es igual a N, especificada en la ecuación (1.18).
La cuestión ahora es encontrar la transformación que conecta las bases $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ y $\{|j, m\rangle\}$.

Transformación entre bases: Coeficientes de Clebsch-Gordan

Volvamos ahora a la adición de $\hat{\vec{J}}_1$ y $\hat{\vec{J}}_2$, como ya se había mencionado, el problema en esencial consiste en encontrar los eigenvalores de $\hat{\vec{J}}^2$ y $\hat{J}_z$, expresando los estados $|j, m\rangle$ en términos de $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$. Debemos mencionar que $|j, m\rangle$ es el estado en el que $\hat{\vec{J}}^2$ y $\hat{J}_z$ tienen valores fijos, $j(j+1)$ y m, pero en general no es un estado en el que los valores $\hat{\vec{J}}_{1z}$ y $\hat{\vec{J}}_{2z}$ son fijos; en cuanto a $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ es el estado en el que $\hat{\vec{J}}_1^2$, $\hat{\vec{J}}_2^2$, $\hat{\vec{J}}_{1z}$ y $\hat{\vec{J}}_{2z}$ tienen valores fijos.
Las $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ y $\{|j, m\rangle\}$. bases pueden ser conectadas mediante una transformación de la siguiente manera. Insertando el operador identidad como una suma sobre la base completa $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$, podemos escribir

$$\begin{aligned}
|j, m\rangle &= \left(\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\,\langle j_1, j_2; m_1, m_2| \right) |j, m\rangle \\
&= \sum_{m_1 m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 |\, j, m\rangle\,|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\,,
\end{aligned} \tag{1.23}$$

donde usamos la condición de normalización (1.16); ya que las bases $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ y $\{|j, m\rangle\}$ están *normalizadas* , esta transformación debe ser *unitaria*. Los coeficientes $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle$ solo dependen de las cantidades j_1, j_2, j, m_1, m_2 y m *son los elementos de la matriz de la transformación unitaria que conecta las bases* $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$ y $\{|j, m\rangle\}$. *Estos coeficientes se denominan coeficientes de Clebsch-Gordan.*
El problema de la adición del momento angular se reduce entonces a encontrar los coeficientes de Clebsch-Gordan $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle$. Estos coeficientes se toman *reales por convención;* por lo tanto

$$\boxed{\langle j, m | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle.} \tag{1.24}$$

Usando (1.16) y (1.22) podemos inferir la relación de ortonormalización para los coeficientes de Clebsch-Gordan:

$$\sum_{m_1 m_2} (j', m' \mid j_1, j_2; m_1, m_2) \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mid j, m\rangle = \delta_{j',j}\delta_{m',m}, \tag{1.25}$$

y como los coeficientes de Clebsch-Gordan son reales, esta relación puede reescribirse como

$$\boxed{\sum_{m_1 m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mid j', m'\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mid j, m\rangle = \delta_{j',j}\delta_{m',m},} \tag{1.26}$$

lo que nos lleva

$$\boxed{\sum_{m_1 m_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mid j, m\rangle^2 = 1.} \tag{1.27}$$

Asimismo, tenemos

$$\boxed{\sum_{j} \sum_{m=-j}^{j} \langle j_1, j_2; m_1', m_2' | j, m\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mid j, m\rangle = \delta_{m_1',m_1}\delta_{m_2',m_2}} \tag{1.28}$$

en particular,

$$\boxed{\sum_{j} \sum_{m} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 \mid j, m\rangle^2 = 1.} \tag{1.29}$$

Eigenvalores de $\hat{\vec{J}}^2$ y $\hat{J}_z$

Ahora encontraremos los eigenvalores de $\hat{\vec{J}}^2$ y $\hat{J}_z$ en términos de $\hat{\vec{J}}_1^2$, $\hat{\vec{J}}_2^2$, $\hat{J}_{1z}$ y $\hat{J}_{2z}$; es decir, obtener j y m en términos de j_1, j_2, m_1 y m_2. Primero, como $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$, tenemos $m = m_1 + m_2$. Ahora para encontrar j en términos de j_1 y j_2 vemos que los valores máximos de m_1 y m_2 $m_{1\text{máx}} = j_1$ y $m_{2\text{máx}} = j_2$, tenemos $m_{\text{máx}} = m_{1\text{máx}} + m_{2\text{máx}} = j_1 + j_2$ pero como $\mid m \mid \geq j$, entonces $j_{\text{máx}} = j_1 + j_2$.
Ahora, para encontrar el valor mínimo $j_{\text{mín}}$ de j usamos el hecho de que hay un total de $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ eigenkets $\mid j, m\rangle$. A cada valor j le corresponden $(2j + 1)$ eigenestados $\mid j, m\rangle$, por lo que tenemos:

$$\sum_{j=j_{\text{mín}}}^{j_{\text{máx}}} (2j + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1),$$

lo que nos deja

$$j_{\text{mín}}^2 = (j_1 - j_2)^2 \quad \Longrightarrow \quad j_{\text{mín}} = |j_1 - j_2|.$$

Por lo tanto, los valores permitidos de j se encuentran dentro del rango

$$\boxed{|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2} \tag{1.30}$$

Esta expresión también puede derivarse de la conocida relación triangular. Por lo que los valores permitidos de j proceden en pasos enteros según

$$\boxed{j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \ldots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2} \tag{1.31}$$

Así, para cada j, los valores de m van de $-j \leq m \leq j$.
El coeficiente $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle$ desaparece a menos que $m_1 + m_2 = m$, esto se observa de: ya que $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$, tenemos:

