



**BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE
PUEBLA**

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

**FUNCIÓN DE ONDA Y NIVELES DE ENERGÍA DE LA MOLÉCULA
DE AGUA EN CAMPO MAGNÉTICO VARIABLE**

Tesis presentada al

POSGRADO EN FÍSICA APLICADA

como requisito parcial para la obtención del grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

por

Dania Vanessa Ruiz Arce

Asesorada por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Dr. Eduardo Moreno Barbosa

Puebla Pue.
Diciembre de 2024



**BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE
PUEBLA**

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

**FUNCIÓN DE ONDA Y NIVELES DE ENERGÍA DE LA MOLÉCULA
DE AGUA EN CAMPO MAGNÉTICO VARIABLE**

Tesis presentada al

POSGRADO EN FÍSICA APLICADA

como requisito parcial para la obtención del grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

por

Dania Vanessa Ruiz Arce

Asesorada por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Dr. Eduardo Moreno Barbosa

Puebla Pue.
Diciembre de 2024

Título: Función de onda y niveles de energía de la molécula de agua en campo magnético variable

Estudiante: Dania Vanessa Ruiz Arce

COMITÉ

Dr. Javier Miguel Hernández López
Presidente

Dr. Jorge Velázquez Castro
Secretario

Dr. Héctor Novales Sánchez
Vocal

Dr. Lucio Fidel Rebolledo Herrera
Suplente

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández
Asesor

Dr. Eduardo Moreno Barbosa
Asesor

Índice general

1. Marco teórico	1
1.1. Molécula de agua	1
1.2. Componentes de un resonador magnético	2
1.2.1. Superconductor magnético	3
1.2.2. Gradientes de campo magnético	5
1.2.3. Pulsos de radiofrecuencia	6
1.3. Tiempos de relajación.	6
1.3.1. Tiempo de relajación T_1	7
1.3.2. Tiempo de relajación T_2	7
1.4. Obtención de imágenes	8
1.5. Herramientas y conceptos teóricos	8
1.5.1. Estructura fina.	9
1.5.2. Efecto Zeeman anómalo.	12
2. Metodología	13
2.1. Modelo de la molécula de agua	13
2.2. Niveles de energía de la molécula de agua.	14
2.2.1. Niveles de energía: Sin fenómenos.	14
2.2.2. Niveles de energía: Estructura fina.	14
2.2.3. Niveles de energía: Campo magnético constante.	15
2.2.4. Niveles de energía: Campo magnético variable.	17
2.2.5. Niveles de energía: Pulsos de radiofrecuencia	19
2.3. Frecuencias necesarias para que surjan transiciones de estado	20
3. Resultados	21
3.1. Resultados de los niveles de energía: Sin fenómenos.	21
3.2. Resultados de los niveles de energía: Estructura fina.	22
3.3. Resultados de los niveles de energía: Campo magnético constante.	23
3.4. Resultados de los niveles de energía: Campo magnético variable.	24
3.5. Resultados de los niveles de energía: Pulsos de radiofrecuencia.	25
3.6. Niveles de energía de la molécula de agua al interactuar con un MRI.	25
3.7. Diferencia de energía entre estados de transición	26
3.8. Error porcentual	28
4. Conclusiones y discusiones	29

A. Momento angular total	31
B. Tablas correspondientes a 1.5 T	33
C. Tablas correspondientes a 3 T	37
D. Tablas correspondientes a 7 T	41
Bibliografía	45

Agradecimientos

Agradezco a CONAHCYT por el apoyo brindado el cual me permitió concluir esta etapa.

A mis asesores, Dr. Heber Zepeda y Dr. Eduardo Moreno por la paciencia y conocimientos otorgados durante todo el trayecto.

A mi comité tutorial, Dr. Javier Hernández, Dr. Héctor Novales y Dr. Jorge Velázquez por la orientación en el desarrollo de mi trabajo.

Agradezco a mi familia, a mi papá Martin, a mi mamá Yesica y a mis hermanitos Amairany, Eduardo y Gael por recargarme de energía en vacaciones y echarme porras a la distancia, son mi principal motivación, los amo muchísimo.

A a mis gatitas de Schrodinger (mis amigas de toda la vida) Abril, Amy y Bbq por estar y no estar a la vez (las pienso siempre).

A Michelle, venía incluida con el cari pero se convirtió en mi compañera y apoyo, gracias por los detalles que me animaban y por convertir el depa en un hogar temporal.

A Claudia y José Alberto por el apoyo a la distancia, por hacer la carga más liviana.

A los amigos que hice en el camino (que no se como pero hice un buen); especialmente a Liz, Yuri, Dani, Ale, Rebe, Jorge, Braian y Alexis, gracias por hacerme sentir en casa, creo que no son conscientes de lo feliz que me hicieron en este proceso y lo mucho que me ayudaron, gracias por las pijamadas de tareas, por todas las risas, por los pueblitos que me llevaron a conocer, por las borracheras (papis si leen esto es bromi), por abrirme las puertas de sus casas y de sus corazones, los llevo en el mio por siempre (tienen que visitarnos o no los perdonaré jamás).

Al cari, mi acompañante de aventuras y vida, no me imagino esta etapa sin el cari en ella, mis logros son tuyos, no hay agua sin hierro (aunque no este científicamente probado), te amo foreva y vamos por lo que sigue.

Resumen

En la actualidad, los médicos recurren a distintos aparatos que proporcionan imágenes de diferentes tejidos para generar diagnósticos, uno de ellos es el aparato de resonancia magnética (MRI por sus siglas en inglés), el cuál obtiene imágenes por medio de la interacción de los campos magnéticos que genera con los protones de los hidrógenos de las moléculas de agua que componen al cuerpo humano. Por medio de analogías de la estructura fina y el efecto Zeeman anómalo se logró calcular los niveles de energía y la función de onda de la molécula de agua al interaccionar con los campos magnéticos generados por las tres componentes principales de un MRI, el análisis se realizó por medio de un modelo simplificado de la molécula de agua, esto con la finalidad de calcular las diferencias de energía entre los posibles estados de transición de los protones de los hidrógenos de la molécula de agua al estar en contacto con campos magnéticos, de esa forma se logró obtener la frecuencia necesaria para que dichas transiciones fueran posibles.

Las frecuencias calculadas fueron comparadas con frecuencias utilizadas en aparatos de resonancia magnética, específicamente aparatos que trabajan con campos magnéticos constantes de 1.5, 3 y 7 T; los valores fueron similares, concluyendo en que el modelo simplificado de la molécula de agua que se utilizó es apropiado para distintas aplicaciones en contextos similares.

Capítulo 1

Marco teórico

En la actualidad, para realizar diagnósticos médicos los especialistas utilizan de apoyo imágenes obtenidas por medio de distintos aparatos, uno de ellos son los aparatos de resonancia magnética (o MRI por sus siglas en inglés) [1].

Un MRI es un aparato que obtiene imágenes de diferentes tejidos por medio de la interacción de los campos magnéticos que generan, con las moléculas de agua que se encuentran dentro del cuerpo humano, específicamente con los protones de los hidrógenos de las moléculas [2]. Una de las razones por las que el MRI trabaja con las moléculas de agua es debido a que es la molécula que más predomina en el cuerpo humano, pues en la adultez se compone en un 60 % de ella [3].

Es de interés profundizar en la interacción entre los campos magnéticos generados por un MRI y los protones de los hidrógenos de la molécula de agua para analizar los resultados y poder aplicarlos, por ejemplo, a la mejora de imágenes obtenidas por medio de resonadores magnéticos. Para ello, se estudió la estructura y composición de la molécula de agua.

1.1. Molécula de agua

La molécula de agua está compuesta por dos átomos de hidrógeno y un átomo de oxígeno. Dicha molécula se puede representar por medio de un tetraedro (pirámide triangular) [4], donde el oxígeno se posiciona en el centro de él y los hidrógenos en dos de las esquinas de la pirámide, tal como se muestra en la Figura 1.1. Los átomos de hidrógeno se encuentran unidos al oxígeno por medio de un enlace covalente [5], debido a que los hidrógenos le comparten su único electrón al oxígeno y el oxígeno les comparte un electrón de los seis que tiene en su último orbital a cada uno de los hidrógenos, por lo tanto, en el espacio que existe entre el oxígeno y los hidrógenos de la Figura 1.1 hay dos electrones compartidos por lado, además, al átomo de oxígeno le quedan cuatro electrones sin compartir en su últimos orbital los cuales podemos observar situados en las otras dos esquinas del tetraedro.

Para que exista la unión entre átomo de oxígeno y átomo de hidrógeno cada uno comparte un electrón como se mencionó anteriormente, sin embargo, no lo hacen equitativamente pues existe mayor fuerza de atracción por parte del oxígeno, de esa forma se puede considerar que el protón

del núcleo del átomo de hidrógeno queda "descubierto", ocasionando que se encuentre una mayor densidad de carga negativa del lado del oxígeno y una mayor densidad de carga positiva del lado del hidrógeno, por lo tanto, se le denomina a la molécula de agua polar.

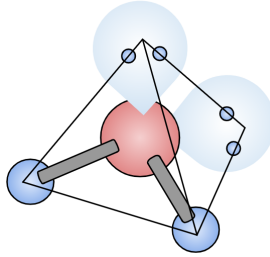


Figura 1.1: Modelo clásico de la molécula de agua representado por un tetraedro.

Las características antes mencionadas de la molécula de agua permiten utilizar para el presente trabajo un modelo simplificado de la molécula de agua, el cual se explica con mayor detalle en la sección 2.1 del capítulo 2, pero primero se explicará en que consiste un aparato de resonancia magnética y cuáles son sus componentes.

1.2. Componentes de un resonador magnético

En el año de 1973 se obtuvieron las primeras imágenes mediante resonancia magnética por Paul Lauterbur, quien junto con Peter Mansfield ganaron el premio Nobel de medicina en el 2003 por sus contribuciones y desarrollo del MRI [6].

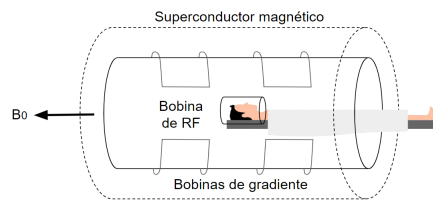


Figura 1.2: Esquema de las componentes de un MRI.

Es de interés para este trabajo conocer el origen y la forma de los campos magnéticos que produce un MRI; dichos campos magnéticos son creados por las tres componentes principales que lo componen, las cuáles son las siguientes:

- Un superconductor magnético.
- Un conjunto de tres bobinas de gradiente de campo magnético.
- Un receptor y transmisor de radiofrecuencia.

Se profundizará en cada una de las componentes antes enlistadas, las cuales se muestran esquemáticamente en la Figura 1.2.

1.2.1. Superconductor magnético

El superconductor magnético es la componente que genera el campo magnético con mayor intensidad dentro de un MRI, dicho campo magnético es constante, lo que quiere decir que no tiene ninguna variación en cuanto a la dirección y magnitud de este. La expresión que describe al campo magnético generado por un superconductor magnético está dada por 1.1.

$$\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{k}}, \quad (1.1)$$

donde B_0 es la magnitud del campo magnético constante.

