



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

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.

*Tesis presentada como requisito para la obtención del
grado de Licenciado en Física.*

Autor:

Jorge Luis Aguilar Cuevas

Asesores:

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Dr. Javier M. Hernández López

Puebla, Puebla.

Junio 2021

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.

TESIS

Autor:

Jorge Luis Aguilar Cuevas

Asesores:

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Dr. Javier M. Hernández López

Título: 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.

Estudiante: Aguilar Cuevas Jorge Luis

COMITÉ

Dr. De Celis Alonso Benito

Presidente

Dr. Rebolledo Herrera Lucio Fidel

Secretario

Dra. Bonilla Capilla Beatriz

Vocal

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Dr. Javier M. Hernández López

Asesores

Dedicatoria.

Este trabajo está dedicado a mis familiares, padres y hermanos que me han acompañado a lo largo de este recorrido. Por sus sabias palabras y ánimos, pues gracias a ellos, el recorrido fue más ameno.

Agradecimientos

Quiero agradecer a mis padres y hermanos, por todo su apoyo y cariño que me han brindado durante esta etapa de mi vida. Igual a los buenos amigos que conseguí durante este recorrido. También agradezco a mis asesores, el Dr. Cristian y el Dr. Javier, por su apoyo.

Índice

1. Motivación	7
2. Intrducción	8
2.1. La molécula del agua.	8
2.2. Espín nuclear.	9
2.3. Momento magnético nuclear.	9
2.4. Imagen por resonancia magnética.	10
2.5. Estudios experimentales de la interacción de un campo magnético con la molécula del agua.	11
3. Solución de la ecuación de Schrödinger aplicada a los protones del átomo de hidrógeno acoplados a la molécula del agua	13
3.1. Planteamiento del problema	13
4. Ruptura de la degeneración en la energía de los protones del átomo de hidrógeno acoplados a la molécula del agua	21
4.1. Ecuación de Schrödinger como función de un campo magnético. .	21
4.2. Eigenenergía de los protones del átomo de hidrógeno acoplados a la molécula del agua en presencia de un campo magnético	24
4.2.1. Resultados	25
4.3. Valores numéricos para un campo magnético de 5T	28
5. Conclusiones	29
6. Bibliografía	30

1. Motivación

El agua es una sustancia compuesta de dos hidrógenos y un oxígeno, se puede encontrar en el estado líquido, sólido y en gas, es muy importante para la vida, pues conforma la mayor parte de nuestro planeta, permite la vida de los sistemas biológicos, como el del ser humano.

El peso del cuerpo humano está hecho en un 60% de agua, es decir que es la sustancia que compone en su mayoría nuestros cuerpos, así que es muy importante para que nosotros seamos funcionales como organismos biológicos, ya que sin el agua no existiría la vida como la conocemos. Con el agua se construyen las células y los fluidos corporales, cumple otras funciones. También ayuda a eliminar los residuos corporales a través de la orina y transporta nutrientes en nuestro cuerpo. Igual sirve para controlar la temperatura corporal mediante la evaporación del sudor.

Además de la importancia del agua en procesos biológicos, esta sustancia cumple un papel importante para realizar estudios en el cuerpo humano, por ejemplo, resonancia Magnética. 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 y de esta manera para obtener imágenes que sirven para el diagnóstico médico.

El objetivo de este trabajo es encontrar los valores de energía de la molécula del agua cuando se aplica un campo magnético, ya que estas son las condiciones en las que se encuentra la molécula del agua cuando un paciente es introducido en una máquina de RMI y se realiza el experimento.

Además de que se puede observar el rompimiento en la degeneración en los valores de energía de los protones cuando interacciones con un campo magnético externo. La estructura de una molécula del agua cuando no está en presencia de un campo eléctrico, se puede aproximar como un cuerpo rígido, en el cual los protones solamente tienen movimiento angular y su comportamiento es parecido a un átomo hidrogenoide. En presencia de un campo magnético la molécula del agua tendría un fenómeno parecido al efecto Zeeman, la diferencia es que en este modelo se consideran dos partículas (protones) que interaccionan entre sí, además de la interacción con el núcleo (Oxígeno doblemente cargado) y el campo magnético externo. Por lo tanto, el efecto Zeeman se considera un caso particular de un sistema con potencial central, partículas en presencia de dicho potencial y un campo magnético externo.

2. Intrducción

El agua es una molécula importante para la vida, pues muchos procesos la necesitan para ser llevados a cabo, además el cuerpo humano está compuesto en un 60% de agua, con el avance de la tecnología y sobre todo la tecnología aplicada en la ciencia medica ha tenido como consecuencia que ramas de la ciencia como biología, química, y en este caso la física estudien qué es lo que sucede con el cuerpo humano y sus componentes al ser expuestos a experimentos que involucren fenómenos físicos, en este caso hablaremos de la resonancia magnética.

2.1. La molécula del agua.

La molécula del agua está compuesta por dos átomos de hidrógeno que comparten un par electrónico con el de oxígeno para formar un enlace covalente simple, el oxígeno es más electronegativo que los hidrógenos, por lo tanto el oxígeno atrae más a los electrones y se crea una distribución desigual de estos, entonces se crea una densidad de carga negativa en el oxígeno equivalente a $-2e$, siendo e la magnitud de la carga del electrón y una densidad de carga positiva en los hidrógenos, cada uno con una carga $+e$.

La geometría de la molécula del agua forma un tetraedro irregular cuyos vértices son los electrones no compartidos y los enlaces con los hidrógenos. La repulsión entre los orbitales no enlazantes del oxígeno comprimen un poco los orbitales enlazantes con el hidrógeno provoca que el ángulo central sea de 104.5° . Estos valores fueron obtenidos en experimentos de espectroscopía [1].

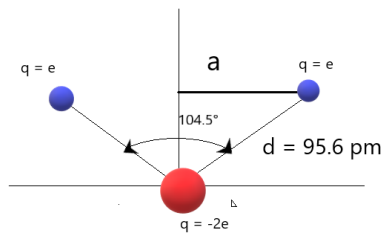


Figura 1: Esquema del problema. Los puntos azules representan los protones y el rojo representa el electrón. La distancia entre los hidrógenos es $2a$.

En la Figura 1 se observan como están acoplados los átomos de hidrógeno al oxígeno, siendo estos los de color azul y el oxígeno en color rojo, la distancia d entre cada uno de los hidrógenos con el oxígeno es de $d = 95,8 \text{ pm}$ y $2a = 1,58 \times d$ es la distancia entre los hidrógenos se puede obtener usando el teorema de pitagoras.

2.2. Espín nuclear.

El espín es una propiedad física de las partículas, así como la masa, y la carga.

Los electrones son partículas elementales, poseen un espín y un momento angular orbital, al sumarlos obtenemos el momento angular total del electrón(j).

Una corriente de electrones que circula por una bobina genera un campo magnético, esto es conocido como la ley de Ampere, de igual manera un electrón que gira alrededor de un núcleo genera un campo magnético que tiene un momento angular asignado.

El espín nuclear de los protones y los neutrones se comporta como el espín del electrón, los valores posibles para el espín son $S = \pm \frac{1}{2}$, además, también tienen un momento magnético asociado [2].