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | \hat{J}_z - \hat{J}_{1z} - \hat{J}_{2z} | j, m\rangle = 0$$

como $\hat{J}_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle$, $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|\,\hat{J}_{1_z} = m_1\hbar\,\langle j_1,j_2;m_1,m_2|$ y $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|\,\hat{J}_{2_z} = m_2\hbar\,\langle j_1,j_2;m_1,m_2|$, podemos escribir:

$$(m-m_1-m_2)\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j,m\rangle = 0,$$

lo que demuestra que $\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j,m\rangle$ no es cero, solo cuando $m-m_1-m_2=0$.

$$\boxed{\text{Si}\quad m_1+m_2\neq m \Longrightarrow \langle j_1,j_2;m_1,m_2\mid j,m\rangle = 0} \tag{1.32}$$

Así, para que el coeficiente de Clebsch-Gordan $\langle j_1,j_2;m_1,m_2\mid j,m\rangle$ no sea cero, debemos tener simultáneamente

$$\boxed{m_1+m_2=m \quad y \quad |j_1-j_2|\leq j\leq j_1+j_2.} \tag{1.33}$$

Estas se conocen como las *reglas de selección* de los coeficientes de Clebsch-Gordan.

Cálculo de los coeficientes de Clebsch-Gordan

Empezamos marcando que los coeficientes de Clebsch-Gordan correspondientes a los dos casos límite en los que $m_1=j_1, m_2=j_2, j=j_1+j_2, m=j_1+j_2 \quad y \quad m_1=-j_1, m_2=-j_2, j=j_1+j_2, m=-(j_1+j_2)$, son iguales a uno:

$$\langle j_1,j_2;j_1,j_2\mid (j_1+j_2),(j_1+j_2)\rangle = 1, \quad \langle j_1,j_2;-j_1,-j_2|\,(j_1+j_2),-j_1+j_2)\rangle = 1,$$

Estos resultados se derivan de la ecuación (1.23), como $|(j_1+j_2),(j_1+j_2)\rangle$, y $|\,(j_1+j_2),-(j_1+j_2)\rangle$ tienen un elemento cada uno:

$$|(j_1+j_2),(j_1+j_2)\rangle = \langle j_1,j_2;j_1,j_2\mid (j_1+j_2),(j_1+j_2)\rangle\mid j_1,j_2;j_1,j_2\rangle,$$

$$|(j_1+j_2),-(j_1+j_2)\rangle = \langle j_1,j_2;-j_1,-j_2\,|(j_1+j_2),-(j_1+j_2)|\,j_1,j_2;-j_1,-j_2\rangle,$$

donde $\mid (j_1+j_2),(j_1+j_2)\rangle, |(j_1+j_2),-(j_1+j_2)\rangle, |j_1,j_2;j_1,j_2\rangle$, y $\mid j_1+j_2;-j_1,-j_2\rangle$ están normalizados.

El cálculo de los demás coeficientes suelen ser más complicados que los dos casos límite mencionados anteriormente. Para ello, es necesario derivar las relaciones de recursión entre los elementos de la matriz de la transformación unitaria entre las bases $\{|j_1,j_2;m_1,m_2\rangle\}$ y $\{|j,m\rangle\}$. Las relaciones de recursión son dadas por:

$$\begin{aligned}\boxed{\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\langle j_1,j_2;m_1,m_2\mid j,m\pm 1\rangle} \\ &= \sqrt{(j_1\pm m_1)\,(j_1\mp m_1+1)}\,\langle j_1,j_2;m_1\mp 1,m_2|\,j,m\Big\rangle \\ &+ \sqrt{(j_2\pm m_2)\,(j_2\mp m_2+1)}\,(j_1,j_2;m_1,m_2\mp 1\mid j,m\rangle\,.\end{aligned} \tag{1.34}$$

Estas relaciones, junto con la relación de ortonormalización (1.16), determinan todos los coeficientes de Clebsch-Gordan para cualquier valor dado de j_1, j_2 y j excepto un signo. Pero, ¿cómo se determina este signo? La convención, conocida como convención de fase, consiste en considerar $\langle j_1,j_2;j_1,(j-j_1)\mid j,j\rangle$ como real y positivo. Esta convención de fase implica que

$$\boxed{\langle j_1,j_2;m_1,m_2\mid j,m\rangle = (-1)^{j-j_1-j_2}\,(j_2,j_1;m_2,m_1\mid j,m\rangle\,;} \tag{1.35}$$

por lo que

$$\boxed{\langle j_1,j_2;m_1,m_2\mid j,m\rangle = (-1)^{j-j_1-j_2}\,\langle j_1,j_2;-m_1,-m_2\mid j,-m\rangle\;=\langle j_2,j_1;-m_2,-m_1\mid j,-m\rangle\,.} \tag{1.36}$$

Obsérvese que, como todos los coeficientes de Clebsch-Gordan se obtienen a partir de un único coeficiente $\langle j_1,j_2;j_1,(j-j_1)\mid j,j\rangle$, y como este coeficiente es real, todos los demás coeficientes de Clebsch-Gordan deben ser también números reales