El campo magnético producido por el superconductor magnético se propaga desde -Z hacia +Z, donde la dirección Z es la sección axial del cilindro con el cual se representa a un MRI como se puede observar en la Figura 1.2. La magnitud de B_0 varía, puede ser de 1.5 T, 3 T, 7 T, etc [7], [8], B_0 interacciona con los protones de los hidrógenos de las moléculas de agua que componen el cuerpo humano.

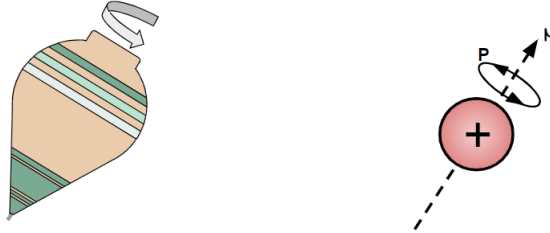


Figura 1.3: (Izquierda) Ejemplo del movimiento de un protón al encontrarse precesando. (Derecha) Esquema del momento magnético y angular de un protón.

Los protones son partículas cargadas positivamente [9], las cuales poseen un valor de momento angular (P) y un valor de momento magnético (μ), representados como muestra en la Figura 1.3. El momento angular indica cuanto rota la partícula alrededor de un punto en específico [10] y el momento magnético es una propiedad intrínseca al igual que el espín [11], la cual es propia de partículas cargadas. Dichos valores son dependientes entre sí y están descritos por la siguiente expresión:

$$|\mu| = \gamma |P| \quad (1.2)$$

Donde γ es la constante de proporcionalidad de $|\mu|$ y $|P|$, denominada constante giromagnética y tiene un valor específico para cada partícula.

Partículas cargadas como lo son los protones, al no encontrarse en contacto con algún campo magnético, precesan debido al momento angular que poseen (como se puede observar en la Figura 1.3) a una frecuencia y dirección de momento magnético aleatoria, lo que provoca que el cuerpo humano tenga una magnetización igual a cero, sin embargo, al estar interaccionando con uno, el

momento magnético de los protones se alinea con la dirección del campo magnético con el que se encuentran en contacto, tomando uno de los dos posibles estados, ya sea a favor o en contra de la dirección del campo magnético. Si el protón se encuentra en una dirección como la que se muestra en la parte derecha de la Figura 1.4 al estar interactuando con un campo magnético externo se dice que tomó una dirección paralela, si la dirección del protón es similar a la de la parte izquierda de la Figura 1.4 entonces su dirección es antiparalela respecto al campo magnético con el que está interactuando.

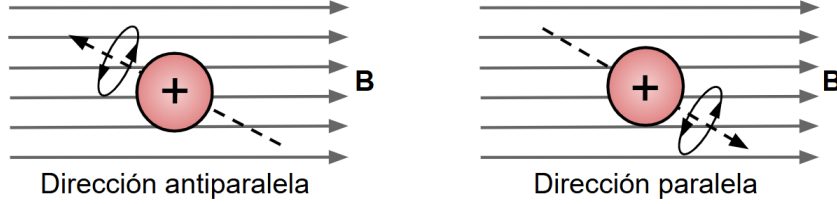


Figura 1.4: (Izquierda) Dirección que puede tomar un protón al encontrarse en contacto con un campo magnético denominada dirección antiparalela. (Derecha) Dirección que puede tomar un protón al encontrarse en contacto con un campo magnético denominada dirección paralela.

La mayoría de los protones toman la dirección paralela debido a que es la que se encuentra a favor del campo magnético, por lo tanto, se necesita menos energía para permanecer en ella, lo que ocasiona que la magnetización total del cuerpo humano al encontrarse dentro de un campo magnético no sea cero. Se considera que la dirección de la magnetización total del cuerpo humano es la misma que la dirección del campo magnético con el que está interactuando, debido a que la gran mayoría de los protones se encuentran en la dirección paralela, por lo tanto, los protones que se encuentran en la dirección contraria son despreciables.

La diferencia de energía entre los estados que puede tomar el protón al interactuar con un campo magnético externo (dirección paralela o antiparalela) está dada por la ecuación que se muestra a continuación:

$$\Delta E = \frac{\gamma h B_0}{2\pi} \quad (1.3)$$

Donde h es la constante de Planck.

Otra propiedad del protón que cambia al encontrarse interactuando con un campo magnético externo es la frecuencia a la que precesa, pues se vuelve dependiente de la magnitud del campo magnético con el cual está en contacto, dicha frecuencia es denominada "Frecuencia de Larmor", y está dada por la siguiente expresión:

$$\omega = \gamma B_0 \quad (1.4)$$

Por lo tanto, una vez que los protones se encuentran interactuando con un campo magnético se considera que se encuentran en coherencia de fase, sin embargo, no todos los protones están precesando a la misma frecuencia exactamente, aunque para fines prácticos se estima de esa forma, ya que existe una inclinación hacia esa frecuencia; lo mismo sucede con la dirección en la que se encuentran precesando.

1.2.2. Gradientes de campo magnético

Otra de las componentes que genera un campo magnético que interfiere con las energías de los protones de los hidrógenos de las moléculas de agua son las bobinas de gradiente.

Un MRI está compuesto por tres bobinas independientes que generan gradientes de campo magnético lineales, lo que ocasiona que el campo magnético que se encuentra en el interior del MRI ya no sea constante, o sea que tendrá variaciones espaciales, pues el campo ya no solo provendrá del superconductor magnético.

Es necesario que un aparato de resonancia magnética pueda obtener imágenes de un tejido en específico, pero eso no se puede lograr si no existe una distinción entre los protones que conforman los distintos tejidos, ese es el objetivo de las bobinas de gradiente, generar variaciones en el campo magnético interno de un MRI para que los protones precesen a diferentes frecuencias, por lo tanto, su frecuencia de resonancia será distinta y de esa forma se pueden distinguir.

Como se mencionó anteriormente, las bobinas generan gradientes que provocan variaciones en el espacio del campo magnético de forma lineal, dichos gradientes se expresan a continuación:

$$\frac{\partial B_z}{\partial z} = G_z, \quad \frac{\partial B_x}{\partial x} = G_x, \quad \frac{\partial B_y}{\partial y} = G_y \quad (1.5)$$

Donde G_x , G_y y G_z son los gradientes en su respectiva dirección con unidades de T/m.

Las bobinas de gradiente no generan variaciones de campo magnético en $x = y = z = 0$, por lo tanto, el campo magnético en esa posición sigue siendo simplemente B_0 proveniente del superconductor magnético, sin embargo, conforme se aleja del origen ya comienzan a surgir variaciones lineales de campo magnético, lo anterior se puede observar en la Figura 1.5 para el caso específico de la dirección z .

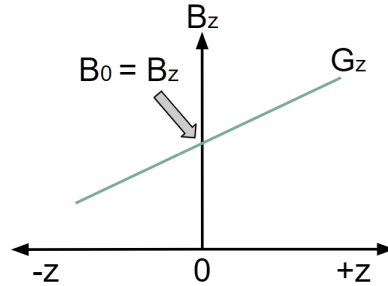


Figura 1.5: Gráfica del campo magnético en z respecto a la posición tomando a consideración el gradiente en z .

Vemos que en $z = 0$ el campo magnético es B_0 , pero para z mayores, el campo comienza a aumentar linealmente y para z menores comienza a decrecer respecto a B_0 .

Los protones de los hidrógenos de las moléculas de agua experimentarán un campo magnético dado por la expresión 1.6 una vez que se encuentren interaccionando con el campo magnético

generado por las bobinas de gradiente.

$$\mathbf{B} = G_x \hat{\mathbf{i}} + G_y \hat{\mathbf{j}} + G_z \hat{\mathbf{k}} \quad (1.6)$$

1.2.3. Pulsos de radiofrecuencia

Una vez que los protones de los hidrógenos de la molécula de agua se encuentren interaccionando con los campos magnéticos generados por el superconductor y las bobinas de gradiente de un MRI, el emisor del aparato producirá pulsos de radiofrecuencia que serán absorbidos por ciertos protones.

El objetivo de los pulsos de radiofrecuencia es hacer que los protones que se encuentren en el tejido del que se desea generar la imagen absorban la energía proveniente de los pulsos, posteriormente dejan de ser emitidos ocasionando que el sistema se relaje y regrese a su estado inicial, los protones mientras realizan esa acción emiten la energía antes absorbida, dicha energía es detectada por las antenas del MRI para ser procesada y convertida en imagen.

Cuando los protones absorben la energía de los pulsos de radiofrecuencia ocurrirá una transición entre sus respectivos estados, la energía será absorbida por los protones que se encuentre en la estado antiparalelo antes descrito, ya que como se mencionó, es el estado de menor energía, de esa forma transicionará al paralelo o de mayor energía, por lo tanto, la energía que necesitan esos pulsos para poder ser absorbidos está dada por la diferencia de energía entre estados, tal como se muestra en la ecuación 1.3, lo que significa que la frecuencia de los pulsos está dada por 1.4.

Los pulsos de radiofrecuencia son cortos y el campo magnético (B_1) generado por ellos es perpendicular a B_0 . Suponiendo que la magnetización total del sistema está en la dirección z, tal como se muestra en la Figura 1.6 y el campo magnético de los pulsos de radiofrecuencia tiene como dirección x, entonces se generará una torca que ocasionará que la magnetización total preces en el plano x-y, donde todos los vectores tendrán la misma fase y frecuencia.

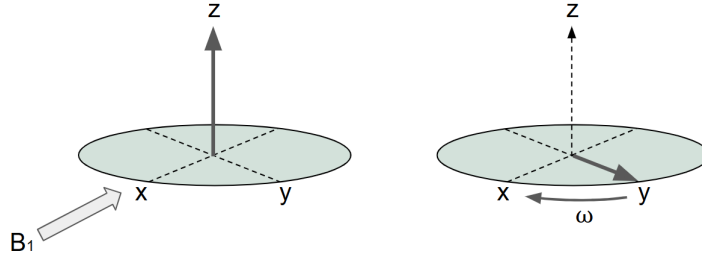


Figura 1.6: Esquema de lo que ocasiona un pulso de radiofrecuencia en la magnetización total del sistema.

1.3. Tiempos de relajación.

Cuando los pulsos de radiofrecuencia dejan de ser emitidos por el aparato de resonancia, el sistema se relajará y regresará a su estado inicial, tal como se explicó con anterioridad. El que el sistema regrese a su estado inicial implica que los espines de los protones se desfasen y que

la dirección de magnetización regrese a su estado inicial, estos procesos se realizan en tiempos determinados llamados tiempos de relajación.

En esta sección se hablará sobre los dos tiempos de relajación principales denominados T_1 y T_2 .

1.3.1. Tiempo de relajación T_1 .

El estado de equilibrio de la magnetización total cuando aún no son emitidos los pulsos de radiofrecuencia es la dirección de la componente M_z o llamado también M_0 . Tomando el ejemplo de la Figura 1.6 donde el sistema absorbe un pulso de radiofrecuencia y la magnetización cambia de posición, se le llama tiempo de relajación T_1 al tiempo que tarda el sistema en regresar de ese estado al estado de equilibrio, tal como se observa en la Figura 1.7. El tiempo de relajación T_1 o también denominado tiempo de relajación longitudinal o relajación spin-lattice (aunque este último a generado controversia respecto a si debería utilizarse o no [12]), solo depende de la componente z de la magnetización total (M_z).