Los núcleos de los átomos están compuestos por protones y neutrones, a estos también se les conoce como nucleones. En un núcleo con N nucleones el momento angular total es la suma vectorial del momento angular de cada uno(j) y se denomina I . En general el núcleo se comporta como si fuera una sola entidad que tiene un momento angular intrínseco I [3].

Cada espín nuclear posee un momento magnético nuclear el cual le permite interactuar magnéticamente con su entorno.

Si en un núcleo tenemos un protón que tiene un estado digamos S_+ , este se puede emparejar con otro protón en estado antiparalelo, digamos S_- , para tener un momento angular total $I = 0$.

Si $I = 0$ entonces no tenemos un momento magnético asociado, así que en las IMR se trabajan con núcleos cuyo $I \neq 0$ [4].

En la presencia de un campo magnético externo el estado del espín de las partículas se ve alterado y obtienen una energía potencial magnética distinta.

Al aplicar un campo magnético uniforme se produce una polarización del espín, que además a determinadas radiofrecuencias induce una transición entre estados del espín, esto produce algunos estados de espín con mayor energía, al detener este campo magnético los estados alterados regresan a su estado natural, de manera que se libera energía.

2.3. Momento magnético nuclear.

Cada espín nuclear tiene asociado un momento magnético que a su vez está asociado con el momento angular del núcleo. Para los protones y neutrones es común expresar estos momentos magnéticos en términos del espín nuclear la misma manera que al tratamiento de los momentos magnéticos del espín del electrón y del momento angular orbital del electrón.

Para los casos de espín de electrones y orbitales, los momentos magnéticos se expresan en términos de una unidad llamada magnetón de Bohr que es una constante física que está relacionada con el momento magnético del electrón.

En la presencia de un campo magnético el espín del electrón y del protón sufren una precesión con cierta frecuencia alrededor de este campo magnético, llamada frecuencia de Larmor denominada ω_0 [5].

En el caso general, la frecuencia de Larmor es proporcional al campo magnético externo B_0 , está expresado por:

$$\omega_0 = \gamma B_0$$

Donde γ es la constante giromagnética y depende de cada átomo.

Para un campo magnético $B = 1T$, la frecuencia de Larmor para el electrón ω_e y del protón ω_p son:

$$\omega_{es} = 2 \frac{\mu_e B}{\hbar} = 1,7608 \times 10^{11} s^{-1}$$

$$\nu_e = \frac{\omega_{es}}{2\pi} = 28,025 GHz$$

$$\omega_{ps} = 2 \frac{\mu_p B}{\hbar} = 2,6753 \times 10^8 s^{-1}$$

$$\nu_p = \frac{\omega_{ps}}{2\pi} = 42,5781 MHz$$

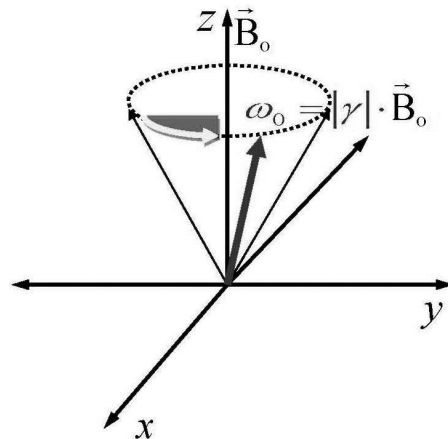


Figura 2: Precesión de Larmor

2.4. Imagen por resonancia magnética.

La resonancia magnética (MRI) es una técnica de diagnóstico médico que explota la resonancia nuclear magnética para excitar el espín de los protones en el cuerpo humano. El contraste de la imagen proviene de variaciones en la fuerza de la señal de resonancia debido a las diferencias en la densidad y la tasa de relajación de espín de los protones encontrados en diferentes tipos de tejido (hueso, músculo, grasa, etc.)[6]. La imagen por resonancia magnética (IRM), es una técnica utilizada para obtener información sobre la estructura y composición del cuerpo a analizar. Esta información es procesada por ordenadores y

transformada en imágenes de la muestra que ha sido analizada, esta es utilizada principalmente en la medicina para observar alteraciones en los tejidos, detectar cáncer, entre otras patologías, un ejemplo de IMR es la Figura 3.

Las IMR utilizan campos magnéticos para alinear la magnetización nuclear de los núcleos de hidrógeno del agua en el cuerpo. Estos núcleos resuenan a una frecuencia proporcional al campo magnético ejercido de forma que se puede aplicar un campo de radiofrecuencia (RF) para alterar sistemáticamente el alineamiento de los espines de esa magnetización, lo que provoca que los núcleos de hidrógeno produzcan un campo magnético rotacional detectable por el escáner. Esa señal puede ser manipulada con campos magnéticos adicionales y así construir con más información imágenes del cuerpo. Las máquinas de IMR tienen un gran

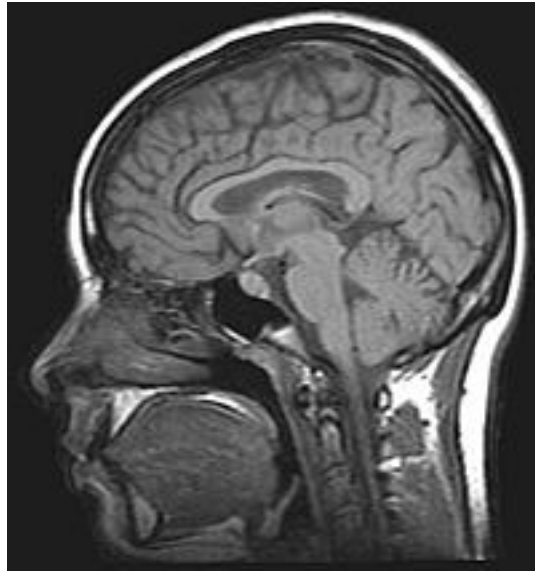


Figura 3: Imágen por resonancia magnética del cerebro de una persona.

imán que es capaz de generar un campo magnético constante con un valor de gran intensidad de 0,5 a 5 Teslas.

2.5. Estudios experimentales de la interacción de un campo magnético con la molécula del agua.

Las dimensiones y las propiedades puramente cuánticas de las partículas que componen a la molécula del agua, sugiere que la descripción se haga mediante la mecánica cuántica. Sin embargo, la solución de la ecuación de Schrödinger puede resultar muy complicada de obtenerse debido al Hamiltoniano del sistema, el cual considera interacción entre todas las partículas y sus correspondientes coordenadas, además de que se complicaría aún más al considerar al espín. Por

lo cual no hay muchos estudios teóricos en este campo. Estas complicaciones se pueden minorar al considerar restricciones (como se realizan en este trabajo). Se han realizado, algunos análisis teóricos utilizando correcciones relativistas en el átomo de hidrógeno, haciendo uso de la estructura fina [7], donde se estudian los electrones en el orbital.

Algunos experimentos donde se coloca una muestra de agua en un campo magnético con el fin de observar los cambios en las propiedades de este material tan valioso [8]. La importancia de la interacción de un campo magnético con materia cobran relevancia en la aplicación a tejidos biológicos [9]. Experimentalmente se han encontrado algunos valores de energía para la molécula del agua [10].

