Función de onda de protones en la molécula del agua: Rompimiento de la degeneración aplicado a la interacción de un campo magnético en una resonancia magnética.

Heber Zepeda-Ferández

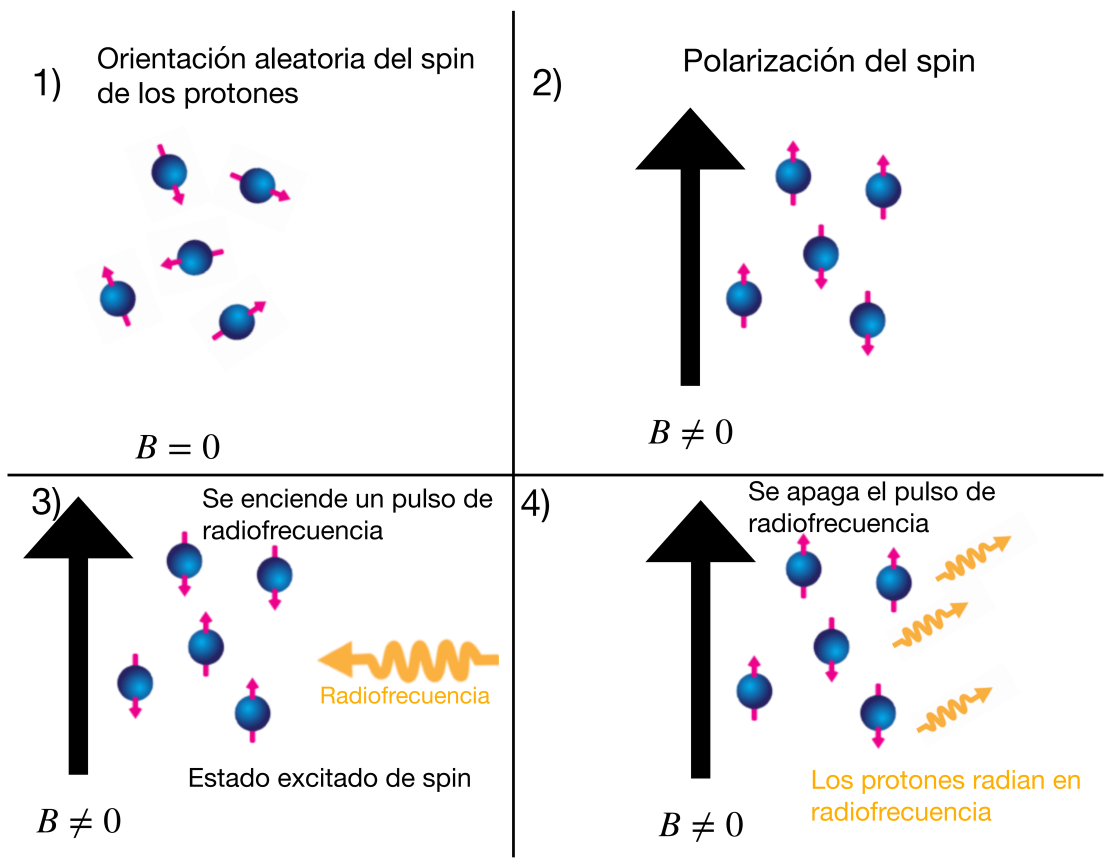
hzepeda@fcfm.buap.mx

Cátedra CONACyT, FCFM-BUAP

Introduction

En este trabajo modelamos la molécula del agua compuesta por los dos protones y el átomo de oxígeno doblemente cargado negativamente y sin estructura. Obtuvimos la función de onda de manera analítica así como la energía, que se encuentra degenerada. En seguida, mostramos el rompimiento de la degeneración en niveles de energía al estudiar la interacción de la molécula del agua con un campo magnético constante y externo. Finalmente, mostramos los resultados numéricamente para un campo externo comúnmente usado en dispositivo de Imagen por Resonancia Magnética (MRI).

Consideraciones Físicas empleadas en un MRI:



Modelo de la molécula del agua

Hamiltoniano

- Dos núcleos de átomos de hidrógeno.
- Átomo de oxígeno doblemente cargado negativamente y sin estructura.