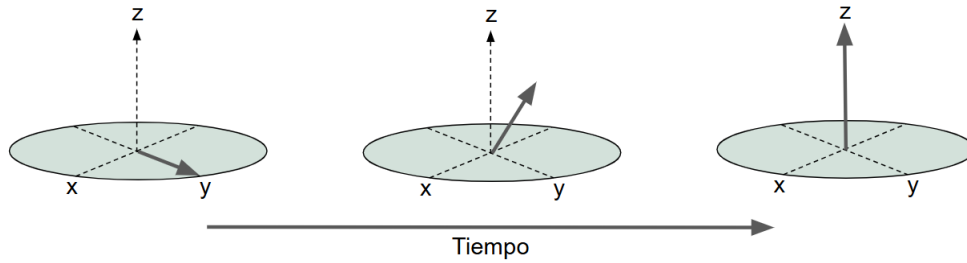


Figura 1.7: Esquema de la magnetización al regresar a su estado de equilibrio.

1.3.2. Tiempo de relajación T_2 .

Por otro lado, el tiempo de relajación T_2 , también llamado tiempo de relajación transversal o relajación spin-spin (considerando que spin-spin tiene el mismo problema que el nombre spin-lattice) es el tiempo que tarda el sistema en desfasarse, este tiempo de relajación depende de las otras dos componentes de la magnetización total, M_x y M_y , pues nos indica cuanto tarda el sistema en desaparecer dichas componente, como se puede observar en la Figura 1.8.

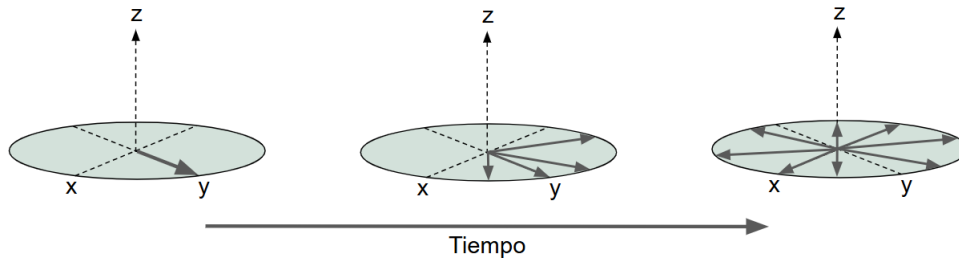


Figura 1.8: Esquema de la pérdida de fase.

El que el sistema regrese a su estado inicial es debido principalmente a que ya no está excitado, pues emitió la energía que había absorbido con anterioridad, sin embargo, existen otros factores que influyen en este proceso, uno de ellos es causado por la inhomogeneidad del campo magnético dentro de un MRI, pues el campo magnético no es totalmente homogéneo debido a factores como la agitación térmica que existe entre las partículas del cuerpo humano, lo que hace que estas se muevan aleatoriamente chocando entre sí, generando que el campo magnético que experimenta cada espín nuclear varíe en magnitud y dirección, a ese campo magnético se le llama campo magnético local y abarca un pequeño volumen, por ende el sistema comenzará a perder energía.

Distintos tejidos constan de distintos tiempos de relajación, pues varían en volumen y composición molecular, cosas que afectan directamente a los tiempos.

1.4. Obtención de imágenes

Como se explicó con anterioridad, una vez que la energía proveniente de los pulsos de radiofrecuencia es absorbida por los protones, estos la irradiarán regresando a su estado inicial, provocando una corriente inducida en la bobina del MRI [13].

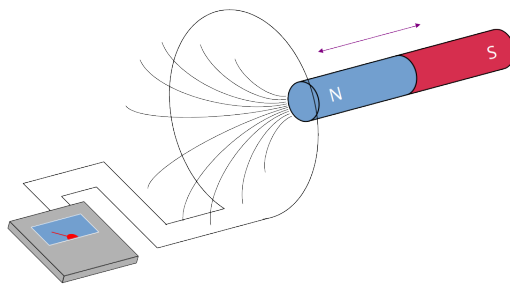


Figura 1.9: Esquema de la inducción de Faraday.

La energía emitida por el sistema al regresar a su estado inicial genera campos magnéticos, los cuales al pasar por las bobinas receptoras generan corrientes eléctricas, a este fenómeno se le denomina ley de inducción de Faraday. La Figura 1.9 muestra un esquema representativo de dicho fenómeno.

Una vez que se generan las señales en forma de corrientes eléctricas, estas serán procesadas para finalmente obtener las imágenes esperadas.

1.5. Herramientas y conceptos teóricos

En la sección 1.2.1 se mencionó que cuando los protones de los hidrógenos de la molécula de agua del cuerpo humano se encuentran dentro del MRI comenzarán a precesar a la frecuencia de Larmor, pero también se habló de que no todos los protones estarán precesando a la misma

frecuencia exactamente.

Los conceptos teóricos que se explican a continuación generan correcciones en los niveles de energía de los protones de los hidrógenos de la molécula de agua al interactuar o no con campos magnéticos, por lo tanto, son de suma importancia y serán las herramientas que ayudarán a romper con la degeneración de los niveles de energía de dichos protones.

1.5.1. Estructura fina.

La estructura fina es un fenómeno físico que describe la división adicional de las líneas espectrales [14] debido a dos factores específicos: el acoplamiento espín-órbita y la corrección relativista.

En la literatura explican específicamente el fenómeno para el caso del átomo de hidrógeno, que consta de un solo electrón orbitando alrededor de su núcleo, el cual está compuesto de un protón y un neutrón.

Acoplamiento espín-órbita.

El acoplamiento espín-órbita (hablando del átomo de hidrógeno) es un fenómeno que ocurre debido a la interacción del momento magnético de espín del electrón (dado por 1.7) con el campo magnético ($\mathbf{B}$) generado por el protón del núcleo del átomo de hidrógeno.

$$\hat{\mu}_S = \frac{-e\hat{\mathbf{S}}}{m_e c} \quad (1.7)$$

Se explicará el fenómeno con más detalle por medio de una interpretación clásica.

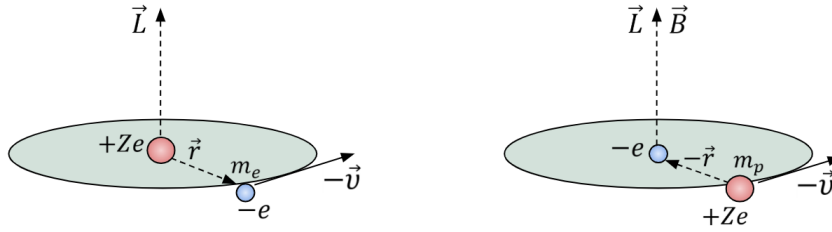


Figura 1.10: De lado izquierdo se observa al electrón moviéndose alrededor del núcleo, de lado derecho se muestra el mismo movimiento pero visto desde el marco de referencia del electrón, por lo tanto, ahora es el núcleo el que parece moverse.

De la Figura 1.10 se puede observar en la parte derecha donde se muestra al electrón como la partícula en reposo que el protón se encuentra girando a una velocidad igual a $-\mathbf{v}$, por lo tanto, el campo magnético generado por el electrón está dado por la expresión 1.8.

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{E}, \quad (1.8)$$

donde $\mathbf{E}$ es el campo eléctrico generado por el protón y $\mathbf{p} = m_e \mathbf{v}$ el momento lineal del electrón, por lo tanto, se llega a 1.9.

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{m_e c} \mathbf{p} \times \mathbf{E} = \frac{1}{m_e c} \mathbf{E} \times \mathbf{p}. \quad (1.9)$$

El campo eléctrico producido por el protón está dado por 1.10.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \left(\frac{e}{r^2} \right) \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \right) = \frac{e\mathbf{r}}{r^3}. \quad (1.10)$$

Se generalizó lo anterior para un átomo cualesquiera que tenga un solo electrón orbitando alrededor de su núcleo de un potencial de Coulomb dado por 1.11.

$$V(r) = -e\phi(r). \quad (1.11)$$

Sea 1.12.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(r). \quad (1.12)$$

Entonces, sustituyendo 1.11 en 1.12 se llega a 1.13.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla \phi(r) = \frac{1}{e} \nabla V(r) = \frac{1}{e} \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dV}{dr} \quad (1.13)$$

Sustituyendo 1.13 en 1.9, se llega a 1.14.

$$\mathbf{B} = \frac{1}{em_e c} \frac{dV}{dr} \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{1}{em_e c} \frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{L}}, \quad (1.14)$$

donde $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ es el momento angular orbital del electrón.

La expresión 1.14 muestra el campo magnético producido por el núcleo de un átomo compuesto por un electrón orbitando alrededor de él, por lo tanto, la interacción entre el momento magnético de espín del electrón con el campo magnético descrito por 1.14 está dada por 1.15.

$$\hat{H}_{SO} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_S \cdot \mathbf{B}. \quad (1.15)$$

Sustituyendo 1.7 y 1.14 en 1.15 se tiene 1.16.

$$\hat{H}_{SO} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_S \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{m_e c} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{m_e^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (1.16)$$

La expresión anterior es el doble de la interacción espín-órbita, puesto que el cálculo se realizó desde el marco de referencia del electrón, lo que significa que el electrón se tomó como si estuviera en reposo, sin embargo, en realidad el electrón acelera conforme se mueve en la órbita circular alrededor del núcleo, por lo tanto, se debe hacer una transformación de marco de referencias, al realizar dicha transformación se llega a que la expresión anterior se debe dividir por un factor de dos, por lo tanto se tiene 1.17 para la interacción espín-órbita.

$$\hat{H}_{SO} = \frac{1}{2m_e^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (1.17)$$

Corrección relativista.

Otro fenómeno que influye en los valores de los niveles de energía de un átomo similar al átomo de hidrógeno es el fenómeno de corrección relativista, el cual surge debido al movimiento del electrón alrededor del núcleo. Dicho efecto es pequeño, sin embargo, se puede detectar por medio de técnicas de espectroscopía, por lo tanto, es importante considerarlo en el análisis.

La energía cinética del electrón está dada por 1.18.

$$\hat{T} = \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2, \quad (1.18)$$

donde $m_e c^2$ es la masa de reposo del electrón.

Realizando una expansión binomial se llega a 1.19.

$$\sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2 \approx \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} + \dots \quad (1.19)$$

Se toma en cuenta que el hamiltoniano del átomo de hidrógeno está dado por una parte cinética y una potencial, como se muestra en 1.20.

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad (1.20)$$

donde $\hat{T}$ es la energía cinética y $\hat{V}$ energía potencial.