El estudio que se realiza en este trabajo es completamente teórico, donde el análisis se realiza sobre los protones que componen cada núcleo del átomo de hidrógeno asociados a la molécula del agua, mientras que en otros trabajos, por ejemplo, el átomo de hidrógeno se analiza un electrón. El objetivo principal es encontrar las eigenfunciones y eigenvalores de dichos protones sin estar en presencia de un campo magnético. Finalmente, se muestra el rompimiento de la degeneración de la energía cuando la molécula del agua se encuentra en un campo magnético.

3. Solución de la ecuación de Schrödinger aplicada a los protones del átomo de hidrógeno acoplados a la molécula del agua

3.1. Planteamiento del problema

Como se ha mencionado, el problema se plantea desde la geometría molecular de la molécula del agua, que está compuesta por un átomo de oxígeno y dos átomos de hidrógeno.

Ambos hidrógenos se mantienen a una distancia d del oxígeno, la distancia entre ellos también es constante con un valor $2a$ y están separados un ángulo $\theta = 104,5^\circ$, el oxígeno al ser más electronegativo que los hidrógenos, adquiere una carga negativa equivalente a $q_1 = -2e$ y cada hidrógeno adquiere una carga de $q_1 = e$. El esquema que representa el problema es el de la imagen 1.

Lo que nos interesa es conocer los valores de energía de cada uno de los hidrógenos sin considerar su espín, así que partimos de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula sin espín en coordenadas cartesianas:

$$i\frac{\partial\Psi(x, y, z, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2\Psi(x, y, z, t) + \hat{V}(x, y, z, t)\Psi(x, y, z) \quad (1)$$

Donde $\Psi(x, y, z, t)$ es la función de onda dependiente del espacio y del tiempo. Por la manera en que está planteado el problema el potencial es independiente del tiempo y la función de onda se escribe como el producto de una función del espacio y la componente temporal:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (2)$$

Aquí $\psi(x, y, z)$ es la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2\psi(x, y, z) + \hat{V}(x, y, z)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (3)$$

Los valores de la energía son entonces, $\hat{H}\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$

El hamiltoniano de un sistema es la suma de la energía cinética y la energía potencial:

$$H = K + V \quad (4)$$

Donde K es la energía cinética, $K = \frac{1}{2}mv^2$, siendo v la velocidad, m la masa y V es el potencial del sistema, que puede ser dependiente o independiente del tiempo.

Es conveniente escribir la energía cinética en términos del momento:

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (5)$$

Como nuestro enfoque es utilizando la mecánica cuántica se trabaja con operadores para obtener la información del sistema, así escribiendo el operador momento para una dimensión obtenemos:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (6)$$

Para una partícula que se mueve en una dimensión bajo un potencial independiente del tiempo, su hamiltoniano es:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x) \quad (7)$$

En el caso del espacio tridimensional con coordenadas cartesianas, el hamiltoniano es el siguiente:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(x, y, z) \quad (8)$$

Donde ∇^2 es el laplaciano, y en coordenadas cartesianas se escribe como:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (9)$$

Ahora queremos obtener el hamiltoniano de nuestro sistema, para ello tenemos que ver cómo es la energía cinética y la energía potencial, así que comenzamos encontrando la energía potencial. El potencial del sistema, de la interacción de los hidrógenos y el oxígeno, es un potencial de Coulomb. Cada hidrógeno interactúa con el otro hidrógeno y con el oxígeno, por lo tanto la energía potencial del sistema se puede escribir de la siguiente forma:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{q_1 q_2}{r_{12}} + \frac{q_1 q_3}{r_{13}} + \frac{q_2 q_3}{r_{23}} \right) \quad (10)$$

La carga del oxígeno es $q_1 = -2e$, y la carga de los hidrógenos $q_2 = q_3 = e$, podemos ver las distancias r_i en la Figura 1.

Así la energía potencial es:

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{-2e^2}{d} + \frac{-2e^2}{d} + \frac{e^2}{r} \right) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{e^2}{2a} - \frac{4e^2}{d} \right)$$

Usando trigonometría podemos ver que $r = 2a = 1,58 \times d$, como todos son valores constantes ya conocidos, podemos obtener el valor numérico de la energía potencial, $e = 1,6 \times 10^{-19} C$, $d = 95,8 \times 10^{-12} m$ y $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \times 10^9 \frac{Nm^2}{C^2}$ entonces:

$$V = -50,5430124eV$$

Como la distancia entre hidrógenos y oxígeno no cambia, la parte radial es constante, por lo tanto tenemos un problema angular, así que es conveniente escribir el sistema en coordenadas esféricas.

Al cambiar la base de coordenadas, el hamiltoniano también cambia. El laplaciano en coordenadas esféricas se escribe de la siguiente manera:

$$\hat{\nabla}^2(r, \theta, \phi) = \hat{\nabla}_r^2 - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\nabla}_{\theta\phi}^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \quad (11)$$

Donde $\hat{\mathbf{L}}^2$ es el operador momento angular orbital:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (12)$$

Por lo tanto, el hamiltoniano del sistema en coordenadas esféricas se observa de la siguiente manera.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}^2 + \hat{V}(d) \quad (13a)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \right) + \hat{V}(d) \quad (13b)$$

Recordando que $r = d = \text{constante}$, el hamiltoniano se reduce a:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2md^2} + \hat{V}(d) \quad (14)$$

Ahora, por la simetría del sistema, podemos resolver primero para un hidrógeno y la solución será la misma para el otro, así que comenzamos con el hamiltoniano de un solo hidrógeno.

Como $\hat{V}(d)$ es constante, la dependencia es completamente angular, y las funciones de onda del sistema son los armónicos esféricos:

$$\hat{H} \psi_{l_m} = \frac{1}{2md^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{l_m} + \hat{V} \psi_{l_m} = E \psi_{l_m} \quad (15a)$$

$$\frac{1}{2md^2} \hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{l_m} = (E - V) \psi_{l_m} \quad (15b)$$

Donde $E - V > 0$, pues el valor de V es negativo.

Obtenemos los eigenvalores de $\hat{\mathbf{L}}^2$ que es un problema ya resuelto.

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \psi_{l_m} = \hbar^2 l(l+1) \psi_{l_m}$$

Así que reemplazando los eigenvalores de $\hat{\mathbf{L}}^2$, la energía cuantizada de un sólo hidrógeno:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2md^2} l(l+1) + V \quad (16)$$

Ahora, consideramos que el potencial se mantiene constante, además, considerando que los hidrógenos son distinguibles, el hamiltoniano del sistema es:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \left(\frac{\hat{\mathbf{L}}_1^2}{2md^2} + \hat{V}(d) \right) + \left(\frac{\hat{\mathbf{L}}_2^2}{2md^2} + \hat{V}(d) \right) \quad (17)$$

La ecuación de Schrödinger para un sistema de dos partículas es:

$$\hat{H}\psi_{12}(\zeta_1, \zeta_2) = E_{12}\psi_{12}(\zeta_1, \zeta_2) \quad (18)$$

Donde ζ_i con $i = 1, 2$ son los grados de libertad de la partícula i .