Momento angular total de la molécula de agua

Como sabemos, la adición del momento angular, se se realiza de dos en dos. Primero añadimos l_i y su respectivo espín $1/2$, para ambos protones, $i = 1, 2$. Para $l_i = 0$, no hay no hay momento angular y el momento angular total es puramente momento angular de espín. Para el caso de $li > 0$, el momento angular resultante j_i, sólo tiene dos posibilidades $j_i = l_i 1/2$, para $i = 1, 2$. Dado por:

$$|j_i; m_i >_{l_i} = \left| l_i \pm \frac{1}{2}; m_i \right\rangle_{l_i} = \sqrt{\frac{l_i \mp m_i + \frac{1}{2}}{2l_i + 1}} \left| l_i, \frac{1}{2}; m_i + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \pm \sqrt{\frac{l_i \pm m_i + \frac{1}{2}}{2l_i + 1}} \left| l_i, \frac{1}{2}; m_i - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \tag{1.37}$$

para $i = 1, 2$, $m_i = -j_i, -j_i + 1..., j_i - 1, j_i$ y $|l_i, \frac{1}{2}; m_i \pm \frac{1}{2}, \mp\frac{1}{2} >= |_i; m_i \pm \frac{1}{2} > |\frac{1}{2}; \mp\frac{1}{2} >$ es el producto tensorial de la parte espacial y la parte de espín. El subíndice l_i representa el valor del momento angular, para poder diferenciar los estados de un valor y otro. La función de onda completa está formada por la parte espacial $< \theta_i, \phi_i | l_i, m_i \pm 1/2 >$ y la representación del espinor para la parte de espín es:

$$\left| \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \left| \frac{1}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{1.38}$$

Entonces podemos escribir la ecuación 1.37 como:

$$\Phi_{j_i = l_i \pm \frac{1}{2}, m_i}(\theta_i, \phi_i) = \frac{1}{\sqrt{2l_i + 1}} \times \begin{pmatrix} \pm\sqrt{l_i \pm m_i + \frac{1}{2}} Y_{l_i, m_i - \frac{1}{2}}(\theta_i, \phi_i) \\ \sqrt{l_i \mp m_i - \frac{1}{2}} Y_{l_i, m_i + \frac{1}{2}}(\theta_i, \phi_i) \end{pmatrix}. \tag{1.39}$$

Donde las $Y_{l_i, m_i \pm \frac{1}{2}}(\theta_i, \phi_i)$ son las funciones espaciales (armonicos esfericos) de la molecula del agua [4].
Finalmente, sumamos j_1 y j_2, donde, se obtiene cuatro posibles valores del momento angular total j, dando por las combinaciones:

1. $j_1 = l_1 - 1/2$ and $j_2 = l_2 - 1/2$
2. $j_1 = l_1 - 1/2$ and $j_2 = l_2 + 1/2$
3. $j_1 = l_1 + 1/2$ and $j_2 = l_2 - 1/2$
4. $j_1 = l_1 + 1/2$ and $j_2 = l_2 + 1/2$

La función total se representa por $|j; m >^{(l_1, l_2)}_{(j_1, j_2)}$, $m = -j, j + 1..., j - 1, j$ y el superíndice indica el momento angular orbital del protón uno y dos, respectivamente. Podemos expresar el estado $|j; m >^{(l_1, l_2)}_{(j_1, j_2)}$ en términos de los coeficientes de Clebsh-Gordan ($< j_1, j_2; m_1, m_2 | j; m >$) como:

$$|j; m >^{(l_1, l_2)}_{(j_1, j_2)} = \sum_{m_1} \sum_{m_2} {}_{l_1, l_2} < j_1, j_2; m_1, m_2 | j; m > \times |j_1, j_2; m_1, m_2 >_{l_1, l_2} . \tag{1.40}$$

Donde

$$|j_1, j_2; m_1, m_2 >_{l_1, l_2} = |j_1; m_1 >_{l_1} \otimes |j_2; m_2 >_{l_2} \tag{1.41}$$

representa el producto de Kronecker para sus respectivas Ecs. 1.39. La función de onda está dada por

$$\Psi_{l_1, l_2; m_1, m_2; \frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}}(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2) = \Phi_{l_1 \pm \frac{1}{2}, m_1}(\theta_1, \phi_1) \Phi_{l_2 \pm \frac{1}{2}, m_2}(\theta_2, \phi_2). \tag{1.42}$$

Reglas de selección de los coeficientes de Clebsh-Gordan

Es bien sabido que $< j_1, j_2; m_1, m_2|j; m > \neq 0$ sólo cuando $m = m_1 + m_2$. En caso contrario, cuando $m = m_1 + m_2$ tenemos $< j_1, j_2; m_1, m_2|j; m >= 0$, entonces, siguiendo estas reglas se pueden obtener los estados $|j; m >$ para un j_1 y j_2 dados.

1.1.3. Principio de exclusión de Pauli

En mecánica cuántica, el principio de exclusión de Pauli es una regla enunciada por Wolfgang Ernst Pauli en 1925. Esta establece que no puede haber dos fermiones en el mismo estado cuántico, es decir, no pueden haber dos fermiones con los números cuánticos idénticos dentro del mismo sistema cuántico al mismo tiempo. A principio se formuló como principio pero más tarde se comprobó que es una consecuencia del *teorema de la estadística del espín*[2].

Podemos derivar el principio de Pauli, basándonos en el teorema espín-estadístico aplicado a partículas idénticas. Los fermiones de la misma especie, forman sistemas con estados totalmente antisimétricos, lo que para el caso de dos partículas significa que:

$$|\psi(x)\psi'(x')\rangle = -|\psi'(x)\psi(x')\rangle$$

La permutación de una partícula por otra, invierte el signo de la función que describe al sistema. Si las dos partículas ocupan el mismo estado cuántico $|\psi\rangle$, el estado completo del sistema es $|\psi\psi\rangle$. Entonces:

$$|\psi(x)\psi(x')\rangle = -|\psi(x')\psi(x)\rangle = 0 \text{ (ket nulo)}$$

vemos que en este caso el ket anterior no representa un estado físico. Este resultado puede generalizarse por inducción al caso de más de dos partículas.

Para que electrones, *protones* y neutrones puedan formar estructuras complejas, necesitan una restricción adicional: no pueden ocupar el mismo espacio. Es decir, no pueden tener la misma función de onda o estado cuántico. Para este estudio en especifico, este principio es importante porque las partículas estudiadas son los protones de los átomos de hidrógeno estos a la vez son fermiones y obedecen el principio.