El hamiltoniano del átomo de hidrógeno sin considerar efectos relativistas está dado por 1.21.

$$\hat{H}_o = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} \quad (1.21)$$

Considerando efectos relativistas, la energía cinética del hamiltoniano del átomo de hidrógeno estará dado por 1.19, por lo tanto, el hamiltoniano al considerar dichos efectos se muestra en la ecuación 1.22.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2}. \quad (1.22)$$

Vemos entonces que 1.22 se puede simplificar utilizando 1.21, resultando en

$$\hat{H} = \hat{H}_o - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2}. \quad (1.23)$$

Por lo tanto, al término restante de 1.23 dado por 1.24, se le conoce como la corrección relativista y se considera como una perturbación del sistema.

$$\hat{H}_R = -\frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2}. \quad (1.24)$$

La corrección de estructura fina no es más que la suma de la contribución por la corrección espín-órbita y la corrección relativista, por lo tanto, sumando las expresiones 1.17 y 1.24 se tiene como resultado 1.25.

$$\hat{H}_{FS} = \frac{1}{2m_e^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} \quad (1.25)$$

1.5.2. Efecto Zeeman anómalo.

Los fenómenos antes descritos que ocasionan alteraciones en los niveles de energía del átomo no incluyen efectos externos, hasta el momento han sido fenómenos propios del átomo, sin embargo, es importante analizar las variaciones en dichas energías debido a factores externos como lo es un campo magnético y el efecto Zeeman anómalo proporciona dicha información.

El efecto Zeeman proporciona las modificaciones en los niveles de energía del átomo al encontrarse colocado dentro de un campo magnético ($\mathbf{B}$), sin embargo, no toma en cuenta el espín del electrón (en el caso de trabajar con el átomo de hidrógeno), en cambio, el efecto Zeeman anómalo si lo considera. El efecto Zeeman anómalo trabaja con la interacción del campo magnético externo con los momentos dipolares magnéticos orbitales (μ_L) y de espín (μ_S) del electrón, descritos por 1.26 y 1.27.

$$\hat{\mu}_L = -\frac{e\hat{\mathbf{L}}}{2m_e c} \quad (1.26)$$

$$\hat{\mu}_S = -\frac{e\hat{\mathbf{S}}}{m_e c} \quad (1.27)$$

Por lo tanto, al calcular la interacción la interacción del campo magnético externo con los momentos dipolares se llega a la expresión 1.28

$$\hat{H}_Z = -\hat{\mu}_L \cdot \mathbf{B} - \hat{\mu}_S \cdot \mathbf{B} = \frac{e\hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B}}{2m_e c} + \frac{e\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}}{m_e c} \quad (1.28)$$

Simplificando 1.28 resulta en 1.29.

$$\hat{H}_Z = \frac{e}{2m_e c} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B} \quad (1.29)$$

Sin embargo, al generalizar la expresión 1.29 se toma la constante giromagnética resultando finalmente en 1.30.

$$\hat{H}_Z = \frac{e}{2m_e c} (\hat{\mathbf{L}} + g\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B} \quad (1.30)$$

Capítulo 2

Metodología

2.1. Modelo de la molécula de agua

Se trabajó con un modelo simplificado de la molécula de agua, el cual se obtuvo de un artículo ya publicado [15] en el que de igual forma lo utilizan para realizar el análisis de su investigación.

Observando el esquema clásico de la molécula de agua que se encuentra del lado izquierdo en la Figura 2.1 podemos concluir que en la parte donde se encuentra el oxígeno existe una mayor densidad de carga negativa, debido a que hay posicionados un mayor número de electrones, de lo contrario, donde se encuentran los hidrógenos hay una mayor densidad de carga positiva, por lo tanto, al simplificar el modelo se llegó a un sistema de tres partículas (tal como se muestra en el esquema que se encuentra del lado derecho de la Figura 2.1) compuesto de dos protones en lugar de los átomos de hidrógeno y una partícula de carga negativa en el lugar del oxígeno, se trabajó entonces con una estructura dipolar de la molécula de agua. Se consideró al modelo como un cuerpo rígido, por lo tanto, no se tomaron en cuenta las variaciones angulares y de distancia que puedan llegar a tener, los valores de estas constantes se pueden observar de igual forma en la Figura 2.1. Se designó como $-2e$ a la carga de la partícula negativa del modelo simplificado, ya que, como se mencionó antes los átomos de hidrógeno le comparten un electrón cada uno al oxígeno. De esta forma, el modelo se reduce a un sistema con un centro de masa de carga $Q = -2e$ y dos protones moviéndose alrededor de él.

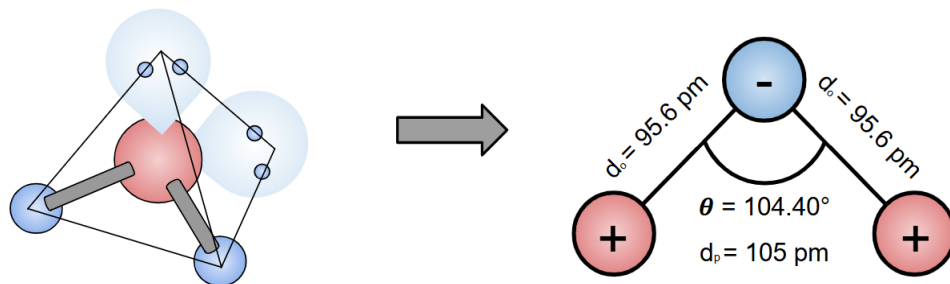


Figura 2.1: Modelo simplificado de la molécula de agua.

2.2. Niveles de energía de la molécula de agua.

2.2.1. Niveles de energía: Sin fenómenos.

Una vez definido el modelo se obtuvieron los niveles de energía de la molécula de agua. Del artículo antes mencionado se adquirió la ecuación para obtener las energías de cada protón al no interactuar con algún campo magnético externo y sin considerar algún fenómeno que ocasione variaciones, dichas energías están dadas por la expresión 2.1.

$$E_{0i} = \frac{\hbar^2}{2m_p d_o^2} l_i(l_i + 1) + V_i, \quad (2.1)$$

donde d_0 es la distancia de la partícula negativa a uno de los protones del modelo con el que se está trabajando, $\hbar$ es la constante de Planck, m_p es la masa del protón, l_i es el número cuántico de momento angular orbital, el subíndice i puede tomar los valores 1 y 2 que corresponden al primero y segundo protón, respectivamente, y V_i es el potencial que le corresponde a cada protón dado por la expresión 2.2. Las energías fueron calculadas para el estado base y el primer estado excitado.

$$V_i = V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{e^2}{d_p} - \frac{4e^2}{d_o} \right). \quad (2.2)$$

La energía total viene dada por la suma de las energías de ambos protones, como se expresa en 2.3.

$$E_0 = E_{0_1} + E_{0_2}. \quad (2.3)$$

2.2.2. Niveles de energía: Estructura fina.

Como se mencionó anteriormente, los cambios en las energías debido a la estructura fina están dados por la corrección espín-órbita y relativista, sin embargo, para el modelo con el que se está trabajando (que se encuentra descrito en la sección 2.1) no existen contribuciones en los niveles de energía debido a la corrección espín-órbita, esto a causa de que el modelo se comporta como un cuerpo rígido, por ende, el potencial es constante y la expresión dada por 1.17 resulta en cero.

Se procedió entonces a calcular los cambios en los niveles de energía de la molécula considerando la corrección relativista, para ello se calculó el valor esperado de la expresión 1.24. Primero se despejó $\hat{p}_i^2$ de la ecuación 1.21, obteniendo la expresión 2.4, la cual se elevó al cuadrado resultando en 2.5.

$$\hat{p}_i^2 = 2m_p(\hat{H}_{0_i} - \hat{V}_i). \quad (2.4)$$

$$\hat{p}_i^4 = 4m_p^2(\hat{H}_{0_i}^2 - 2\hat{H}_{0_i}\hat{V}_i + \hat{V}_i^2). \quad (2.5)$$

Se sustituyó 2.5 en 1.24 obteniendo 2.6.

$$\hat{H}_{R_i} = -\frac{1}{2m_e c^2}(\hat{H}_{0_i}^2 - 2\hat{H}_{0_i}\hat{V}_i + \hat{V}_i^2). \quad (2.6)$$

Se trabajó con los estados que se muestran en la ecuación 2.7.

$$|l_1, l_2; m_{l_1}, m_{l_2}; m_{s_1}, m_{s_2}\rangle \rightarrow |l_i; m_{l_i}; m_{s_i}\rangle, \quad (2.7)$$

donde m_l es el número cuántico magnético y m_s es el número cuántico de espín para cada protón.

Se calculó el valor esperado de 2.6, considerando que $\langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \hat{H}_{0i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle = E_{0i}$ se llegó a la expresión 2.8.

$$\langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \hat{H}_{R_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle = E_{R_i} = -\frac{1}{2m_p c^2} (E_{0i}^2 - 2V_i E_{0i} + V_i^2). \quad (2.8)$$

La energía debido a la estructura fina está dada por la suma de la energía por corrección espín-órbita y por corrección relativista, como se dijo con anterioridad, la energía a causa de la corrección espín-órbita es cero, por lo tanto, la energía debido a la estructura fina es igual a la energía por corrección relativista proveniente de cada protón, como se muestra en la expresión 2.9. Se obtuvo la energía correspondiente al estado base y al primer estado excitado.

$$E_{EF_i} = E_R = E_{R_1} + E_{R_2}. \quad (2.9)$$

2.2.3. Niveles de energía: Campo magnético constante.

Se calcularon los niveles de energía de la molécula de agua al encontrarse interaccionando con un campo magnético externo y constante, específicamente con el campo magnético generado por el superconductor magnético de un aparato de resonancia magnética Siemens MAGNETOM Skyra 3T MRI Scanner.

Se utilizó una analogía del efecto Zeeman anómalo para realizar los calculos, se empleó entonces la expresión 1.30.

Sean:

$$\hat{\mathbf{L}}_i = \hat{L}_{x_i} + \hat{L}_{y_i} + \hat{L}_{z_i}, \quad (2.10)$$

$$\hat{\mathbf{S}}_i = \hat{S}_{x_i} + \hat{S}_{y_i} + \hat{S}_{z_i} \quad (2.11)$$

Tomando las expresiones 2.10 y 2.11, explícitamente el hamiltoniano tiene la forma de 2.12.

$$\hat{H}_{Z_i} = -\frac{e}{2m_p c} [(\hat{L}_{x_i} + \hat{L}_{y_i} + \hat{L}_{z_i}) + g(\hat{S}_{x_i} + \hat{S}_{y_i} + \hat{S}_{z_i})] \cdot \mathbf{B}, \quad (2.12)$$

donde $\mathbf{B}$ está dado por la expresión 1.1. Se tiene entonces la ecuación 2.13.

$$\hat{H}_{Z_i} = -\frac{eB_0}{2m_p c} [(\hat{L}_{x_i} + \hat{L}_{y_i} + \hat{L}_{z_i}) + g(\hat{S}_{x_i} + \hat{S}_{y_i} + \hat{S}_{z_i})] \cdot \hat{\mathbf{k}}. \quad (2.13)$$

Se nombró a $\hat{H}_{Z_i}$ como $\hat{H}_{Zcte_i}$ en esta sección, debido a que se está considerando un campo magnético constante, esto para evitar confusiones.

Realizando el producto punto de 2.13 se llegó a 2.14.

$$\hat{H}_{Zcte_i} = -\frac{eB_0}{2m_p c}(\hat{L}_{z_i} + g\hat{S}_{z_i}). \quad (2.14)$$

Se procedió a obtener el valor esperado de $\hat{H}_{Zcte_i}$, para ello se tomó la propiedad de la expresión 2.15.