Con esas consideraciones del sistema podemos separar para cada hidrógeno su hamiltoniano:

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{L}}_1^2}{2md^2} + \hat{V}(d)\right]\psi_1(\zeta_1) = \varepsilon_1\psi_1(\zeta_1) \quad (19a)$$

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{L}}_2^2}{2md^2} + \hat{V}(d)\right]\psi_2(\zeta_2) = \varepsilon_2\psi_2(\zeta_2) \quad (19b)$$

La energía total del sistema es $E = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$, donde ε_i es la energía del i -ésimo hidrógeno, $i = \{1, 2\}$, así que hay que obtener la energía de cada uno de los hidrógenos, como ya conocemos la energía de un sólo hidrógeno, la energía del otro se encuentra de manera análoga, entonces:

$$\varepsilon_{l_1} = \frac{\hbar^2}{2md^2}l_1(l_1 + 1) + V \quad (20a)$$

$$\varepsilon_{l_2} = \frac{\hbar^2}{2md^2}l_2(l_2 + 1) + V \quad (20b)$$

Finalmente, la energía potencial que aporta cada hidrógeno al sistema es $V = -25,2715062$ eV y sumando la energía de ambos hidrógenos, tenemos:

$$E_{l_1 l_2} = \frac{\hbar^2}{2md^2}l_1(l_1 + 1) + \frac{\hbar^2}{2md^2}l_2(l_2 + 1) + V + V \quad (21a)$$

$$E_{l_1 l_2} = \frac{\hbar^2}{2md^2}l_1(l_1 + 1) + \frac{\hbar^2}{2md^2}l_2(l_2 + 1) - 50,5430124eV \quad (21b)$$

Vimos que las soluciones de funciones de onda son los armónicos esféricos [11].

$$Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \phi_1) = (-1)^{m_1} \sqrt{\left(\frac{2l_1 + 1}{4\pi}\right) \frac{(l_1 - m_1)!}{(l_1 + m_1)!}} P_{l_1}^{m_1}(\cos \theta_1) \quad (22a)$$

$$Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \phi_2) = (-1)^{m_2} \sqrt{\left(\frac{2l_2 + 1}{4\pi}\right) \frac{(l_2 - m_2)!}{(l_2 + m_2)!}} P_{l_2}^{m_2}(\cos \theta_2) \quad (22b)$$

Donde $P_{l_i}^{m_i}$ con $i = 1, 2$ son las funciones de Legendre asociados a los polinomios de Legendre.

La función de onda del sistema es el producto de ambas funciones de onda:

$$\psi(\theta_1, \phi_1, \theta_2, \phi_2) = Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \phi_1) Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \phi_2) \quad (23)$$

Los valores de m_i son $m_i = -l_i, -(l_i - 1), -(l_i - 2), \dots, 0, 1, 2, 3, \dots, l_i - 1, l_i$, con $i = 1, 2$.

En la tabla 1 se muestran los primeros valores de los esféricos armónicos.

l	m	$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$
0	0	$(\frac{1}{4\pi})^{\frac{1}{2}}$
1	0	$(\frac{3}{4\pi})^{\frac{1}{2}} \cos(\theta)$
1	± 1	$\mp (\frac{3}{8\pi})^{\frac{1}{2}} \sin(\theta) e^{\pm i\phi}$
2	0	$(\frac{5}{15\pi})^{\frac{1}{2}} (3 \cos^2(\theta) - 1)$
2	± 1	$\mp (\frac{15}{8\pi})^{\frac{1}{2}} \sin(\theta) \cos(\theta) e^{\pm i\phi}$
2	± 2	$(\frac{15}{32\pi}) \sin^2(\theta) e^{\pm 2i\phi}$

Cuadro 1: Tabla de valores de los esféricos armónicos, de $l = 0$ hasta $l = 2$, por lo tanto $m = -2, -1, 0, 1, 2$

Donde

$$\Theta_{lm}(\theta) = \left[\frac{2l+1(l-m)!}{2(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\theta) \quad (24)$$

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{2\pi} e^{im\phi} \quad (25)$$

En la mecánica cuántica las degeneraciones suceden cuando para un mismo valor de energía existen más de una función de onda. Para ver esto asignamos valores a l_1 y l_2 utilizando la ecuación 26:

$$E_{l_1 l_2} = \frac{\hbar^2}{2md^2} l_1(l_1 + 1) + \frac{\hbar^2}{2md^2} l_2(l_2 + 1) + 2V(d) \quad (26)$$

Para valores de $l_2 = 2$ y $l_1 = 0$ a $l_1 = 3$

$$E_{02} = \frac{\hbar^2}{2d^2 m_p} [0(0+1) + 2(2+1)] + V(d) = 3 \frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d) \quad (27a)$$

$$E_{12} = \frac{\hbar^2}{2d^2 m_p} [1(1+1) + 2(2+1)] + V(d) = 4 \frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d) \quad (27b)$$

$$E_{22} = \frac{\hbar^2}{2d^2 m_p} [2(2+1) + 2(2+1)] + V(d) = 6 \frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d) \quad (27c)$$

$$E_{32} = \frac{\hbar^2}{2d^2 m_p} [3(3+1) + 2(2+1)] + V(d) = 9 \frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d) \quad (27d)$$

Si continuáramos con este procedimiento, pero dejando constante l_1 y variando l_2 desde $l_2 = 0$ a $l_2 = 3$ obtendríamos los mismos valores de la energía, es decir hay degeneración.

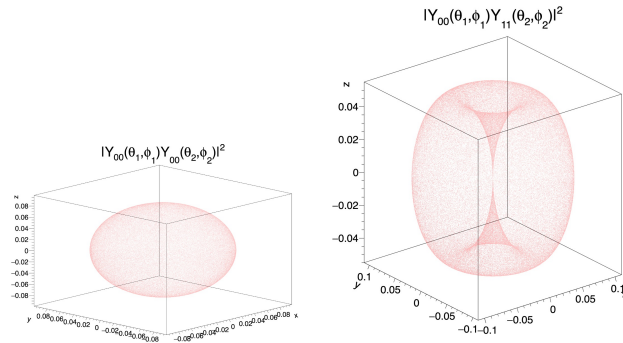
Esto tiene sentido por la forma que tiene la solución, que es la suma de la energía de un hidrógeno en un estado i y la del otro hidrógeno cuando está en un estado j .

En la siguiente sección veremos qué sucede con la degeneración de la energía al aplicar un campo magnético uniforme.

Como vimos, la función de onda del sistema es el producto de la función de onda de cada uno de los hidrógenos.

De la Figura 4 a la Figura 7 podemos ver la gráfica de las funciones de onda del sistema. Como podemos ver en la Tabla 1, el armónico esférico Y_0^0 es un valor constante, entonces este término lo que hace es modificar el tamaño de otras funciones.

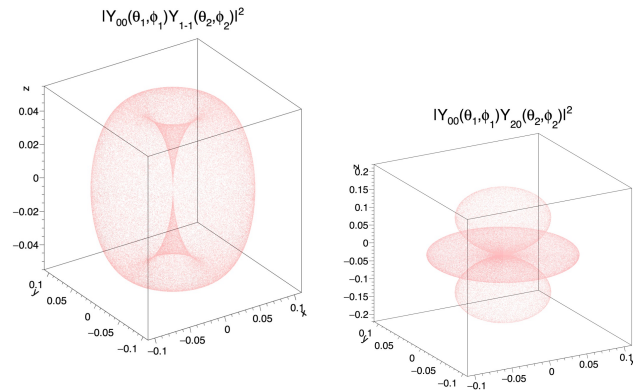
En la Figura 4a tenemos una esfera pues $Y_{l_1}^{m_1}$ y $Y_{l_2}^{m_2}$ son constantes Y_0^0 . En la Figura 4b se tiene algo parecido al caso del átomo del hidrógeno.