Capítulo 2

Modelo de la molécula de agua

Conocer el comportamiento estructura/dinámica del agua a nivel a nivel submolecular es esencial para profundizar en los entresijos de la medicina; sin embargo, la estructura del agua racionalizada por interpretación de datos, tanto teóricos como experimentales, que aportan físicos, químicos y biólogos, es un tema en constante revisión[1]. Hace no muchos años (aproximadamente 1960) por fin ha sido técnicamente posible elaborar modelos cuantitativos y deductivos para el agua, esto en gran parte se debe a que cada vez el ámbito computacional nos brinda más herramientas para tener avances numéricos esenciales tanto en los aspectos de la mecánica cuántica como de la mecánica estadística[13, 14].
Desde hace tiempo se ha buscado encontrar soluciones analíticas a la ecuación de Schrödinger para sistemas con muchas partículas y como se ha mencionado el agua ha sido un tema que siempre tiene un papel importante en la investigación por lo que se han hecho aproximaciones[15] y se han obtenido soluciones usando métodos numéricos[16, 17] para dicha ecuación.

Algunas propiedades características del agua

- Altas temperaturas de fusión, ebullición y críticas. En contraste con otras sustancias moleculares de peso molecular comparable, estas temperaturas características son anormalmente altas.
- Gran constante dieléctrica. Esto resulta de una compleja combinación de polarización mutua entre moléculas vecinas en un campo externo y su tendencia a alinear mutuamente sus momentos permanentes.
- Mínimo de compresibilidad. Normalmente, los líquidos se vuelven más compresibles isotérmicamente a medida que aumenta la temperatura. Sin embargo, bajo presión atmosférica, la compresibilidad isotérmica del agua disminuye con temperatura desde el punto de fusión hasta los 46^{o}C. Este fenómeno desaparece a alta presión (por encima de 3 kbars).

Estructura de la molecula de agua

Cada molécula de agua está formada por un átomo de oxígeno y dos de hidrógeno, por lo que tiene la fórmula química H_2O. La disposición de los átomos en una molécula de agua (fig 2.1, explica muchas de las propiedades químicas del agua. En cada molécula de agua, el núcleo del átomo de oxígeno (con 8 protones cargados positivamente) atrae los electrones con mucha más fuerza que los núcleos de hidrógeno (con un solo protón cargado positivamente), ya que el oxigeno es más electronegativo que los hidrógenos, este atrae más a los electrones y se crea una distribución desigual de estos. El resultado es una carga eléctrica negativa cerca del átomo de oxígeno (debido

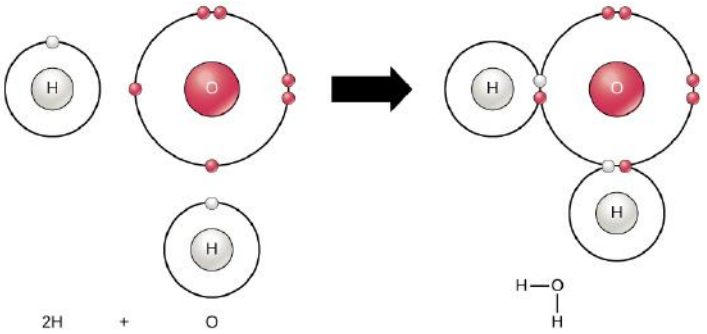

Figura 2.1: Modelo de la molécula del agua.

a la .ªtracción"de los electrones cargados negativamente hacia el núcleo de oxígeno) y una carga eléctrica positiva cerca de los átomos de hidrógeno. La diferencia de carga eléctrica entre las distintas partes de una molécula se denomina polaridad. Una molécula polar es una molécula en la que parte de la molécula está cargada positivamente y parte de la molécula está cargada negativamente.

La molécula del agua tiene una estructura denominada dipolar (dos polos). Esta disposición le da al agua un gran poder para disolver en su seno sustancias[10, 11]. Esta característica, unida a su composición, es lo que convierte al agua en medio imprescindible para la vida.

Se sabe que la distancia d_p entre los protones de los dos átomos de hidrógeno es, a grandes rasgos, constante, a saber $d_p \approx 151,05$ pm. Con el mismo criterio, la distancia d_o entre los protones y el núcleo de oxígeno es de $d_o \approx 95,60$ pm.

Se puede considerar entonces que los protones se mueven como si fueran un cuerpo rígido, con una distancia fija entre ellos. Los electrones de los dos átomos de hidrógeno tienen un enlace covalente[12] con el átomo de oxígeno. Por lo tanto, el átomo de oxígeno puede considerarse como un sistema negativo, doblemente cargado, que proporciona una fuerza central para el movimiento de los dos protones, mientras que su estructura interna puede ser ignorada, para el propósito de de este estudio. El problema se reduce entonces a considerar el movimiento del sistema de dos protones alrededor de un centro cargado con una carga $Q = -2e$

Por lo que para nuestro estudio solo es indispensable tener en cuenta los protones de los hidrógenos, ya que en resonancia magnética, el campo magnético, interactúa con los protones de los átomos de hidrógeno que componen las moléculas de agua, presentes en abundancia en el cuerpo humano, la interacción es a través del espín del protón que puede estar orientado de forma paralela o antiparalela con respecto a la la dirección del campo magnético. Un campo de radio frecuencia producido por bobinas de radiofrecuencia se utiliza para invertir la orientación del espín. En Cuando se apaga esta radio frecuencia, el espín del protón vuelve a su orientación original produciendo ondas de radio que son detectadas por el dispositivo de resonancia magnética para producir las imágenes. Los resultados presentados son la suma de los momentos angulares orbitales más el respectivo espín de cada uno de estos protones, lo cual es el modelo más adecuado para este estudio.