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle, \quad (2.15)$$

donde J puede ser $\hat{L}$ o $\hat{S}$, por lo tanto, $|j, m\rangle$ será $|l, m_l\rangle$ o $|s, m_s\rangle$ respectivamente y s es el espín de la partícula.

Se obtuvo entonces el valor esperado de 2.14, el desarrollo partió de 2.16.

$$\langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \hat{H}_{Zcte_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle = E_{Zcte_i} = -\frac{eB_0}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | (\hat{L}_{z_i} + g\hat{S}_{z_i}) | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle. \quad (2.16)$$

Se distribuyó el ket, resultando en 2.17.

$$E_{Zcte_i} = -\frac{eB_0}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | (\hat{L}_{z_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle + g\hat{S}_{z_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle). \quad (2.17)$$

De 2.15 se llegó a 2.18.

$$E_{Zcte_i} = -\frac{eB_0}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | (m_{l_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle + gm_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle). \quad (2.18)$$

Al ser m_{l_i} y m_{s_i} constantes se obtuvo 2.19.

$$E_{Zcte_i} = -\frac{eB_0}{2m_p c} (m_{l_i} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle + gm_{s_i} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle). \quad (2.19)$$

Se obtuvo así la expresión para las energías de la molécula de agua al interaccionar con el campo magnético constante generado por el superconductor magnético del MRI antes especificado, esto debido a que $\langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle = 1$, de tal forma se llegó a la ecuación 2.20.

$$E_{Zcte_i} = -\frac{eB_0 \hbar}{2m_p c} (m_{l_i} + gm_{s_i}). \quad (2.20)$$

La energía de la molécula de agua al interaccionar con un campo magnético constante se expresa por medio de 2.21.

$$E_{Zcte} = E_{Zcte_1} + E_{Zcte_2}. \quad (2.21)$$

Se calculó la energía correspondiente al estado base y al primer estado excitado de la molécula de agua.

2.2.4. Niveles de energía: Campo magnético variable.

Para obtener los niveles de energía de la molécula de agua al interactuar con un campo magnético variable, se trabajó con el campo generado por las bobinas de gradiente de un aparato de resonancia magnética con las especificaciones mencionadas en la sección 2.2.3.

Para realizar los cálculos se utilizó así como en la anterior sección, una analogía del efecto Zeeman anómalo, por lo tanto, se trabajó con la expresión 2.12, solo que para este caso se tomó como $\mathbf{B}$ al campo dado por la ecuación 1.6 y se nombró a $\hat{H}_{Z_i}$ como $\hat{H}_{Zvar_i}$, llegando a la expresión 2.22.

$$\hat{H}_{Zvar_i} = -\frac{e}{2m_p c} [(\hat{L}_{x_i} + \hat{L}_{y_i} + \hat{L}_{z_i}) + g(\hat{S}_{x_i} + \hat{S}_{y_i} + \hat{S}_{z_i})] \cdot (xG_x \hat{\mathbf{i}} + yG_y \hat{\mathbf{j}} + zG_z \hat{\mathbf{k}}). \quad (2.22)$$

Se realizó el producto punto de 2.22, resultando en la expresión 2.23.

$$\hat{H}_{Zvar_i} = -\frac{e}{2m_p c} \sum_{n=1}^3 (nG_n \hat{L}_{n_i} + gnG_n \hat{S}_{n_i}), \quad (2.23)$$

donde $n = 1, 2, 3 = x, y, z$.

Se procedió a calcular el valor esperado de 2.23, partiendo de la ecuación 2.24.

$$\begin{aligned} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \hat{H}_{Zvar_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle &= E_{Zvar_i} = \\ &= -\frac{e}{2m_p c} \sum_{n=1}^3 \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | (nG_n \hat{L}_{n_i} + gnG_n \hat{S}_{n_i}) | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Se distribuyó el ket, teniendo como resultado 2.25.

$$E_{Zvar_i} = -\frac{e}{2m_p c} \sum_{n=1}^3 \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | (nG_n \hat{L}_{n_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle + gnG_n \hat{S}_{n_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle). \quad (2.25)$$

Se utilizaron las propiedades descritas por las expresiones 2.26 y 2.27.

$$J_x = \frac{J_+ - J_-}{2} \quad (2.26)$$

$$J_y = \frac{J_+ + J_-}{2i} \quad (2.27)$$

Para mayor claridad, se procedió a explicar el procedimiento de esta sección utilizando un solo término de la suma de la ecuación 2.25, en este caso $n = 1 = x$, para $n = 2 = y$ los cálculos son análogos. Entonces, para $n = x$, 2.25 resulta en 2.28.

$$E_{Zxvar_i} = -\frac{e}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \left[xG_x \left(\frac{\hat{L}_{+i} - \hat{L}_{-i}}{2} \right) | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle \right] - \frac{e}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \left[gxG_x \left(\frac{\hat{S}_{+i} - \hat{S}_{-i}}{2} \right) | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle \right] \quad (2.28)$$

Se distribuyó el ket, como se observa en 2.29.

$$E_{Zxvar_i} = -\frac{e}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \left[xG_x \left(\frac{\hat{L}_{+i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle - \hat{L}_{-i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle}{2} \right) \right] - \frac{e}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \left[gxG_x \left(\frac{\hat{S}_{+i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle - \hat{S}_{-i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle}{2} \right) \right] \quad (2.29)$$

Se utilizó la propiedad de 2.30 en 2.29 y se factorizó el 1/2 que se encuentra en cada término de la misma ecuación.

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \quad (2.30)$$

Resultando en 2.31.

$$E_{Zxvar_i} = -\frac{e}{4m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \left(xG_x \hbar \sqrt{l_i(l_i+1) - m_{l_i}(m_{l_i}+1)} | l_i; m_{l_i}+1; m_{s_i} \rangle \right) - \frac{e}{4m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \left(\hbar \sqrt{l_i(l_i+1) - m_{l_i}(m_{l_i}-1)} | l_i; m_{l_i}-1; m_{s_i} \rangle \right) - \frac{e}{4m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \left(gxG_x \hbar \sqrt{s_i(s_i+1) - m_{s_i}(m_{s_i}+1)} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i}+1 \rangle \right) - \frac{e}{4m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | \left(\hbar \sqrt{s_i(s_i+1) - m_{s_i}(m_{s_i}-1)} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i}-1 \rangle \right) \quad (2.31)$$

Se simplificó la expresión 2.31 y considerando que los términos en la misma son constantes resultó en 2.32.

$$E_{Zxvar_i} = -\frac{e}{4m_p c} \left(xG_x \hbar \sqrt{l_i(l_i+1) - m_{l_i}(m_{l_i}+1)} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}+1; m_{s_i} \rangle \right) - \frac{e}{4m_p c} \left(\hbar \sqrt{l_i(l_i+1) - m_{l_i}(m_{l_i}-1)} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}-1; m_{s_i} \rangle \right) - \frac{e}{4m_p c} \left(gxG_x \hbar \sqrt{s_i(s_i+1) - m_{s_i}(m_{s_i}+1)} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i}+1 \rangle \right) - \frac{e}{4m_p c} \left(\hbar \sqrt{s_i(s_i+1) - m_{s_i}(m_{s_i}-1)} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i}-1 \rangle \right) \quad (2.32)$$

Debido a que $\langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \pm 1 \rangle = \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i} \pm 1; m_{s_i} \rangle = 0$, entonces tenemos que $E_{Zxvar_i} = 0$. El procedimiento es análogo para E_{ZYvar_i} , por lo tanto, $E_{Zyvar_i} = 0$.

Posteriormente se tomó de nuevo 2.25 para calcular ahora E_{Zzvar_i} , por lo tanto, se partió de 2.33.

$$E_{Zzvar_i} = -\frac{e}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | (zG_z \hat{L}_{z_i} + gzG_z \hat{S}_{z_i}) | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle. \quad (2.33)$$

Se distribuyó el ket en 2.33, resultando 2.34.

$$E_{Zzvar_i} = -\frac{e}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | (zG_z \hat{L}_{z_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle + gzG_z \hat{S}_{z_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle). \quad (2.34)$$

Se tomó la propiedad de 2.15 y se aplicó a 2.34, se obtuvo 2.35.

$$E_{Zzvar_i} = -\frac{e}{2m_p c} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | (zG_z \hbar m_{l_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle + gzG_z \hbar m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle). \quad (2.35)$$

Se simplificó 2.35 y al ser todos los términos constantes se tuvo como resultado 2.36.

$$E_{Zzvar_i} = -\frac{ezG_z \hbar}{2m_p c} (m_{l_i} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle + gm_{s_i} \langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle). \quad (2.36)$$

Debido a que $\langle l_i; m_{l_i}; m_{s_i} | l_i; m_{l_i}; m_{s_i} \rangle = 1$, se obtuvo 2.37.

$$E_{Zzvar_i} = -\frac{ezG_z \hbar}{2m_p c} (m_{l_i} + gm_{s_i}). \quad (2.37)$$

Puesto que $E_{Zvar_i} = E_{Zxvar_i} + E_{Zyvar_i} + E_{Zzvar_i}$, entonces E_{Zvar_i} resultó en 2.38.

$$E_{Zvar_i} = -\frac{ezG_z \hbar}{2m_p c} (m_{l_i} + gm_{s_i}). \quad (2.38)$$

La energía de la molécula de agua al interaccionar con un campo magnético variable se expresa por medio de 2.39.

$$E_{Zvar} = E_{Zvar_1} + E_{Zvar_2}. \quad (2.39)$$

Se calculó la energía correspondiente al estado base y al primer estado excitado de la molécula de agua.

2.2.5. Niveles de energía: Pulsos de radiofrecuencia

Posteriormente, se calcularon los niveles de energía de la molécula de agua al absorber los pulsos de radiofrecuencia provenientes del aparato de resonancia, para ello se utilizó 2.40.

$$E = h\nu, \quad (2.40)$$

donde ν es la frecuencia y h es la constante de Planck.

2.3. Frecuencias necesarias para que surjan transiciones de estado

Como se mencionó en la sección 1.2.3, los protones de los hidrógenos de la molécula de agua al absorber la energía de los pulsos de radiofrecuencia de un MRI transicionarán de estado, pero esto solo ocurre entre ciertos estados, los estados que cumplan con la conservación de momento angular total (J). Por lo tanto, se obtuvieron los J correspondientes al primer estado excitado y al estado base de la molécula de agua, para ello se trabajó con 2.41, para cada protón.

$$j_i = l_i \pm \frac{1}{2} \quad (2.41)$$

Y con 2.42, la cual nos proporcionan los momentos angulares totales posibles.