(a) Gráfica del armónico esférico $Y_{00}(\theta_1, \phi_1)Y_{00}(\theta_2, \phi_2)$ (b) Gráfica del armónico esférico $Y_{00}(\theta_1, \phi_1)Y_{11}(\theta_2, \phi_2)$

Figura 4

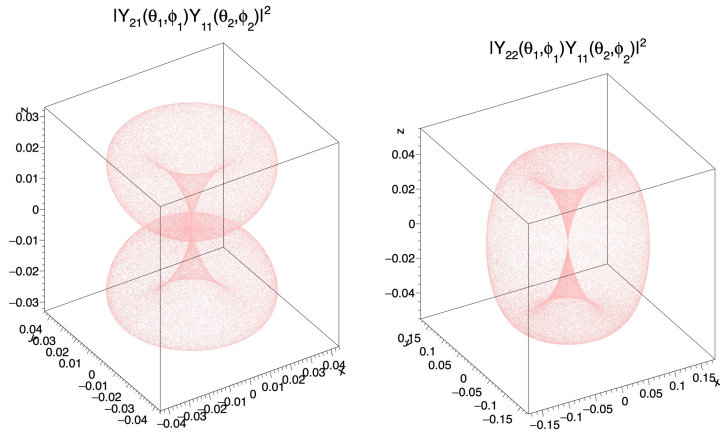
En la Figura 5a y la Figura 5b tenemos algo parecido al caso del átomo de hidrógeno, donde Y_{00} es una constante que sólo modifica el tamaño.



(a) Gráfica del armónico esférico $Y_{00}(\theta_1, \phi_1)Y_{1,-1}(\theta_2, \phi_2)$ (b) Gráfica del armónico esférico $Y_{00}(\theta_1, \phi_1)Y_{20}(\theta_2, \phi_2)$

Figura 5

En la Figura 6a se ve que predomina más la distribución de Y_{21} y en la Figura 6b se aprecia que Y_{11} y Y_{11} tienen la misma distribución así que sale la misma forma.



(a) Gráfica del armónico esférico $Y_{21}(\theta_1, \phi_1) Y_{11}(\theta_2, \phi_2)$ (b) Gráfica del armónico esférico $Y_{22}(\theta_1, \phi_1) Y_{11}(\theta_2, \phi_2)$

Figura 6

Se puede ver que la función que más cambia respecto a la del átomo de hidrógeno es la Figura 7.

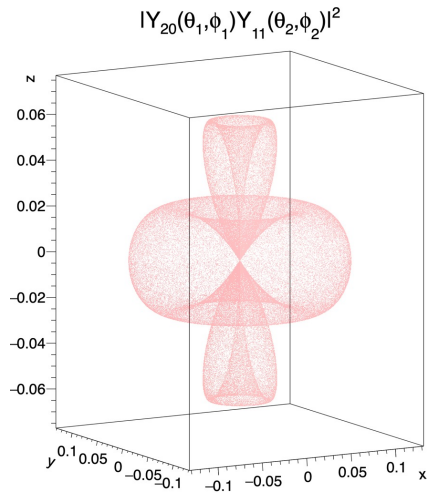


Figura 7: Gráfica del armónico esférico $Y_{20}(\theta_1, \phi_1) Y_{11}(\theta_2, \phi_2)$

4. Ruptura de la degeneración en la energía de los protones del átomo de hidrógeno acoplados a la molécula del agua

4.1. Ecuación de Schrödinger como función de un campo magnético.

En el capítulo anterior obtuvimos que el hamiltoniano del sistema de los hidrógenos cuando no actúa sobre el sistema un campo magnético, está dado por:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m_p} \hat{p}_1^2 + \frac{1}{2m_p} \hat{p}_2^2 + 2V(d) \quad (28)$$

y también encontramos que sus valores de energía son:

$$\mathbf{E}_0 = \frac{\hbar^2}{2md^2} [l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1)] + 2V \quad (29)$$

Cuando introducimos un campo magnético uniforme (\mathbf{B}) sobre nuestro sistema tenemos un potencial vectorial con valor $\vec{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} \vec{\mathbf{B}} \times \vec{\mathbf{r}}$, y el momento de las partículas varía y ahora pasa de $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{\mathbf{A}}$. Se puede ver que se cumple $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$

$$\nabla \times \mathbf{A} = \frac{1}{2} \nabla \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \frac{1}{2} [\mathbf{B}(\nabla \cdot \mathbf{r}) - (\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{r}] = \frac{1}{2} [3\mathbf{B} - \mathbf{B}] = \mathbf{B} \quad (30)$$

Aquí se usó:

$$\nabla \times (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = \mathbf{C}(\nabla \cdot \mathbf{D}) - (\mathbf{D} \cdot \nabla) \mathbf{C} + (\mathbf{D} \cdot \nabla) \mathbf{C} - (\mathbf{C} \cdot \nabla) \mathbf{D} \quad (31)$$

También $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \nabla \cdot \mathbf{r} = 3$ y $(\mathbf{B} \cdot \nabla) \mathbf{r} = \mathbf{B}$.

Ahora utilizamos el cambio en el momento cuando se aplica un campo magnético uniforme $\vec{p}_i \rightarrow \vec{p}_i - \frac{q}{c} \vec{\mathbf{A}}$ con $i = 1, 2$, el hamiltoniano de cada hidrógeno es:

$$\mathbf{H}_i = \frac{1}{2m_p} (\mathbf{p}_i - \frac{q}{c} \mathbf{A})^2 + V(d) \quad (32)$$

Y el hamiltoniano de todo el sistema es la suma de ambos hamiltonianos:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2 = \frac{1}{2m_p} (\mathbf{p}_1 - \frac{q}{c} \mathbf{A})^2 + \frac{1}{2m_p} (\mathbf{p}_2 - \frac{q}{c} \mathbf{A})^2 + 2V(d) \quad (33)$$

Ahora, desarrollando los términos entre paréntesis:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m_p} (\mathbf{p}_1 - \frac{q}{c} \mathbf{A})^2 + \frac{1}{2m_p} (\mathbf{p}_2 - \frac{q}{c} \mathbf{A})^2 + 2V(d) \quad (34a)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m_p}(\mathbf{p}_1^2 + \frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2 - \frac{q}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_1 - \frac{q}{c}\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{A}) + \frac{1}{2m_p}(\mathbf{p}_2^2 + \frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2 - \frac{q}{c}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_2 - \frac{q}{c}\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{A}) + 2V(d) \quad (34b)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m_p}[\mathbf{p}_1^2 + \frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2 - \frac{q}{c}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_1\cdot\mathbf{A})] + \frac{1}{2m_p}[\mathbf{p}_2^2 + \frac{q^2}{c^2}\mathbf{A}^2 - \frac{q}{c}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_2\cdot\mathbf{A})] + 2V(d) \quad (34c)$$

$$\mathbf{H} = [\frac{1}{2m_p}\mathbf{p}_1^2 + \frac{1}{2m_p}\mathbf{p}_2^2 + 2V(d)] - \frac{q}{2m_p c}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_1\cdot\mathbf{A}) - \frac{q}{2m_p c}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_2\cdot\mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m_p c^2}\mathbf{A}^2 + \frac{q^2}{2m_p c^2}\mathbf{A}^2 \quad (34d)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \frac{q}{2m_p c}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_1\cdot\mathbf{A}) - \frac{q}{2m_p c}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_2\cdot\mathbf{A}) + \frac{q^2}{m_p c^2}\mathbf{A}^2 \quad (34e)$$

Podemos ver que si no tenemos un campo magnético ($\mathbf{B} = 0$), obtenemos el hamiltoniano \mathbf{H}_0 que es el sistema que estudiamos en el capítulo anterior ($\mathbf{H} = \mathbf{H}_0$).