Capítulo 3

Resultados

3.1. Calculo del estado base y primer estado excitado

Como ya se ha mencionado en la sección del modelo de la molécula de agua; los protones del átomo de hidrógeno son las partículas de interés en nuestro análisis, se sabe que su espín tiene un valor de $1/2$, por lo que el momento angular total sigue el formalismo de la adición del momento angular: la suma de ambos espines y el momento angular orbital l_1 y l_2.

3.1.1. Estado base

Vemos que el modelo de la molécula de agua es un sistema de fermiones, por lo tanto, los protones siguen el principio de exclusión de Pauli, mencionado en la sección anterior.
Para el estado base, tenemos $l_1 = l_2 = 0$ y $m_1 = m_2 = 0$, entonces uno de los protones debe estar en $+1/2$ y el otro en $-1/2$. El momento angular total toma el valor $j = 0, 1$ y los dos únicos estados permitidos son:

$$\begin{aligned} |0;0\rangle^{(0,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} &= \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{00} \\ |1;0\rangle^{(0,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} &= \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{00} \end{aligned} \tag{3.1}$$

Donde usamos la notación de la ecuación 1.41 y los estados están dados por la ecuación 1.37.

3.1.2. Primer estado excitado

El primer estado excitado debe ocurrir con $l_i = 1$, para $i = 1, 2$ y el otro permanece en $l_i = 0$. En este caso todas las combinaciones de los números cuánticos están permitidas. Tomamos $l_1 = 1$, entonces $j_1 = 1/2, 3/2$; los seis estados pueden ser obtenidos por la Ec. (1.37). Los números cuánticos para el segundo protón son $l_2 = 0$ y $s_2 = 1/2$, entonces $j_2 = 1/2$.

1. *Espacio generado por* $j_1 = \frac{1}{2}$ y $j_2 = \frac{1}{2}$

   Los valores permitidos del momento angular están dados por la ecuación (1.30), por lo que para este caso, tenemos:

$$\left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right| \leq j \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$$

$$0 \leq j \leq 1$$

Para calcular los coeficientes de Clebsch-Gordan, necesitamos encontrar el vector base $\{|j,m\rangle\}$, j tiene dos valores posibles $j = 0, 1$.
Cuando $j = 0$, tenemos un singlete:

$$|j,m\rangle = |0,0\rangle$$

Por otra parte, hay tres valores posibles de $m = -1, 0, 1$ para $j = 1$

$$|j,m\rangle = \begin{cases} |1,-1\rangle \\ |1,0\rangle \\ |1,1\rangle \end{cases}$$

Podemos expresar los estados $|j,m\rangle$ en términos de $|\frac{1}{2},\frac{1}{2};m_1,m_2\rangle$ como se muestra:

$$\mid j,m\rangle = \sum_{m_1=-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \sum_{m_2=\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \langle \frac{1}{2},\frac{1}{2};m_1,m_2 \mid j,m\rangle \mid \frac{1}{2},\frac{1}{2};m_1,m_2\rangle \tag{3.2}$$

Usando la ecuación (3.2) en los casos $j = 0$ y $j = 1$, tenemos:

$$|0,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = \langle \frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2} \mid 0,0\rangle |\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_{10} + \langle \frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2} \mid 0,0\rangle |\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10} \tag{3.3}$$

$$|1,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = \left\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2} \mid 1,1 \right\rangle \left| \frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2} \right\rangle_{10} \tag{3.4}$$

$$|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = \left\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2} \mid 1,0 \right\rangle \left| \frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2} \right\rangle_{10} + \left\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2} \mid 1,0 \right\rangle \left| \frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2} \right\rangle_{10} \tag{3.5}$$

$$|1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = \left\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2} \mid 1,-1 \right\rangle \left| \frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2} \right\rangle_{10} \tag{3.6}$$

Empezamos con $j = 1$ y como $|1,0\rangle$ y $|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$ están normalizados, la ecuación (3.4) queda:

$$\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2} \mid 1,1\rangle^2 = 1$$

Por la convención de fase, la cual establece que

$$\langle j_1, j_2; j, (j - j_1) \mid j, j\rangle$$

Debe ser positivo, vemos entonces

$$\langle \frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}|1,1\rangle$$

y por lo tanto

$$\boxed{\Rightarrow |1,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = \left| \frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2} \right\rangle_{10}.} \tag{3.7}$$

Para encontrar los coeficientes siguientes de Clebsch-Gordan usaremos los operadores escalera, dados en la ecuación (1.19). primero, partimos de $\mid 1,0\rangle$, aplicamos $\hat{J}_-$ a $\mid 1,1\rangle$

$$\hat{J}_- \mid 1,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) \mid \frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10}$$

Aplicando el operador a la parte izquierda de la ecuación

$$\begin{aligned}\hat{J}_-|1,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} &= \hbar\sqrt{(1+1)(1-1+1)}|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}\\ &= \hbar\sqrt{(2)(1)}|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}\\ &= \hbar\sqrt{2}|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}\end{aligned}$$

En la parte derecha de la ecuación, tenemos:

$$\begin{aligned}\hat{J}_{1-}\mid\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10} &= \hbar\sqrt{(\frac{1}{2}+\frac{1}{2})(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1)}|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10}\\ &= \hbar\sqrt{(1)(1)}|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10}\\ &= \hbar|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{J}_{2-}\mid\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10} &= \hbar\sqrt{(\frac{1}{2}-\frac{1}{2})(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1)}|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_{10}\\ &= \hbar\sqrt{(1)(1)}|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_{10}\\ &= \hbar|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_{10}\end{aligned}$$

