



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

**NIVELES DE ENERGÍA DEL ÁTOMO DE HIERRO PARA DESCRIBIR
SU COMPORTAMIENTO EN UN CAMPO MAGNÉTICO NO
CONSTANTE**

Tesis presentada al

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

Maestro en Ciencias

por

Brian Dalí Arduser Villanueva

Asesorado por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Dr. Javier Miguel Hernández López

Puebla Pue.
Diciembre de 2024



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

**NIVELES DE ENERGÍA DEL ÁTOMO DE HIERRO PARA DESCRIBIR
SU COMPORTAMIENTO EN UN CAMPO MAGNÉTICO NO
CONSTANTE**

Tesis presentada al

Posgrado en Física Aplicada

como requisito parcial para la obtención del grado de

Maestro en Ciencias

por

Brian Dalí Arduser Villanueva

Asesorado por

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández

Dr. Javier Miguel Hernández López

Puebla Pue.
Diciembre de 2024

Título: Niveles de energía del átomo de hierro para describir su comportamiento en un campo magnético no constante

Estudiante: BRIAN DALÍ ARDUSER VILLANUEVA

COMITÉ

Dr. Eduardo Moreno Barbosa
Presidente

Dr. Héctor Novales Sánchez
Secretario

Dr. Jorge Velázquez Castro
Vocal

Dr. Lucio Fidel Rebolledo Herrera
Suplente

Dr. Cristian Heber Zepeda Fernández
Asesor

Dr. Javier Miguel Hernández López
Asesor

Índice general

Agradecimientos	VII
Dedicatoria	IX
Resumen	XI
1. El fenómeno de Resonancia Magnética Nuclear (NMR)	1
1.1. Arreglo NMR	1
1.2. El fenómeno de NMR	1
1.2.1. NMR	2
1.3. Magnetización: El momento magnético y el campo	3
1.4. Relajación	5
1.4.1. Cuadros de referencia	5
1.4.2. Tipos de relajación	5
1.4.3. El pulso de RF y la relajación	6
1.4.4. El modelo uniforme	6
2. Aplicaciones	9
2.1. NMR e Imagen por Resonancia Magnética (MRI)	9
2.2. Bobinas de Radiofrecuencia (RF)	9
2.2.1. Gradientes de campo magnético	9
2.2.2. Inducción magnética	10
2.3. Las señales captadas: Formas, procesamiento, procedimientos	10
3. Teoría de los modelos a emplear	13
3.1. Caso del hidrógeno	13
3.2. El efecto Zeeman	14
3.2.1. Acoplamiento espín-órbita	14
3.2.2. Corrección relativista	15
3.2.3. Estructura fina	15
4. Modelos y metodología	17
4.1. El hierro	17
4.2. Átomo hidrogenoide	18
4.3. El campo magnético	20
4.4. Analogía Efecto Zeeman	20

4.4.1. Energías	25
5. Discusión y conclusiones	29
A. Correcciones de energía, diferencias de energía y frecuencias asociadas	33
B. Los estados y su base	37
C. Constantes y relaciones	39
Bibliografía	41

Agradecimientos

Gracias al CONAHCYT por apoyarme para poder desarrollar y aprender de este trabajo.

Gracias a mi comité tutorial: los doctores Eduardo Moreno, Héctor Novales Jorge Velázquez y Lucio Rebolledo; sus observaciones son lo que moldearon mi trabajo y entendimiento.

Gracias a mis asesores: los doctores Heber Zepeda y Javier Hernández, por todas las dudas que me han escuchado y ayudado a resolver; y por el conocimiento que adquirí de ellos en mi formación científica y humana.

Gracias a mis amigos, a los de siempre que me siguen desde lejos y a los nuevos que me acompañan desde un costado. Ah, también gracias a Luis Pastor por los tacos pastorizados y la leche al pasteur.

Dedicatoria

A Claudia, mi mamá; a Michelle, mi hermana; a Dania, mi novia; a Eréndira, mi abuelita; y a muchos otros nombres, mi familia, de sangre y otros sin parentesco.

A mi mamá, que me ha enseñado acerca de la determinación y la dedicación; y es quien más fe me ha tenido y quien más porras me ha echado.

A mi hermana, quien ha visto mis batallas y progresos y yo los suyos; por su compañía y apoyo.

A mi novia, con quien he ido de la mano en esta aventura por la vida.

A mi abuelita, por las conversaciones sobre el aprendizaje, sobre la lectura, sobre cultivarse y por mostrarme su forma de pensar; a quien estimo por su sabiduría notoria hasta en su forma de hablar, que desde que tengo memoria me impresiona y admiro; gracias a lawelita <3.

Estas personas son el apoyo emocional y la motivación para lo que uno hace (sobre todo «La Biuri»); y que con tal diversidad de pensares forman a los locos que en nuestras ocurrencias nos atrevemos a siquiera intentar entender las componentes de la existencia, que aunque en ese universo este trabajo converge a cero prácticamente de manera instantánea, el proceso satisface a la intriga.