Queremos calcular los términos desconocidos en la ecuación (34e), es decir, los términos donde aparece \mathbf{A} , dejarlos en términos de \mathbf{B} .

Como tenemos un potencial de Coulomb, se cumple que para el potencial vectorial $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

También, recordando como actúa el operador momento en una función, $[\mathbf{p}, F(x)] = -i\hbar \frac{dF(x)}{dx}$, entonces, para este caso, recordando que A está en tres dimensiones:

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = -i\hbar \nabla \cdot \mathbf{A} \quad (35)$$

Como $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$

Obtenemos

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = 0$$

Donde usamos $[\mathbf{C}, \mathbf{D}] = \mathbf{CD} - \mathbf{DC} = 0$

Por lo tanto

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$$

Entonces \mathbf{p} y \mathbf{A} conmutan.

Ahora obtenemos el producto $\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_1$, sustituyendo $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r}$ y usando $\mathbf{L} = \mathbf{r}\times\mathbf{p}$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}_1) \cdot \mathbf{p}_1 = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{r}_1 \times \mathbf{p}_1) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_1} \quad (36)$$

Pues

$$(\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} = \mathbf{p} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = [\mathbf{p}, \mathbf{B}, \mathbf{r}] = [\mathbf{B}, \mathbf{r}, \mathbf{p}] = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p})$$

De manera análoga lo anterior se cumple para \mathbf{p}_2 , entonces tenemos

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{p}_2 = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot (\mathbf{r}_2 \times \mathbf{p}_2) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_2} \quad (37)$$

Ahora calculamos $\mathbf{A}^2 = (\frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2$:

$$\mathbf{A}^2 = (\frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r})^2 = \frac{1}{4}[(\mathbf{B} \times \mathbf{r})(\mathbf{B} \times \mathbf{r})] = \frac{1}{4}[\mathbf{B}^2\mathbf{r}^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2] \quad (38)$$

Aquí usamos la identidad:

$$(\mathbf{C} \times \mathbf{D}) \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{F}) = (\mathbf{C} \cdot \mathbf{E})(\mathbf{D} \cdot \mathbf{F}) - (\mathbf{C} \cdot \mathbf{F})(\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}) \quad (39)$$

Entonces podemos escribir el hamiltoniano de la siguiente manera:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \frac{q}{2m_p c} (\frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_1} + \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_1}) - \frac{q}{2m_p c} (\frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_2} + \frac{1}{2}\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_2}) + \frac{q^2}{4m_p c^2} [\mathbf{B}^2\mathbf{r}^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2] \quad (40a)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \frac{q}{2m_p c} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_1}) - \frac{q}{2m_p c} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_2}) + \frac{q^2}{4m_p c^2} [\mathbf{B}^2\mathbf{r}^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2] \quad (40b)$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \frac{\mu_N}{\hbar} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_1}) - \frac{\mu_N}{\hbar} (\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_2}) + \frac{e^2}{4m_p c^2} [\mathbf{B}^2\mathbf{r}^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2] \quad (40c)$$

Donde μ_N es el magnetón nuclear, y $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c}$.
La ecuación 40c igual se puede escribir como:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - (\mathbf{B} \cdot \mu_{L_1}) - (\mathbf{B} \cdot \mu_{L_2}) + \frac{e^2}{4m_p c^2} [\mathbf{B}^2\mathbf{r}^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2] \quad (41)$$

Donde $-\mu_L \cdot \mathbf{B}$ representa la energía resultante de la interacción del momento dipolar magnético orbital y el campo magnético, al no considerar el espín de las partículas nos es suficiente con estos términos.

4.2. Eigenergía de los protones del átomo de hidrógeno acoplados a la molécula del agua en presencia de un campo magnético

Finalmente el hamiltoniano queda de la siguiente manera:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \frac{\mu_N}{\hbar}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_1}) - \frac{\mu_N}{\hbar}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_2}) + \frac{e^2}{4m_p c^2}[\mathbf{B}^2 \mathbf{r}^2 - (\mathbf{B} \cdot \mathbf{r})^2] \quad (42)$$

El efecto zeeman consiste en el cambio en la energía del átomo de hidrógeno debido a la interacción de un campo magnético. Haciendo una analogía con esto, en nuestro sistema tenemos un efecto zeeman normal en la molécula del agua, donde no se considera el espín de las partículas.

Considerando un campo magnético uniforme en el eje z de la forma $\mathbf{B} = B\hat{z}$, donde B es la magnitud del campo magnético y \hat{z} es el vector unitario en la dirección z , tenemos:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \frac{\mu_N}{\hbar}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_1}) - \frac{\mu_N}{\hbar}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_2}) + \frac{e^2 B^2}{4m_p c^2}(x^2 + y^2) \quad (43)$$

La constante $\frac{e^2}{4m_p c^2}$ tiene una magnitud muy pequeña, pues $q = e$ es de orden muy pequeño, y c^2 es un de orden muy grande, por lo tanto podemos despreciar el término $\frac{q^2 B^2}{4m_p c^2}(x^2 + y^2)$. Entonces, el Hamiltoniano se reduce a:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \frac{\mu_N}{\hbar}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_1}) - \frac{\mu_N}{\hbar}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{L}_{z_2}) \quad (44)$$

Como \mathbf{H}_0 conmuta con $\hat{\mathbf{L}}_{z_i}$ siendo $i = 1, 2$, entonces también \mathbf{H} conmuta con $\hat{\mathbf{L}}_{z_i}$, por lo tanto comparten eigenfunciones, igual, recordando que en este problema la dependencia es angular, entonces $\psi_{l_1 l_2 m_1 m_2} = \Upsilon_{l_1 l_2 m_1 m_2}(\theta_1, \theta_2, \phi_1, \phi_2)$
Los eigenvalores del sistema son:

$$E_{l_1 l_2}^{m_1 m_2} = \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | \mathbf{H}_0 | l_1 l_2 m_1 m_2 \rangle - \frac{B\mu_N}{\hbar} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | \mathbf{L}_{z_1} | l_1 l_2 m_1 m_2 \rangle - \frac{B\mu_N}{\hbar} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | \mathbf{L}_{z_2} | l_1 l_2 m_1 m_2 \rangle \quad (45)$$

$$E_{l_1 l_2}^{m_1 m_2} = E_{l_1 l_2} - m_1 B\mu_N - m_2 B\mu_N \quad (46)$$

Pues los eigenvalores de \mathbf{L}_{z_i} son $\mathbf{L}_{z_i} \psi_{lm} = m_i \hbar \psi_{lm}$

Finalmente:

$$E_{l_1 l_2}^{m_1 m_2} = \frac{\hbar^2}{2md^2}[l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1)] + 2V - m_1 B\mu_N - m_2 B\mu_N \quad (47)$$

Recordemos la valores que toman los m_i , con $i = 1, 2$, $m_i = -l_i, -(l_i - 1), -(l_i - 2), \dots, 0, 1, 2, \dots, l_i - 2, l_i - 1, l_i$.