La distancia entre los protones ($d_p \sim 151.05$ pm) y el oxíneo ($d_o \sim 95.60$ pm) es constante [1]. Resultando como potencial:

$$\hat{V}(d_o, d_p) = \hat{V}_1(d_o, d_p) + \hat{V}_2(d_o, d_p) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{e^2}{d_p} - \frac{4e^2}{d_o}\right).$$

Por lo tanto el Hamiltoniano es:

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

Donde:

$$\hat{L}_i^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta_i}\frac{\partial}{\partial\theta_i}\left(\sin\theta_i\frac{\partial}{\partial\theta_i}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta_i}\frac{\partial^2}{\partial\phi_i^2}\right], \quad i = 1, 2.$$

Función de onda de la molécula de agua

Al usar separación de variables en Eq. (1) se tiene:

$$\left[\frac{\hat{L}_1^2}{2md_o^2} + \hat{V}_1\right]\psi_1(\theta_1, \phi_1) = \epsilon_1\psi_1(\theta_1, \phi_1) \qquad (1)$$

$$\left[\frac{\hat{L}_2^2}{2md_o^2} + \hat{V}_2\right]\psi_2(\theta_2, \phi_2) = \epsilon_2\psi_2(\theta_2, \phi_2), \qquad (2)$$

Siendo la energía total del sistema $E = \epsilon_1 + \epsilon_2$. Las soluciones de las Eqs. (1) y (2) son los polinomios asociados de Legendre:

$$\begin{aligned}\psi_1(\theta_1, \phi_1) =& Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \phi_1)\\ =& (-1)^{m_1}\sqrt{\left(\frac{2l_1+1}{4\pi}\right)\frac{(l_1-m_1)!}{(l_1+m_1)!}}P_{l_1}^{m_1}(\cos\theta_1).\\ & (\text{for } i = 1, 2).\\ \psi_2(\theta_2, \phi_2) =& Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \phi_2)\\ =& (-1)^{m_2}\sqrt{\left(\frac{2l_2+1}{4\pi}\right)\frac{(l_2-m_1)!}{(l_2+m_2)!}}P_{l_2}^{m_2}(\cos\theta_2),\end{aligned}$$

Por lo cual, la función de onda es:

$$\Psi_{l_1,m_1;l_2,m_2}(\theta_1, \phi_1; \theta_2\phi_2) = Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \phi_1)Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \phi_2).$$

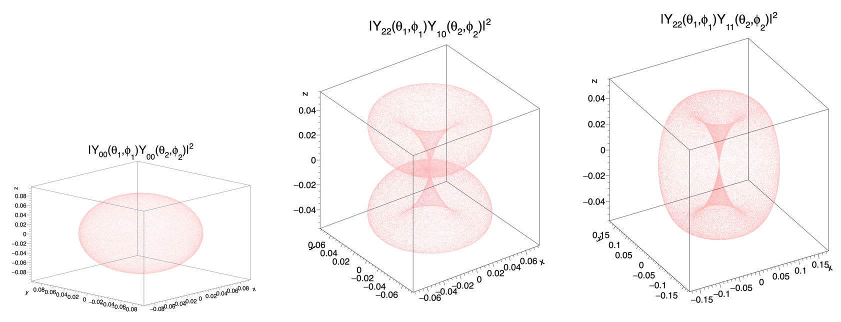
Con $l_i = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$ y para cada l_i se tiene que $m_i = -l_i, -l_i+1, \ldots, l_i-1, l_i$, para $i = 1, 2$.

La energía se encuentra dada por:

$$E_{l_1,l_2} = \frac{\hbar^2}{2md_o^2}l_1(l_1+1) + \frac{\hbar^2}{2md_o^2}l_2(l_2+1) + V. \qquad (3)$$

La degeneración es $(2l_1+1) \times (2l_2+1)$.

Ejemplos de función de onda



Función de onda considerando partículas idénticas

onsiderando que los protones son idénticos, es necesario antisimetrizar la función de onda espacial

$$\Psi_{l_1,m_1;l_2,m_2}(\theta_1, \phi_1; \theta_2\phi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \phi_1)Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \phi_2) \pm Y_{l_2 m_2}(\theta_1, \phi_1)Y_{l_1 m_1}(\theta_2, \phi_2)\Big].$$

Debido a que es un sistema de fermiones la función de onda debe ser antisimétrica. Por lo tanto si los protones están en un singulete se toma el signo $+$ y si es un singulete se toma el signo $-$.

Interacción de la molécula de agua con un campo magnético

Al considerar un campo magético $\mathbf{B}$ se tiene:

- $\mathbf{p} \Rightarrow \mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}$
- $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$.