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq |j_1 + j_2| \quad (2.42)$$

Una vez definidas las transiciones posibles, se obtuvieron las diferencias de energía entre estados sin considerar la energía proveniente de los pulsos de radiofrecuencia, posteriormente se calcularon las frecuencias necesarias para que surjan dicha transiciones, esto mediante la expresión 2.43.

$$\nu = \frac{E}{h}. \quad (2.43)$$

Capítulo 3

Resultados

3.1. Resultados de los niveles de energía: Sin fenómenos.

Para el estado base $l_1 = l_2 = 0$, por lo tanto la expresión 2.1 para el primer protón resultó en 3.1, donde se realizó el cambio de notación de E_{0_i} a $E_{0_{B_i}}$.

$$E_{0_{B_1}} = \frac{\hbar^2}{2m_p d_o^2} (0)(0+1) + V_1 = V_1. \quad (3.1)$$

Se obtuvo el mismo resultado para la energía del segundo protón, por lo tanto, la energía de la molécula de agua al no interactuar con algún campo y sin considerar ningún fenómeno para el estado base, está dada por la expresión 3.2, debido a que $V_1 = V_2 = V$.

$$E_{0_B} = V_1 + V_2 = 2V. \quad (3.2)$$

donde V está dado por 2.2. Para llegar a la expresión 3.3 se utilizaron las siguientes constantes:

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= 8,8541878176 \times 10^{-12} \text{ Fm}^{-1}, \\ \hbar &= 1,054571817 \times 10^{-34} \text{ Js}, \\ e &= 1,602176634 \times 10^{-19} \text{ C}, \\ d_p &= 151,05 \times 10^{-12} \text{ m}, \\ d_o &= 95,60 \times 10^{-12} \text{ m}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, las constantes se sustituyeron en 3.2, resultando en 3.3 para el estado base.

$$E_{0_B} = -101,43306055 \text{ eV}. \quad (3.3)$$

Posteriormente se realizó el mismo procedimiento para el primer estado excitado, en ese caso $l_1 = 1$ y $l_2 = 0$, por lo tanto, se obtuvieron las energías para el protón 1 y 2 dadas por las expresiones 3.4 y 3.5, respectivamente. Se realizó el cambio de notación de E_{0_i} a $E_{0_{P_i}}$, para diferenciar entre el estado base y el primer estado excitado.

$$E_{0_{P_1}} = \frac{\hbar^2}{2m_p d_o^2} (1)(1+1) + V_1 = \frac{\hbar^2}{m_p d_o^2} + V_1. \quad (3.4)$$

$$E_{0_{F_2}} = \frac{\hbar^2}{2m_p d_o^2} (0)(0+1) + V_2 = V_2. \quad (3.5)$$

Por lo tanto, la energía total de la molécula de agua para este caso está dada por la ecuación 3.6.

$$E_{0_P} = E_{0_{P_1}} + E_{0_{F_2}} = \frac{\hbar^2}{m_p d_o^2} + 2V. \quad (3.6)$$

Sustituyendo las constantes se tiene la siguiente energía para el primer estado excitado de la molécula de agua al no interaccionar con algún campo magnético sin considerar ningún fenómeno, dada por la ecuación 3.7.

$$E_{0_P} = -101,42851979 \text{ eV}. \quad (3.7)$$

3.2. Resultados de los niveles de energía: Estructura fina.

Se procedió a obtener los niveles de energía considerando la estructura fina, para ello se trabajó con la expresión 2.8 y 2.9. Se partió del estado base, para ambas partículas $l_1 = l_2 = 0$, se observa que 2.8 depende de E_{0_i} , recordando de la sección 3.1 que $E_{0_i} = E_{0_{B_i}} = V_i$, se tiene entonces la expresión 3.8 para la primera partícula.

$$E_{EF_{B_1}} = -\frac{1}{2m_p c^2} (V_1^2 - 2V_1^2 + V_1^2) = 0. \quad (3.8)$$

Se cambió E_{EF_B} por E_{EF_B} para distinguir el estado base del primer estado excitado. El procedimiento anterior es análogo para la segunda partícula obteniendo el mismo resultado, por lo tanto, para el estado base de la molécula de agua al considerarse la estructura fina, la energía está dada por la ecuación 3.9.

$$E_{EF_B} = E_{EF_{B_1}} + E_{EF_{B_2}} = 0. \quad (3.9)$$

Posteriormente se obtuvieron las energías ahora para el primer estado excitado donde $l_1 = 1$ y $l_2 = 0$. Para la primera partícula, $E_{0_1} = E_{0_{P_1}}$ está dada por 3.4, por lo tanto, sustituyendo 3.4 en 2.8 se llegó a 3.10.

$$E_{EF_{P_1}} = -\frac{1}{2m_p c^2} \left[\left(\frac{\hbar^2}{m_p d_o^2} + V_1 \right)^2 - 2V_1 \left(\frac{\hbar^2}{m_p d_o^2} + V_1 \right) + V_1^2 \right]. \quad (3.10)$$

Simplificando 3.10 y sustituyendo valores se llegó a 3.11.

$$E_{EF_{P_1}} = -\frac{\hbar^4}{2m_p^3 c^2 d_o^4} = -1,09874756 \times 10^{-14} \text{ eV}. \quad (3.11)$$

Se obtuvieron después las energías para la segunda partícula en el primer estado excitado, donde $E_{0_2} = E_{0_{F_2}}$ está dada por 3.5, por lo tanto, sustituyendo en 2.8 se llegó a 3.12.

$$E_{EF_{P_2}} = -\frac{1}{2m_p c^2} (V^2 - 2V^2 + V^2) = 0. \quad (3.12)$$

Por lo tanto, la energía de la molécula de agua al considerar la estructura fina está dada por

$$E_{EFP} = E_{EFP_1} + E_{EFP_2} = -\frac{\hbar^4}{2m_p^3 c^2 d_o^4} = -1,09874756 \times 10^{-14} \text{ eV}. \quad (3.13)$$

3.3. Resultados de los niveles de energía: Campo magnético constante.

Se calcularon los niveles de energía de la molécula de agua al interaccionar con el campo magnético constante proveniente del superconductor magnético de un MRI de 1.5, 3 y 7 T, al cual le corresponde una frecuencia de 64, 128 y 297 MHz respectivamente. A continuación se presentan los resultados explícitamente para el caso de 3 T solamente, para ello se partió de la expresión 2.20.

Para el estado base $l_1 = l_2 = 0$, por lo tanto, $m_{l_1} = m_{l_2} = 0$, $s_i = \frac{1}{2}$ para los dos protones pues son la misma partícula, entonces $m_{s_1} = \pm \frac{1}{2}$ esto dependiendo de la segunda partícula, pues por exclusión de Pauli no se puede tener dos partículas en el mismo estado. Por lo tanto para la primera partícula se obtuvo 3.14, donde se realizó el cambio de notación de E_{Zcte_i} a E_{ZBcte_i} .

$$E_{Zcte_{B_1}} = -\frac{eB_0\hbar}{2m_p c} \left[0 + g \left(\pm \frac{1}{2} \right) \right] = \mp \frac{eBg\hbar}{4m_p c}. \quad (3.14)$$

Se obtuvo para la segunda partícula la ecuación 3.15.

$$E_{Zcte_{B_2}} = -\frac{eB_0\hbar}{2m_p c} \left[0 + g \left(\mp \frac{1}{2} \right) \right] = \pm \frac{eBg\hbar}{4m_p c}. \quad (3.15)$$

Por lo tanto, la energía de la molécula de agua para el estado base al encontrarse interaccionando con un campo magnético constante de 3T está dada por la expresión 3.16.

$$E_{Zcte_B} = E_{Zcte_{B_1}} + E_{Zcte_{B_2}} = \mp \frac{eB_0g\hbar}{4m_p c} \pm \frac{eBg\hbar}{4m_p c} = 0. \quad (3.16)$$

Posteriormente se obtuvieron las energías pero para el primer estado excitado, donde para la primera partícula $l_1 = 1$, $m_{l_1} = -1, 0, 1$ y $m_{s_1} = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$, por lo tanto, se llegó a 3.17 de 2.20 solo para uno de los casos donde $m_{l_1} = -1$ y $m_{s_1} = +\frac{1}{2}$, pues los demás son análogos. Se realizó el cambio de E_{Zcte_i} a E_{ZPcte_i} , por distinción.

$$E_{Zcte_{P_1}} = -\frac{eB_0\hbar}{2m_p c} \left[-1 + g \left(\frac{1}{2} \right) \right]. \quad (3.17)$$

Para la segunda partícula $l_2 = 0$, $m_{l_2} = 0$ y $m_{s_1} = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$, llegando a 3.18, solo para uno de los casos donde $m_{l_2} = 0$ y $m_{s_1} = +\frac{1}{2}$.

$$E_{Zcte_{P_2}} = -\frac{eB_0\hbar}{2m_p c} \left(\frac{g}{2} \right). \quad (3.18)$$

Por lo tanto, la energía de la molécula de agua para uno de los casos del primer estado excitado al encontrarse interaccionando con un campo magnético constante de 3T está dada por la expresión 3.19

$$E_{Zcte_P} = -\frac{eB_0\hbar}{2m_p c} \left[-1 + g \left(\frac{1}{2} \right) \right] - \frac{eB_0\hbar}{2m_p c} \left(\frac{g}{2} \right) = \frac{eB_0\hbar}{2m_p c} (1 - g) = -4,33619670 \times 10^{-07}. \quad (3.19)$$

El resultado anterior es solo para uno de los estados posibles ($|1, 0; -1, 0; +, +\rangle$), de manera análoga se realizó el procedimiento anterior para todos los demas estados posibles y se obtuvieron los resultados que se pueden observar en la Figura.

3.4. Resultados de los niveles de energía: Campo magnético variable.

Para obtener las energías de la molécula de agua causadas por el campo magnético variable se trabajó con 2.38 y 2.39. Para el estado base de la primera partícula $l_1 = 0$, $m_{l_1} = 0$ y $m_{s_1} = \pm \frac{1}{2}$, sustituyendo los valores en 2.38 se llegó a 3.20, donde se tomó a E_{Zvar_1} como $E_{Zvar_{B_1}}$.

$$E_{Zvar_{B_1}} = -\frac{ezG_z\hbar}{2m_p c} \left(0 \pm \frac{g}{2} \right) = \mp \frac{ezG_zg\hbar}{4m_p c}. \quad (3.20)$$

Posteriormente, se adquirió la energía para la segunda partícula, donde de igual forma $l_2 = 0$, $m_{l_2} = 0$ y $m_{s_2} = \pm \frac{1}{2}$, solo que se tomó a $m_{s_2} = \mp \frac{1}{2}$, ya que las partículas no pueden encontrarse en el mismo estado. Sustituyendo los valores en 2.38 se llegó a 3.21.

$$E_{Zvar_{B_2}} = -\frac{ezG_z\hbar}{2m_p c} \left(0 \mp \frac{g}{2} \right) = \pm \frac{ezG_zg\hbar}{4m_p c}, \quad (3.21)$$

donde $G_z = 45 \frac{mT}{m}$, tomando las especificaciones del MRI en el que se basó el trabajo. La constante giromagética g , para los protones tiene un valor de aproximadamente 5.585 y $m = 20Cm$, que es la posición en donde se están considerando las mediciones, puesto que el origen de coordenadas se encuentra en el centro del cuerpo humano se tomaron 20 Cm en z . Considerando estos valores se obtuvo entonces que la energía del estado base de la molécula de agua al encontrarse interaccionando con un campo magnético variable está dado por 3.22.

$$E_{Zvar_B} = E_{ZBvar_1} + E_{ZBvar_2} = \mp \frac{ezG_zg\hbar}{4m_p c} \pm \frac{ezG_zg\hbar}{4m_p c} = 0. \quad (3.22)$$

Se realizaron los cálculos posteriormente para el primer estado excitado, comenzando por la primera partícula, se tomó el caso donde $m_{l_1} = -1$ y $m_{s_1} = +\frac{1}{2}$. Sustituyendo los valores en 2.38 y cambiando a E_{Zvar} por E_{Zvar_P} se llegó a 3.23.

$$E_{Zvar_{P_1}} = -\frac{ezG_z\hbar}{2m_p c} \left(-1 + \frac{g}{2} \right). \quad (3.23)$$

Se prosiguió realizando los cálculos para la segunda partícula, tomando $m_{l_2} = 0$, $m_{s_2} = +\frac{1}{2}$ y sustituyendo en 2.38 se obtuvo como resultado a 3.24.

$$E_{Zvar_{P_2}} = -\frac{ezG_z\hbar}{2m_p c} \left(0 + \frac{g}{2} \right). \quad (3.24)$$

Por lo tanto, la energía de la molécula de agua para el primer estado excitado tomando uno de los estados posibles ($|1, 0; -1, 0; +, +\rangle$) cuando la molécula se encuentra interaccionando con un

campo magnético variable proveniente de los gradientes de campo magnético de un MRI que tiene las especificaciones antes descritas está dada por

$$E_{Zvar_P} = -\frac{ezG_z\hbar}{2m_p c}(-1 + g) = -1,30085901 \times 10^{-9} \text{ eV}. \quad (3.25)$$

Finalmente, se realizó un procedimiento análogo al anterior para obtener los niveles de energía correspondientes al resto de los estados.