4.2.1. Resultados

En la tabla 2 se muestran los valores para la energía de los átomos de hidrógenos para distintos valores de l_1, l_2 , en este caso se fija l_1 y se "mueven" los valores de l_2 :

l_1/l_2	0	1	2	3
0	$2V(d)$	$\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$3\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$6\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$
1	$\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$2\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$4\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$7\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$
2	$3\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$4\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$6\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$9\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$
3	$6\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$7\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$9\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$12\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$

Cuadro 2: Tabla de valores $E_{l_1 l_2}$, donde se mantiene constante l_1 y se varía l_2

En la tabla 3 se muestran los valores para la energía de los átomos de hidrógenos para distintos valores de l_1, l_2 , en este caso se fija l_2 y se "mueven" los valores de l_1 :

l_2/l_1	0	1	2	3
0	$2V(d)$	$\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$3\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$6\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$
1	$\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$2\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$4\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$7\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$
2	$3\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$4\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$6\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$9\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$
3	$6\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$7\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$9\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$	$12\frac{\hbar^2}{d^2 m_p} + 2V(d)$

Cuadro 3: Tabla de valores $E_{l_1 l_2}$, donde se mantiene constante l_2 y se varía l_1

Separamos la energía con $B \neq 0$ de la siguiente manera $E_{l_1 l_2}^{m_1 m_2} = E_{l_1 l_2} + E^{m_1 m_2}$, con $E_{l_1 l_2}$ la energía cuando $B = 0$:

$$E_{l_1 l_2} = \frac{\hbar^2}{2m_p d^2} [l_1(l_1 + 1) + l_2(l_2 + 1)] + 2V \quad (48)$$

y

$$E^{m_1 m_2} = -m_1 B \mu_N - m_2 B \mu_N \quad (49)$$

En la tabla 4 se muestran los valores de energía cuando $B \neq 0$, para $l_1 = 1$ con $l_2 = 0$, y para $l_1 = 0$ con $l_2 = 1$, recordando los valores de $m_i = -j, -j + 1, \dots, 0, 1, 2, \dots, j$ con $i = 1, 2$.

m_2/m_1	0
-1	$E_{010, -1} = E_{01} + B\mu_N, E_{10, -1, 0} = E_{10} + B\mu_N$
0	$E_{0000} = 2V(d), E_{1000} = E_{10}, E_{0100} = E_{01}$
1	$E_{0101} = E_{01} - B\mu_N, E_{1010} = E_{10} - B\mu_N$

Cuadro 4: Tabla que representa los valores de $E_{l_1 l_2}^{m_1 m_2}$ para valores de $l_1 = 1$ y $l_2 = 1$, entonces $m_1 = -1, 0, 1$ y $m_2 = -1, 0, 1$

La tabla 5 muestra lo mismo que la tabla 4, pero combinando los valores de $l_1 = 1$ con $l_2 = 1$.

Las celdas de blanco son celdas cuyos valores son diferentes, mientras que las celdas que comparten el mismo color representan el mismo valor de energía.

m_2/m_1	-1	0	1
-1	$E_{11-1-1} = E_{11} + 2B\mu_N$	$E_{10,-1,0} = E_{10} + B\mu_N$	$E_{111-1} = E_{11}$
0	$E_{01,0,-1} = E_{01} + B\mu_N$	$E_{0000} = E_{00}$	$E_{010,-1} = E_{01} - B\mu_N$
1	$E_{111,-1} = E_{11}$	$E_{10,1,0} = E_{10} - B\mu_N$	$E_{1111} = E_{11} - 2B\mu_N$

Cuadro 5: Tabla que representa los valores de $E_{l_1 l_2}^{m_1 m_2}$ para valores de $l_1 = 1$ y $l_2 = 1$ simultáneamente, entonces $m_1 = -1, 0, 1$ y $m_2 = -1, 0, 1$

La tabla 6 muestra los valores de energía para los valores de $l_1 = 2$ con $l_2 = 0$, donde los valores de m_i con $i = 1, 2$ son $m_1 = -2, -1, 0, 1, 2$ y $m_2 = 0$.

m_2/m_1	$l_2 = 0$
-2	$E_{20,-2,0} = E_{20} + 2B\mu_N$
-1	$E_{20,-1,0} = E_{20} + B\mu_N$
0	$E_{2000} = E_{20}$
1	$E_{2010} = E_{20} - B\mu_N$
2	$E_{2020} = E_{20} - 2B\mu_N$

Cuadro 6: Tabla que representa algunos los valores de $E_{l_1 l_2}^{m_1 m_2}$ para valores de $l_1 = 2$ y $l_2 = 2$, entonces $m_1 = -2, -1, 0, 1, 2$ y $m_2 = -2, -1, 0, 1, 2$

En la Figura 8 se puede apreciar cómo sucede el rompimiento en la degeneración. Lo que representan los paréntesis son los números cuánticos (l_1, l_2) , y los paréntesis con cuatro valores representan (l_1, l_2, m_1, m_2) .

En la izquierda de muestran los valores que comparten la misma energía cuando $B = 0$, por ejemplo $E = 3\frac{\hbar^2}{m_2d^2} + 2V$, los que comparten esa energía son $(2, 0)$ y $(0, 2)$ cuando $B = 0$ y se rompe la degeneración en $E = 3\frac{\hbar^2}{m_2d^2} + 2V + 2B\mu_N$ para los valores de $(2, 0, -2, 0)$ y $(0, 2, 0, -2)$, cuando $B \neq 0$.