Por lo que

$$\hat{J}_{1-}+\hat{J}_{2-} = \hbar|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10}+\hbar\mid\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_{10}$$

Finalmente

$$\boxed{\Rightarrow|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10}+\frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_{10}} \tag{3.8}$$

Ahora para encontrar $\mid 1,-1\rangle$ aplicamos $\hat{J}_-$ en (3.8), obtenemos:

$$\boxed{\Rightarrow|1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = |\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_{10}} \tag{3.9}$$

Finalmente para encontrar $\mid 0,0\rangle$ aplicamos $\hat{J}_-$ en (3.9), y obtenemos:

$$\boxed{\Rightarrow|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = -\frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle_{10}+\frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle_{10}} \tag{3.10}$$

2. *Espacio generado por* $j_1 = \frac{3}{2}$ y $j_2 = \frac{1}{2}$

Los valores permitidos del momento angular están dados por la ecuación (1.30), por lo que para este caso, tenemos:

$$\left|\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\right| \leq j \leq \frac{3}{2}+\frac{1}{2}$$

$$1 \leq j \leq 2.$$

El momento angular total j tiene dos valores posibles, los cuales son 2 y 1.

a) Eigenvectores asociados con $j = 2$, empezamos con

$$\left\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right| 2, 2 \Big\rangle = 1$$

encontramos el primer coeficiente

$$\boxed{\Rightarrow |2,2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{10}.} \tag{3.11}$$

Ahora para encontrar $|2,1\rangle$ aplicamos J_- a la ecuación (3.11)

$$J_- |2,2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = (J_{1-} + J_{2-}) \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{10}$$

aplicando a la parte izquierda de nuestra expresión

$$\begin{aligned} J_- |2,2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \hbar\sqrt{(2+2)(2-2+1)}|2,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{(4)(1)}|2,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{4}|2,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= 2\hbar|2,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})}. \end{aligned}$$

para la parte derecha de nuestra ecuación tenemos:

$$\begin{aligned} J_{1-} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{10} &= \hbar\sqrt{\left(\frac{3}{2} + \frac{3}{2}\right)\left(\frac{3}{2} - \frac{3}{2} + 1\right)} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \left(\frac{3}{2} - 1, \frac{1}{2}\right) \right\rangle_{10} \\ &= \hbar\sqrt{(3)(1)} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{10} \\ &= \sqrt{3}\hbar \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{10} \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} J_{2-} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{10} &= \hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{10} \\ &= \hbar\sqrt{(1)(1)\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{10}} \\ &= \hbar \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{10} \end{aligned}$$

lo cual nos deja:

$$2\hbar|2,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \sqrt{3}\hbar \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{10} + \hbar \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{10}.$$

Encontramos entonces:

$$\boxed{\Rightarrow |2,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \sqrt{\frac{3}{4}} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{10} + \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{10}.} \tag{3.12}$$

Para encontrar $|2,0\rangle$ aplicamos J_- a la ecuación (3.12)

$$J_-|2,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = (J_{1-}+J_{2-})\left[\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

del lado izquierdo, tenemos

$$\begin{aligned} J_-|2,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \hbar\sqrt{(2+1)(2-1+1)}|2,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{(3)(2)}|2,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{6}|2,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \end{aligned}$$

Mientras que del lado derecho

$$J_{1-}\left[\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

$$\begin{aligned} &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\sqrt{\left(\frac{4}{2}\right)\left(\frac{2}{2}+1\right)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\left(\frac{1}{2}-\frac{2}{2}\right),\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]+\frac{1}{2}\left[\hbar\sqrt{\left(\frac{6}{2}\right)(1)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\sqrt{(2)(2)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]+\frac{1}{2}\left[\hbar\sqrt{(3)(1)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\sqrt{4}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]+\frac{1}{2}\left[\hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[2\hbar\left|\frac{3}{4},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]+\frac{1}{2}\left[\hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{3}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \end{aligned}$$

y

$$J_{2-}\left[\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

$$\begin{aligned} &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+1\right)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]+\frac{1}{2}\left[\hbar\sqrt{\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right)(1+1)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]+\frac{1}{2}\left[\hbar\sqrt{(2)(0)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \end{aligned}$$

lo cual nos deja:

$$\sqrt{6}\hbar|2,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \sqrt{3}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.$$

Encontramos entonces:

$$\boxed{\Rightarrow |2,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.} \tag{3.13}$$

Para encontrar $|2,-1\rangle$ aplicamos J_- a la ecuación (3.13)

$$J_-|2,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = (J_{1-}+J_{2-})\left[\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

del lado izquierdo, tenemos

$$\begin{aligned} J_-|2,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \hbar\sqrt{(2+0)(2-0+1)}|2,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{(2)(3)}|2,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{6}|2,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \end{aligned}$$

Mientras que del lado derecho

$$J_{1-}\left[\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hbar\sqrt{\left(\frac{2}{2}\right)\left(\frac{4}{2}+1\right)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\left(-\frac{3}{2}\right),\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]+\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hbar\sqrt{(2)\,(2)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\left(-\frac{3}{2}\right),\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]+\frac{\sqrt{4}}{\sqrt{2}}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{\frac{3}{2}}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]+\sqrt{2}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \end{aligned}$$

y

$$J_{2-}\left[\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hbar\sqrt{1}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \end{aligned}$$

lo cual nos deja:

$$\sqrt{6}\hbar|2,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \sqrt{\frac{3}{2}}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\sqrt{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.$$

Encontramos entonces:

$$\boxed{\Rightarrow |2,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.} \tag{3.14}$$