3.5. Resultados de los niveles de energía: Pulsos de radiofrecuencia.

Se obtuvo la energía emitida por los pulso de radiofrecuencia de un MRI, para ello se utilizó la expresión 2.40, donde $\nu = 128\text{Hz}$, pues es la frecuencia emitida por los pulsos de radiofrecuencia del MRI con el que se trabajó en esta investigación, de esa forma se llegó a 3.26.

$$E = h\nu = 5,29365465 \times 10^{-7}. \quad (3.26)$$

3.6. Niveles de energía de la molécula de agua al interactuar con un MRI.

En las secciones anteriores de este capítulo, se obtuvieron las energías de la molécula de agua antes de entrar a un MRI considerando los distintos fenómenos que pueden ocasionar cambios en los niveles de energía y una vez que se encuentra dentro de un MRI, se consideraron las variaciones ocasionadas por los campos magnéticos y los pulsos de radiofrecuencia absorbidos.

Se sumaron las energías obtenidas de las expresiones 3.3 y 3.9 para el estado base de la molécula de agua al encontrarse sin interactuar con algún campo magnético, se sumaron también las expresiones 3.7 y 3.13 que son las energías del primer estado excitado para el mismo caso, obteniendo los resultados que se muestran en la Figura 3.1.

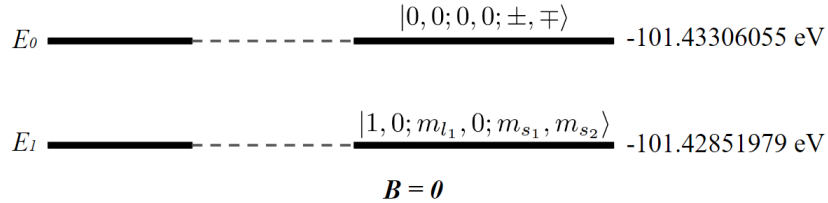


Figura 3.1: Energía total para el estado base y el primer estado excitado de la molécula de agua al no interactuar con campos magnéticos.

Finalmente se le sumaron a las energías que se muestran en la Figura 3.1 las obtenidas una vez que la molécula se encuentra interactuando con los campos magnéticos generados por el superconductor magnético, las bobinas de gradiente de un MRI y la energía absorbida por medio de los pulsos de radiofrecuencia, por lo tanto, para el estado base se sumó 3.9, 3.16, 3.22 y 3.26

a la energía base que se muestra en la Figura 3.1 y para el primer estado excitado se sumaron las energías que se obtuvieron considerando el campo magnético constante y el campo magnético variable para todos los posibles estados, además de la energía dada por 3.26, resultando en la Figura 3.2.

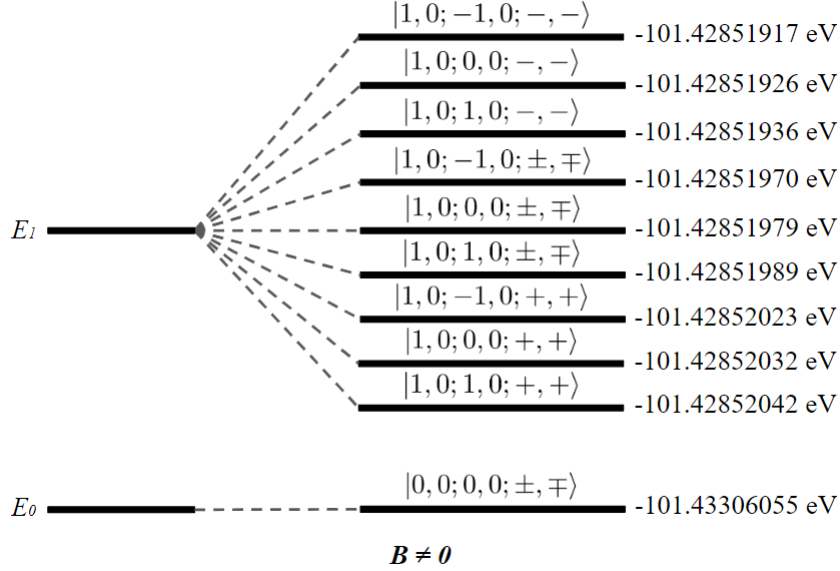


Figura 3.2: Energía total para el estado base y el primer estado excitado de la molécula de agua al considerar las variaciones en los niveles de energía debido a los campos magnéticos generados por un MRI.

3.7. Diferencia de energía entre estados de transición

Se procedió a calcular los momentos angulares totales correspondientes a cada estado, para así obtener los estados posibles de transición, la diferencia de energía entre dichos estados y la frecuencia necesaria para que surja dicha transición, para ello, se tomaron las energías de los estados posibles sin considerar la energía proveniente de los pulsos de radiofrecuencia.

Ejemplificando los cálculos con el estado base, donde $l_1 = l_2 = 0$, sustituyendo dichos valores en 2.41 se obtuvieron 3.27 y 3.28.

$$j_1 = 0 \pm \frac{1}{2} = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}. \quad (3.27)$$

$$j_2 = 0 \pm \frac{1}{2} = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}. \quad (3.28)$$

Posteriormente, se sustituyeron los valores antes obtenidos en 2.42, considerando que m_{s_i} deben ser distintas, por lo tanto, tomando $j_1 = \frac{1}{2}$ y $j_2 = -\frac{1}{2}$ donde $m_{s_1} = +$ y $m_{s_2} = -$, respectivamente, se llegó a las J posibles dadas por 3.29.

$$\left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right| \leq J \leq \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| \quad (3.29)$$

Tomando el caso donde $j_1 = -\frac{1}{2}$ y $j_2 = \frac{1}{2}$, o sea que $m_{s_1} = -$ y $m_{s_2} = +$, se tiene como resultado 3.30.

$$\left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| \leq J \leq \left| -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right| \quad (3.30)$$

Por lo tanto, a partir de 3.29 y 3.30, se llegó a que las J posibles para el estado base son $J = 0, 1$.

Tomando el caso anterior, suponiendo que $J = 0$ y llega el fotón proveniente de los pulsos de radiofrecuencia con $J = 1$, entonces los estados a los que puede transicionar deben cumplir con 3.31, considerando que ahora $j_1 = 0$ y $j_2 = 1$.

$$J = |0 - 1|, |0 + 1| = 1 \quad (3.31)$$

El procedimiento anterior se realizó para todos los estados, considerando que solo uno de los protones de la molécula de agua absorberá al fotón proveniente de los pulsos de radiofrecuencia, provocando que la dirección del espín cambie, por ejemplo, si el protón tiene $m_s = +$ pasará a $m_s = -$.

En el caso del estado $|0, 0; 0, 0; +, -\rangle$ con $J = 0$, si el protón con $m_s = +$ absorbe al fotón cambiará a $m_s = -$, sin embargo, por exclusión de Pauli no existe el estado $|0, 0; 0, 0; -, -\rangle$, por lo tanto, el estado $|0, 0; 0, 0; +, -\rangle$ solo puede transicionar a: $|1, 0; -1, 0; -, -\rangle$, $|1, 0; 0, 0; -, -\rangle$ y $|1, 0; 1, 0; -, -\rangle$ con $J = 1$, al absorber el fotón.

Una vez que se definieron las posibles transiciones, se obtuvieron las diferencias de energías entre estados y por medio de esa diferencia de energía se obtuvo la frecuencia necesaria para que esas transiciones sucedieran, esto se realizó por medio de la expresión 3.26, simplemente despejando ν de ella.

Estado inicial (J=2)	Estado de transición (J=2)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$5,298 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$5,298 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$5,298 \times 10^{-7}$	128.1 MHz

Tabla 3.1: Diferencia de energía y frecuencia correspondiente a posibles estados de transición (de $J = 2$ a $J = 2$) para MRI de 3 T.

En la Tabla 3.1 se muestra algunos resultados obtenidos para un caso específico, las tablas resanantes para todas las posibles transiciones se muestran en el apéndice Momento angular total.

Los resultados obtenidos para el caso del aparato de resonancia de 1.5 T y 7 T se pueden observar en el apéndice Tablas correspondientes a 1.5 T y Tablas correspondientes a 7 T.

3.8. Error porcentual

Finalmente se obtuvo el error porcentual de los resultados de las frecuencias que se calcularon para los campos magnéticos antes mencionados de 1.5, 3 y 7 T, considerando solamente las frecuencias del orden de MHz, para ello, se trabajó con la expresión 3.32.

$$Error\ porcentual = \left| \frac{Valor\ real - Valor\ estimado}{Valor\ real} \right| \times 100 \quad (3.32)$$

Se obtuvieron los resultados que se muestran en 3.2

MRI	Error porcentual
1.5 T	0.3 %
3 T	0.078 %
7 T	0.047 %

Tabla 3.2: Error porcentual correspondiente a los aparatos de 1.5, 3 y 7 T.

Capítulo 4

Conclusiones y discusiones

Se logró romper la degeneración de los niveles de energía, como se muestra en la Figura 3.2, a partir del quinto, sexto y séptimo decimal las energías comienzan a variar, podría parecer que dichos cambios son insignificantes, sin embargo, son comparables con la energía que proviene de los pulsos de radiofrecuencia dada por 3.26, ya que tiene el mismo orden de magnitud.

De las tablas que se muestran en los apéndices, podemos observar que solo hay dos posibles diferencias de energía y frecuencias entre las probables transiciones de estado. La mayor frecuencia que se observa tiene ordenes de THz y esta corresponde a las transiciones entre los estados base (como estado inicial) y los primeros estados excitados (como estado de transición o final), sin embargo, para aparatos de resonancia magnética que trabajan con campos magnéticos constantes de 1.5, 3 y 7 T (como el valor del campo magnético constante representativo del aparato de resonancia magnética que se consideró para realizar los cálculos), las frecuencias correspondientes son de 64, 128 y 297 MHz respectivamente [13], por lo tanto, el aparato no está diseñado para detectar frecuencias con ordenes de THz.