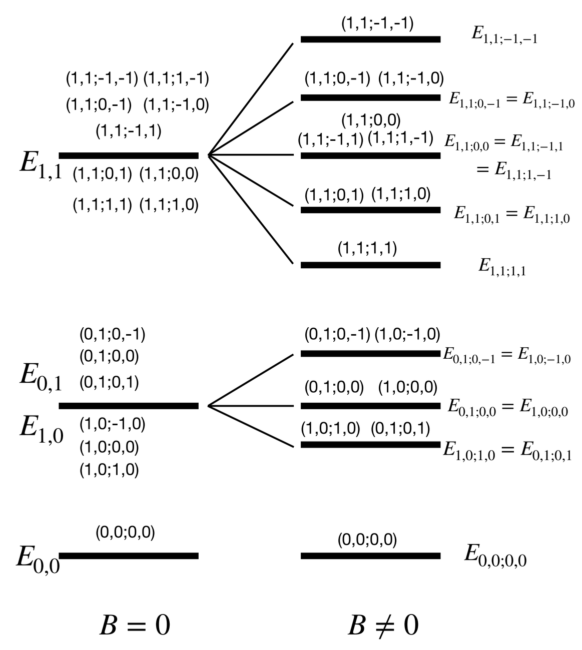
Y considerando:

- $\nabla \cdot \hat{A} = 0 \Rightarrow \vec{p}_i \cdot \hat{A} - \hat{A} \cdot \hat{p}_i = 0$.
- $\mathbf{B} = B\hat{z}$

Se tiene:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{q}{2mc}(B \cdot \hat{L}_{z1}) - \frac{q}{2mc}(B \cdot \hat{L}_{z2}) + \frac{q^2B^2}{4mc^2}(x_1^2 + y_1^2) + \frac{q^2B^2}{4mc^2}(x_2^2 + y_2^2)$$

Ejemplo del rompimiento de la degeneración hasta el segundo excitado



Energía de la moécula del agua en presencia de un campo magético

Para encontrar el valor de la energía se tiene que $E = <\hat{H}>$, es decir, obtener el valor de espectación de Eq. (3). Como $\hat{H}$, $\hat{H}_0$, $\hat{L}_{z_1}$ y $\hat{L}_{z_2}$ conmutan, se toma la base $|l_1 m_1 l_2 m_2>= \Psi_{l_1,m_1;l_2,m_2}$. Se encuentra que:

$$\begin{aligned}E_{l_1,m_1;l_2,m_2} =& \frac{\hbar^2}{2md^2}[l_1(l_1+1) + l_2(l_2+1)] + V\\ &- m_1\hbar\frac{eB}{2mc} - m_2\hbar\frac{eB}{2mc}\\ &+ \frac{q^2B^2}{4mc^2}d_o^2\left[1 - \frac{2}{3}\left[\frac{2}{\sqrt{15}}\begin{pmatrix} l_1 & l_1 & 2\\ m_1 & m_1 & 0\end{pmatrix} + 1\right]\right]\\ &+ \frac{q^2B^2}{4mc^2}d_o^2\left[1 - \frac{2}{3}\left[\frac{2}{\sqrt{15}}\begin{pmatrix} l_2 & l_2 & 2\\ m_2 & m_2 & 0\end{pmatrix} + 1\right]\right]\end{aligned} \qquad (4)$$

Valores numéricos de la energía

Los términos $\frac{q^2B^2}{4mc^2}d_o^2$ no son tomados en cuenta, pues son del orden de 10^{-15} [2]. Al considerar B=7 T se tiene los resultados :

Estado	$(l_1, l_2; m_1, m_2)$	Energía (eV))
0	(0,0;0,0)	-23.4
1	(0,1;0,-1)=(1,0;-1,0)	-23.39545379
	(0,1;0,0)=(0,1;0,0)	-23.397727
	(1,0:1,0)=(0,1;0,1)	-23.39545421
2	(1,1;-1,-1)	-23.39090758
	(1,1;0,-1)=(1,1;-1,0)	-23.39090779
	(1,1;0,0)=(1,1;-1,1)=(1,1;1,-1)	-23.390908
	(1,1;0,1)=(1,1;1,0)	-23.39090821
	(1,1;1,1)	-23.39090842

Conclusiones

- Se modeló la molécula del agua mediante tres partículas: dos protones y el oxígeno doblemente cargado negativamente y sin estructura.
- Se encontró de manera analítica la función de onda y la energía de dicho modelo.
- En presencia de un campo magnético se rompe la degeneración en m_i.
- Al considerar el spin se romperá la degeneración en todos los número cuánticos.

Para resolver dudas, por favor visitar la liga:
https://cern.zoom.us/j/94326613113?pwd=Zi9HTXZc

References

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

[2] C. H. Zepeda-Fernández *a*rXiv:2109.14531 [physics.med-ph] https://arxiv.org/pdf/2109.14531.pdf.

XII CONTACS & II CONITACS, 9-11 junio 2022, México, Puebla