Para encontrar $|2,-2\rangle$ aplicamos J_- a la ecuación (3.14)

$$J_-|2,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = (J_{1-}+J_{2-})\left[\frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

del lado izquierdo, tenemos

$$\begin{aligned} J_-|2,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \hbar\sqrt{(2+(-1))(2-(-1)+1)}|2,-2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{(1)(4)}|2,-2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{4}|2,-2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= 2\hbar|2,-2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \end{aligned}$$

Mientras que del lado derecho

$$\begin{aligned} & J_{1-}\left[\frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\sqrt{(1)(2+1)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \frac{3}{2}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} & J_{2-}\left[\frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\hbar\sqrt{(1)(1)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \end{aligned}$$

lo cual nos deja:

$$2\hbar|2,-2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \frac{3}{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+\frac{1}{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.$$

Encontramos entonces:

$$\boxed{\Rightarrow |2,-2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.} \tag{3.15}$$

b) Eigenvectores asociados con $j=1$, podemos expresar los estados como se muestra:

$$|\,1,m\rangle = \sum\sum\langle\frac{3}{2},\frac{1}{2};m_1,m_2\mid 1,m\rangle\mid\frac{3}{2},\frac{1}{2};m_1,m_2\rangle$$

Empezamos con el estado

$$|1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = a\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}+b\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.$$

sabemos que

$$\langle 1,1|1,1\rangle = a^2+b^2=1$$

Usando la ecuación (3.12)

$$\langle 2,1|1,1\rangle = \frac{a}{2} + b\sqrt{\frac{3}{4}} = 0$$

por la convención de fase, entonces tenemos:

$$a = \sqrt{\frac{3}{4}} \quad \text{y} \quad b = -\frac{1}{2}$$

Encontrando el primer coeficiente

$$\boxed{\Rightarrow |1,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.} \tag{3.16}$$

Ahora para encontrar $|1,0\rangle$ aplicamos J_- a la ecuación (3.16)

$$J_-|1,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = (J_{1-} + J_{2-})\left[\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right].$$

aplicando a la parte izquierda de nuestra expresión

$$\begin{aligned} J_-|1,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \hbar\sqrt{(2)(1)}|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{2}|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \end{aligned}$$

Mientras que del lado derecho

$$J_{1-}\left[\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

$$\begin{aligned} &= \sqrt{\frac{3}{4}}J_{1-}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{2}J_{1-}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \\ &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] - \frac{1}{2}\left[2\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \frac{3}{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \end{aligned}$$

y

$$J_{2-}\left[\sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

$$\begin{aligned} &= \sqrt{\frac{3}{4}}J_{2-}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{2}J_{2-}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \\ &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left[\hbar\sqrt{0}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle_{10}\right] - \frac{1}{2}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= -\frac{1}{2}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \end{aligned}$$

lo cual nos deja:

$$\hbar\sqrt{2}|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \frac{3}{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}$$

$$\sqrt{2}|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.$$

Encontramos entonces:

$$\boxed{\Rightarrow |1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.} \tag{3.17}$$

Finalmente para encontrar $|1,-1\rangle$ aplicamos J_- a la ecuación (3.17)

$$J_-|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = (J_{1-}+J_{2-})\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right].$$

aplicando a la parte izquierda de nuestra expresión

$$\begin{aligned} J_-|1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \hbar\sqrt{(1)(2)}|1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \\ &= \hbar\sqrt{2}|1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} \end{aligned}$$

Mientras que del lado derecho

$$J_{1-}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right]$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2}}J_{1-}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{\sqrt{2}}J_{1-}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hbar\sqrt{\left(\frac{4}{2}\right)(2)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hbar\sqrt{\left(\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{2}+1\right)}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hbar\sqrt{4}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \sqrt{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} &J_{2-}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}J_{2-}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{\sqrt{2}}J_{2-}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \\ &= -\frac{1}{2}\left[\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right] \end{aligned}$$

lo cual nos deja:

$$\hbar\sqrt{2}|1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \sqrt{2}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \sqrt{\frac{3}{2}}\,\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{\sqrt{2}}\hbar\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}$$

$$\sqrt{2}|1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \frac{\sqrt{2}}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \sqrt{\frac{3}{2}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.$$

Encontramos entonces:

$$\boxed{\Rightarrow |1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} = \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{\sqrt{3}}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}.} \tag{3.18}$$

3.1.3. Valores encontrados

Usando la notación de la ecuación 1.41, todos los valores calculados son:

Estado base

El momento angular total toma el valor $j = 0, 1$ y los dos únicos estados permitidos son:

$$\begin{aligned} |0;0\rangle^{(0,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} &= \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{00} \\ |1;0\rangle^{(0,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} &= \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{00} \end{aligned} \tag{3.19}$$

Primer estado excitado

Espacio generado por $j_1 = \frac{1}{2}$ y $j_2 = \frac{1}{2}$
El momento angular total j tiene dos valores posibles 1 y 0:

1) Caso j=1: Los tres estados son

$$\begin{aligned} |1,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} &= \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \\ |1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} + \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right) \\ |1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} &= \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \end{aligned} \tag{3.20}$$

2) Caso j=0: Solo hay un estado dado por

$$|0,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right) \tag{3.21}$$

Espacio generado por $j_1 = \frac{3}{2}$ y $j_2 = \frac{1}{2}$
El momento angular j tiene dos posibles valores 2 y 1:

1) Caso j=2: Los cinco estados son

$$\begin{aligned} |2,2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \\ |2,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} + \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \\ |2,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} + \left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right) \\ |2,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} + \sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \\ |2,-2\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \end{aligned} \tag{3.22}$$

2) Caso j=1: Hay tres estados dados por

$$\begin{aligned} |1,1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \\ |1,0\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10}\right) \\ |1,-1\rangle^{(1,0)}_{(\frac{3}{2},\frac{1}{2})} &= \frac{1}{2}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_{10} - \sqrt{\frac{3}{4}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2};-\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{10} \end{aligned} \tag{3.23}$$

La energía de la molécula de agua está degenerada [3]. Esta degeneración se desplaza cuando se considera un campo magnético.