Las frecuencias calculadas fueron de 64.2, 128.1 298.4 MHz y corresponden a las transiciones que pueden ocurrir entre los primeros estados excitados, frecuencias que coinciden con la emitida por un aparato de resonancia magnética de 1.5, 3 y 7 T. Considerando que las emisiones de pulso de radiofrecuencia no son exactas, si no que la emisión está en un intervalo de frecuencias entorno a una frecuencia principal, se puede concluir que la frecuencia obtenida es cercana a la esperada, por lo tanto, esto puede interpretarse como que el modelo simplificado con el que se trabajó proporciona resultados óptimos.

Para trabajo futuro, se puede considerar modificar el modelo utilizado para el cálculo de los resultados, ya que existen artículos [16] donde se concluye que la molécula de agua sufre cambios significativos al interaccionar con campos magnéticos, cambios como la unión de nuevos hidrógenos a ella, por lo tanto, sería interesante considerarlos y analizar los resultados comparandolos con los datos reportados.

Apéndice A

Momento angular total

En la siguiente tabla se muestran los posibles momentos angulares totales y los estados que corresponden a dichos valores.

$J = 0$	$J = 1$	$J = 2$
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$
$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$
$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$
$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	
	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	
	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	
	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	
	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	
	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	
	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	

Tabla A.1: Momentos angulares totales posibles correspondientes a cada estado, considerando el estado base y el primer estado excitado.

Apéndice B

Tablas correspondientes a 1.5 T

Las siguientes tablas muestran las diferencias de energía y frecuencias necesaria para que surjan las transiciones de estados posibles para un aparato de resonancia magnética de 1.5 T.

Estado inicial ($J = 0$)	Estado de transición ($J = 1$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454032	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454023	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454013	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454032	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454023	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454013	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz

Tabla B.1: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 0$ y el final $J = 1$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 1.5 T.

Estado inicial ($J = 1$)	Estado de transicion ($J = 0$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz

Tabla B.2: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 1$ y el final $J = 0$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 1.5 T

Tablas correspondientes a 1.5 T

Estado inicial ($J = 1$)	Estado de transicion ($J = 1$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz

Tabla B.3: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 1$ y el final $J = 1$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 1.5 T

Estado inicial ($J = 1$)	Estado de transicion ($J = 2$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz

Tabla B.4: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 1$ y el final $J = 2$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 1.5 T

Tablas correspondientes a 1.5 T

Estado inicial ($J = 2$)	Estado de transicion ($J = 1$)	Diferencia de energ�a (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz

Tabla B.5: Diferencias de energ a entre los posibles estados de transici n al tener el estado inicial $J = 2$ y el final $J = 1$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 1.5 T

Estado inicial ($J = 2$)	Estado de transicion ($J = 2$)	Diferencia de energ�a (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	64.2 MHz

Tabla B.6: Diferencias de energ a entre los posibles estados de transici n al tener el estado inicial $J = 2$ y el final $J = 2$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 1.5 T

Apéndice C

Tablas correspondientes a 3 T

Las siguientes tablas muestran las diferencias de energía y frecuencias necesaria para que surjan las transiciones de estados posibles para un aparato de resonancia magnética de 3 T.

Estado inicial ($J = 0$)	Estado de transición ($J = 1$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454032	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454023	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454013	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454032	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454023	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454013	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz

Tabla C.1: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 0$ y el final $J = 1$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 3 T

Estado inicial ($J = 1$)	Estado de transicion ($J = 0$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz

Tabla C.2: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 1$ y el final $J = 0$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 3 T

Tablas correspondientes a 3 T

Estado inicial ($J = 1$)	Estado de transicion ($J = 1$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz

Tabla C.3: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 1$ y el final $J = 1$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 3 T

Estado inicial ($J = 1$)	Estado de transicion ($J = 2$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	1.1 THz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz

Tabla C.4: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 1$ y el final $J = 2$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 3 T

Tablas correspondientes a 3 T

Estado inicial ($J = 2$)	Estado de transicion ($J = 1$)	Diferencia de energ�a (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz

Tabla C.5: Diferencias de energ a entre los posibles estados de transici n al tener el estado inicial $J = 2$ y el final $J = 1$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 3 T

Estado inicial ($J = 2$)	Estado de transicion ($J = 2$)	Diferencia de energ�a (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$5,29777793 \times 10^{-7}$	128.1 MHz

Tabla C.6: Diferencias de energ a entre los posibles estados de transici n al tener el estado inicial $J = 2$ y el final $J = 2$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 3 T

Apéndice D

Tablas correspondientes a 7 T

Las siguientes tablas muestran las diferencias de energía y frecuencias necesaria para que surjan las transiciones de estados posibles para un aparato de resonancia magnética de 7 T.

Estado inicial ($J = 0$)	Estado de transición ($J = 1$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454032	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454023	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454013	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454032	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454023	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454013	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz

Tabla D.1: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 0$ y el final $J = 1$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 7 T.

Estado inicial ($J = 1$)	Estado de transicion ($J = 0$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454129	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454119	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz

Tabla D.2: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 1$ y el final $J = 0$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 7 T

Tablas correspondientes a 7 T

Estado inicial ($J = 1$)	Estado de transicion ($J = 1$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz

Tabla D.3: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 1$ y el final $J = 1$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 7 T

Estado inicial ($J = 1$)	Estado de transicion ($J = 2$)	Diferencia de energía (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz

Tabla D.4: Diferencias de energía entre los posibles estados de transición al tener el estado inicial $J = 1$ y el final $J = 2$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 7 T

Tablas correspondientes a 7 T

Estado inicial ($J = 2$)	Estado de transicion ($J = 1$)	Diferencia de energ�a (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; -, +\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz

Tabla D.5: Diferencias de energ a entre los posibles estados de transici n al tener el estado inicial $J = 2$ y el final $J = 1$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 7 T

Estado inicial ($J = 2$)	Estado de transicion ($J = 2$)	Diferencia de energ�a (eV)	Frecuencia
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 0, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	0.00454138	1.1 THz
$ 1, 0; -1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; -1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 0, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 0, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz
$ 1, 0; 1, 0; +, +\rangle$	$ 1, 0; 1, 0; +, -\rangle$	$2,657 \times 10^{-7}$	298.4 MHz

Tabla D.6: Diferencias de energ a entre los posibles estados de transici n al tener el estado inicial $J = 2$ y el final $J = 2$ y frecuencia necesaria para que dichas transiciones ocurran para un MRI de 7 T

Bibliografía

- [1] “Introduction”. En: *Medical Image Analysis*. John Wiley & Sons, Ltd, 2011. Cap. 1, págs. 1-22. ISBN: 9780470918548. DOI: <https://doi.org/10.1002/9780470918548.ch1>. eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/9780470918548.ch1>. URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9780470918548.ch1>.
- [2] Jing Yuan y Yi-Xiang J. Wang. “MRI Physics, Image Reconstruction and Analysis”. En: *T1rho MR Imaging Principle, Technology and Application*. Taylor & Francis Group, 2016. Cap. 1, págs. 1-21. ISBN: 9781482298895.
- [3] E. Jéquier y F. Constant. “Water as an essential nutrient: the physiological basis of hydration”. En: *European Journal of Clinical Nutrition* 64.2 (2010), págs. 115-123. ISSN: 1476-5640. DOI: 10.1038/ejcn.2009.111. URL: <https://doi.org/10.1038/ejcn.2009.111>.
- [4] Mark M. Benjamin. “The structure of water molecules and interactions among them”. En: *Water Chemistry*. Waveland Press, 2014. Cap. 1, págs. 3-6. ISBN: 9781478623083.
- [5] “Enlace covalente”. En: *Química la ciencia central*. por Pearson Educación de México, S.A. de C.V., 2009. Cap. 8, págs. 305-306. ISBN: 9786074420210.
- [6] Nadine Barrie Smith y Andrew Webb. “Magnetic resonance imaging (MRI)”. En: *Introduction to medical imaging: Physics, engineering and clinical applications*. Cambridge University Press, 2011. Cap. 5, págs. 204-228. ISBN: 9780521190657.
- [7] T. Ullrich et al. “Magnetic resonance imaging of the prostate at 1.5 versus 3.0T: A prospective comparison study of image quality”. En: *European Journal of Radiology* 90 (2017), págs. 192-197. ISSN: 0720-048X. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ejrad.2017.02.044>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0720048X17300967>.
- [8] Brian L. Edlow et al. “7 Tesla MRI of the ex vivo human brain at 100 micron resolution”. En: *Scientific Data* 6.1 (2019), pág. 244. ISSN: 2052-4463. DOI: 10.1038/s41597-019-0254-8. URL: <https://doi.org/10.1038/s41597-019-0254-8>.
- [9] Paul G. Hewitt. “La naturaleza atómica de la materia”. En: *Física conceptual*. Pearson Educación de México, 2007. Cap. 11, págs. 215-216. ISBN: 9789702607953.
- [10] David Halliday Jearl Walker y Robert Resnick. “Rolling, torque, and angular momentum”. En: *Fundamentals of physics*. John Wiley y Sons, 2011. Cap. 11, pág. 305. ISBN: 9781118230725.
- [11] J.J. Sakuari y Jim Napolitano. “Fundamental concepts”. En: *Modern quantum mechanics*. Addison-Wesley, 2011. Cap. 1, pág. 3. ISBN: 9780805382914.

- [12] Abhishek Gupta, Timothy Stait-Gardner y William S. Price. “Is It Time to Forgo the Use of the Terms “Spin–Lattice” and “Spin–Spin” Relaxation in NMR and MRI?” En: *The Journal of Physical Chemistry Letters* 12.27 (2021), págs. 6305-6312. DOI: 10.1021/acs.jpclett.1c00945. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.1c00945>.
- [13] D. Hernandez y Kim K.N.. “A Review on the RF Coil Designs and Trends for Ultra High Field Magnetic Resonance Imaging.” En: *Investig Magn Reson Imaging*. 24.3 (2020), págs. 95-122. DOI: 10.13104/imri.2020.24.3.95. URL: <https://doi.org/10.13104/imri.2020.24.3.95>.
- [14] Nouderine Zettili. “Quantum Mechanics Concepts and Applications”. En: *Fine Structure and the Anomalous Zeeman Effect*. John Wiley y Sons, Ltd, 2009. Cap. 9, págs. 499-507. ISBN: 9780470026786.
- [15] J. L. Aguilar Cuevas C. H. Zepeda Fernández y E. Moreno Barbosa. “Proton wave function in a water molecule: breakdown of degeneracy caused by interactions with the magnetic field of a magnetic resonance imaging device”. En: *Revista Mexicana de Física* 68 (2022). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ejrad.2017.02.044>.
- [16] Ran Cai et al. “The effects of magnetic fields on water molecular hydrogen bonds”. En: *Journal of Molecular Structure* 938.1 (2009), págs. 15-19. ISSN: 0022-2860. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2009.08.037>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022286009005559>.