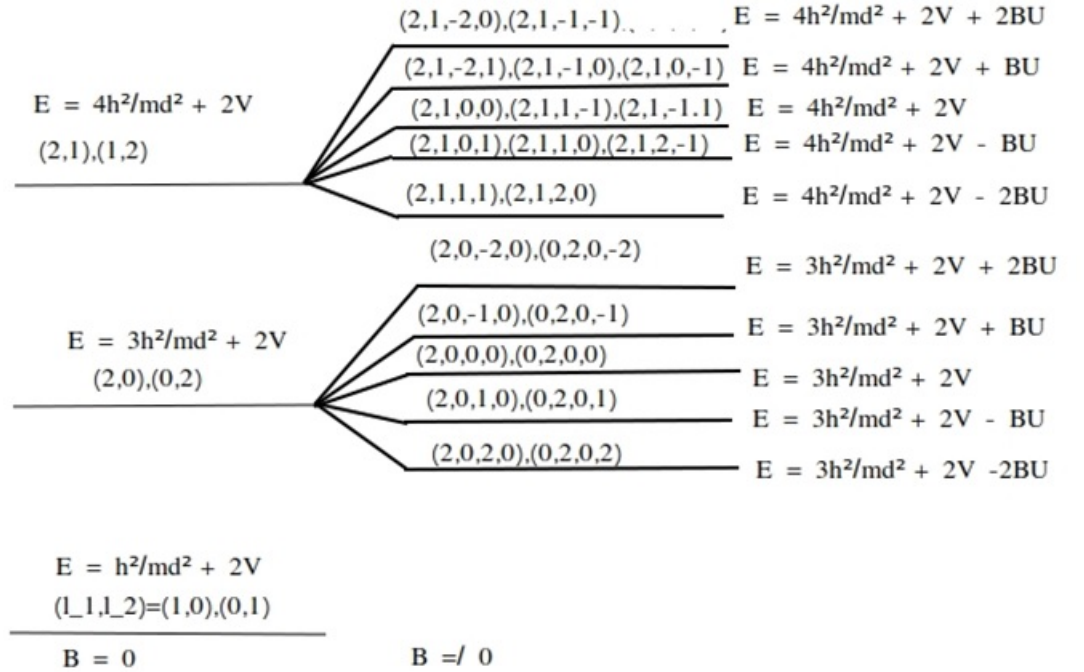


Figura 8: Representación gráfica de las degeneraciones aplicando un campo magnético uniforme, donde $U = \mu_N$.

4.3. Valores numéricos para un campo magnético de 5T

Para el caso de la resonancia magnética, el valor del campo magnético es de 5T, por ejemplo, en la tabla 7, se muestra el estado base, el primer y segundo estado excitado.

$E(B = 0)$	$E(B \neq 0)$
$E_{00} = -50.5430124 \text{ eV}$	$E_{0000} = -50.5430124 \text{ eV}$
$E_{01} = E_{10} = -50.36449814 \text{ eV}$ $E_{11} = -50.18598389 \text{ eV}$	$E_{010-1} = E_{10-10} = -50.36449798 \text{ eV}$ $E_{0100} = E_{1000} = E_{01} = E_{10}$ $E_{0101} = E_{1010} = -50.3644983 \text{ eV}$ $E_{1111} = -50.18598421 \text{ eV}$ $E_{11-11} = E_{111-1} = E_{11}$ $E_{11,-1,-1} = -50.18598357 \text{ eV}$
$E_{20} = E_{02} = -50.00746963 \text{ eV}$ $E_{21} = E_{12} = -49.82895537 \text{ eV}$ $E_{22} = -49.47192686 \text{ eV}$	$E_{020-2} = E_{20-20} = -50.00746931 \text{ eV}$ $E_{020-1} = E_{20-10} = -50.00746947 \text{ eV}$ $E_{2000} = E_{0200} = E_{20} = E_{02}$ $E_{2121} = -49.82895584 \text{ eV}$ $E_{212-1} = E_{12-12} = -49.82895553 \text{ eV}$ $E_{22,-22} = E_{222,-2} = E_{22}$ $E_{22-2,-2} = -49.47192623 \text{ eV}$ $E_{2222} = -49.47192749 \text{ eV}$

Cuadro 7: Tabla de valores numéricos de las energías de la molécula del agua.

Nivel de energía	Energía
1	-13.6 eV
2	-3.4 eV
3	-1.51 eV
4	-.85 eV
5	-.54 eV

Cuadro 8: Tabla de valores de energía del átomo de hidrógeno.

Comparando al átomo de hidrógeno, la energía del electrón se muestra en la tabla 8, se puede ver que los cambios en la energía del la molécula del agua varía poco si se compara al átomo de hidrógeno, esto es debido a que en nuestro sistema trabajamos con protones, cuya masa es mucho mayor a la del electrón, esto se nota con los valores de las constantes, como el magnetón nuclear.

5. Conclusiones

Tomando el modelo de la molécula del agua, en el cual los protones asociados al átomo de hidrógeno, solamente tienen movimiento angular, el potencial de interacción entre los protones y el campo electrostático del oxígeno doblemente cargado, es una constante. Debido a esta restricción pudimos resolver la ecuación de Schrödinger de manera analítica para obtener los eigenvalores y las eigenfunciones de dichos protones para el caso cuando no hay campo magnético externo. Pudimos observar una degeneración en la energía. Finalmente, obtuvimos que las eigenfunciones son productos de armónicos esféricos.

Al considerar la molécula del agua en presencia de un campo magnético constante, se puede observar un rompimiento en la degeneración de la energía, pues, en este caso el número cuántico azimutal (m_i , $i=1,2$) aparece para ambos protones. Las eigenfunciones para este problema no fueron encontradas debido a la complejidad de la ecuación de Schrödinger. Nos dimos cuenta que el efecto Zeeman, es un caso particular de un átomo hidrogenoide, el cual puede generalizarse al considerar N partículas interactuantes en presencia de un potencial central y campo magnético constante.

En este trabajo, los protones se consideraron distinguibles, entonces, como próximo estudio es considerar que los protones son indistinguibles y de esta forma las eigenfunciones estarían proporcionadas por una función de onda simétrica o antisimétrica, esto mediante la suma de momento angular. También el trabajo puede completarse al considerar el espín, de esta forma se podría tener un estudio más completo al considerar el momento angular total. Finalmente, se puede considerar el estudio con correcciones relativistas y acoplamiento espín-órbita para obtener un rompimiento en la actual degeneración.

Estudios en el proceso de obtener las imágenes por resonancia magnética, pueden realizarse para mejorar dicha atención al tomar en cuenta los niveles de energía de los protones

6. Bibliografía

[1] Franks, F., Water: A Matrix of Life, (2nd Ed., Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK (2000), cap. 2)

[2] Young, Hugh D. y Roger A. Freedman, Física Universitaria con física moderna volumen 2, (Capítulo 43)

[3] Kenneth S. Krane, Introductory Nuclear Physics (3rd ed.) (Wiley, 1987, cap.3.)

[4] F. Ballester y J. M. Udías, “Física Nuclear y Medicina”, Rev. Esp. Fís. 22(1), 29-36 (2008). (Usado en la parte donde se habla de $I = 0$)

[5] M. J. Duer, Solid State NMR Spectroscopy: Principles and Applications (1.a ed.) (Wiley-Blackwell, 2001, cap. 1)

[6] A. Zangwill, Modern Electrodynamics (Cambridge University Press., 2012, cap .14.)

[7] WILLIS E. LAMB, JR. Fine Structure of the Hydrogen Atom. * III (Physical Review, volume 85 number 2, 1951)

[8] Ran Cai, Hongwei Yang *, Jinsong He, Wanpeng Zhu, The effects of magnetic fields on water molecular hydrogen bonds (Journal of Molecular Structure 938 , 2009)

[9] Toshiaki Osuga, and Hozumi Tatsuoka, Magnetic-field transfer of water molecules (JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 106, 2012)

[10] Jonathan Tennyson, Nikolai F. Zobov, Ross Williamson, Oleg L Polyanisky, Peter F. Bernath, Energy Levels of the Water Molecule (Journal of Physical and Chemical Reference Data, 2001)

[11] George B. Arfken, Hans J. Weber and Frank E. Harris, Mathematical Methods for Physicists, 7th edition (Academic Press, Elsevier, Inc., Waltham, MA, 2013, cap 12)