Capítulo 4

Conclusión

El principio del funcionamiento de los dispositivos de RMI es la interacción del campo magnético constante con los protones de los hidrógenos de la molécula de agua, en un trabajo previo de el departamento de física médica [3].

En este trabajo se ha completado el estudio anterior[4] utilizando el mismo modelo de agua, considerando el espín de los protones. Se obtuvo el momento angular total de la molécula de agua, que corresponde a la suma de los dos momentos angulares orbitales de cada protón (l_1 y l_2) y su respectivo espín, es decir, la suma de cuatro momentos angulares. Para considerar la parte del espín, esta función de onda se describe mediante los seis números cuánticos l_1, l_2, m_1, m_2, m_{s_1} y m_{s_2} y la energía está degenerada. Esta degeneración desaparece cuando la molécula de agua se sumerge en un campo magnético constante.

Obteniendo así dos estados para el estado base, ya que como estudiamos en la sección *estado base* se vio que por tratar con fermiones, no existen estados en los cuales, las partículas tengan los mismos números cuánticos. Y doce estados para el primer estado excitado. Completando así el esquema de estados posibles, haciendo uso de las técnicas de suma de momento angular y técnicas para el calculo de los coeficientes de Clebsch-Gordan.
Con la propuesta de este modelo se obtiene un conocimiento del momento angular total de la molécula del agua, tomando en cuenta el momento angular orbital y el espín. Esto es importante porque este momento angular es el mismo que interacciona con el campo magnético, por lo que al encontrar los estados de energía de cada estado será posible tener una mejor resolución en la imágenes obtenidas.

Finalmente se deja abierta la investigación para los cálculos con diferente momento angular orbital, la revisión en un futuro para poder comprender con más detalle la molécula de agua y así inducir a una aplicación en la resonancia magnética para mejores diagnósticos en el área de la medicina.

Bibliografía

[1] P. Ball, Chem. Rev. 2008, 74–108.

[2] Cohen-Tannoudji, Claude; Bernard Diu, Franck Laloë (1977). Quantum Mechanics. vol.1 (3ª edición). París, Francia: Hermann. pp. 898. ISBN 0-471-16432-1.

[3] C.H. Zepeda Fernández et. al. Rev. Mex. Fis., 68, 3, 202.

[4] Aguilar Cuevas, Jorge Luis; *Niveles de energía y funciones de onda de los protones de los átomos de hidrógeno asociados a la molécula del agua: rompimiento de la degeneración en presencia de un campo magnético producido en una resonancia magnética.* https://hdl.handle.net/20.500.12371/14994

[5] Franks, F., Water: A Matrix of Life, (2nd Ed., Royal Society of Che-mistry,Cambridge, UK (2000), cap. 2)

[6] S.D. Serai, et al. Components of a magnetic resonance imaging system and their relationship to safety and image quality. Pediatr. Radiol. **51** 5. 716-723 (2021). doi: 10.1007/s00247-020-04894-9. Epub 2021 Apr 19. PMID: 33871725.

[7] J. A. Fessler. *O*ptimization Methods for Magnetic Resonance Image Reconstruction: Key Models and Optimization Algorithms, IEEE Signal Processing Magazine, **37** 1, pp. 33-40 (2020). doi: 10.1109/MSP.2019.2943645.

[8] B. Wen, et al. *T*ransform Learning for Magnetic Resonance Image Reconstruction: From Model-Based Learning to BuildingNeural Networks, IEEE Signal Processing Magazine **37** 1 pp. 41-53 (2020) doi:10.1109/MSP.2019.2951469.

[9] S. S. Zumdahl. *w*ater Encyclopedia Britannica. (2021). https://www.britannica.com/science/water.

[10] Raven, P. H., Johnson, G. B., Mason, K. A., Losos, J. B., and Singer, S. R. (2014). The nature of molecules and properties of water. In Biology (10th ed., AP ed., pp. 17-30). New York, NY: McGraw-Hill.

[11] Reece, J. B., Urry, L. A., Cain, M. L., Wasserman, S. A., Minorsky, P. V., and Jackson, R. B. (2011). Water and life. In Campbell biology (10th ed., pp. 44-54). San Francisco, CA: Pearson.

[12] Pauling, G. (1960). The nature of the chemical bond. 3rd ed., Cornell Univrsity Press. Ithaca, p 469.

[13] S. A. Rice and P. Gray, (1965). The Statistical Mechanics of Simple Liquids, Wiley-Interscience, New York, sect. 2.6.

[14] B. J. Alder and T. Wainwright in I. Prigogine, Ed., (1958) Transport Processes in Statistical, Interscience, New York, p. 97.

[15] Soe Aung. (1969). Thesis of Doctor of Philosophy. Part I Approximate Hartree-Fock Wavefunctions One-electron Properties and Electronic Structure of the W ater Molecule. Part II Perturbation-Variational Calculation of the Nuclear Spin-Spin Isotropic Coupling Constant in HD California Institute of Technology Pasadena California.

[16] B. Clark, et. al. Computing the energy of a water molecule using MultiDeterminants: A simple, efficient algorithm. J. Chem. Phys. 135 244105 (2011). doi: 10.1063/1.3665391

[17] M. Johansson, I ntroduction to Electronic Structure Theory. CSC/PRACE Spring School in Coputational Chemistry 2018. http://iki.fi/mpjohans.