Resumen

En este trabajo se presenta un desarrollo físico-matemático que puede aportar a las áreas de medicina y materiales, en específico a la Imagen por Resonancia Magnética y a la Resonancia de Espín de Electrones (MRI y ESR, por sus siglas en inglés, respectivamente). En estas áreas existe una complicación en el estudio del hierro (el cual existe en diversos medios materiales, inclusive por ejemplo en el cuerpo humano), debido a que la reacción por parte del átomo de hierro ante una inducción de energía es casi nula comparado a otros medios (por ejemplo agua) y por tanto no detectable de forma directa.

Los principales resultados del presente trabajo son la obtención de los estados y el rompimiento de los niveles de energía de un electrón en la capa de valencia del átomo de hierro, obtenidos mediante una analogía del efecto Zeeman, representados por dos ecuaciones principales que consideran a un valor de campo magnético variable y los posibles estados del electrón. También se establecen las diferencias de energía entre los posibles estados generales. Los resultados se ejemplifican para un valor de campo magnético representativo de 1T y se obtienen las diferencias de energía y frecuencia respectivas. Se anexan los mismos tipos de datos para distintos valores de campos magnéticos (3, 5 y 10 Teslas).

La finalidad es mostrar las frecuencias resonantes de modo que, según el aparato de resonancia a emplear, se pueda seleccionar la más adecuada, tal que induzca la mayor energía absorbible por los electrones de un medio material que contenga hierro, para que la señal emitida al momento de relajarse incremente lo más posible. Con esto se discute la viabilidad de corroborar experimentalmente; en general las frecuencias obtenidas mediante los resultados generales son consistentes con los rangos de funcionamiento de diversos aparatos de resonancia y antenas de emisión/detección, así que se espera que los resultados se puedan verificar experimentalmente.

Capítulo 1

El fenómeno de Resonancia Magnética Nuclear (NMR)

En general, los fenómenos de Resonancia Magnética Nuclear y de Resonancia de Espín de Electrones (ESR) comparten aspectos técnicos e inclusive se puede estudiar su interacción [1] [2]. A continuación se explican la base teórica de la NMR y los conceptos asociados a la experimentación que la emplea.

1.1. Arreglo NMR

En la figura 1.1 se muestra un esquema de un aparato de NMR; entre sus componentes esenciales incluyen las bobinas de Helmholtz. Estas bobinas producen el campo transversal B_1 , que será el transmisor pulsos y también actúan como detectores del campo magnético producido por los espines excitados. Típicamente se emplean pulsos cortos e intensos de radiofrecuencia (RF) que excitan un rango amplio de frecuencias de resonancia en los medios (espines) de modo que permite las transiciones entre posibles energías. Esto además permite un escaneo rápido debido a que no es necesario esperar a que los espines excitados regresen al estado base; solo se espera a que se relajen en el periodo entre cada pulso de excitación. Como ejemplo, en un experimento simple de NMR de un pulso, se inicia con un pulso de RF breve (alrededor de diez micro-segundos).

1.2. El fenómeno de NMR

Analogía de resonancia magnética: Una analogía [3] para comprender qué ocurre con los momentos de los protones dentro del campo magnético es imaginar a cada uno como un pequeño imán. Los imanes oscilan alrededor de la dirección del campo para alinearse y para un solo imán eventualmente se alineará. Cuando se considera al ensamble de imanes (o compases), en un medio material (por ejemplo en agua) colisionan entre ellos al intentar cada uno alinearse con el campo, y en un tiempo suficientemente corto no podrán alinearse. A pesar de eso, habrá una tendencia a alinearse, entonces la magnetización resultante (neta) de todos los imanes aleatoriamente orientados será, aunque leve, en la dirección del campo. Si se adecúa la analogía, una diferencia entre los imanes y los protones es que los imanes pasan por la dirección del campo magnético, mientras

El fenómeno de Resonancia Magnética Nuclear (NMR)

1.2 El fenómeno de NMR

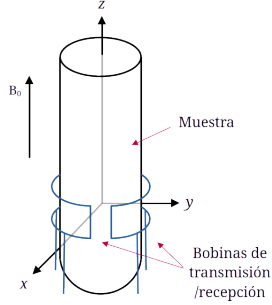


Figura 1.1: Esquema de un arreglo para resonancia magnética nuclear.

que los protones *preceden* alrededor de la dirección del campo. Además, la frecuencia de precesión depende únicamente del campo magnético, mientras que la frecuencia de vibración del compás depende también de la amplitud a la que oscila, cuando no son pequeñas sus oscilaciones, debido a su paso por el eje del campo.

1.2.1. NMR

Los núcleos tienen la propiedad intrínseca del espín, el momento angular total del núcleo es llamado el espín nuclear, constituido por la suma de los momentos angulares orbitales y de espín de cada nucleón (protón, neutrón) [4]. Entonces, cada uno tendrá un momento angular neto talque:

$$j_i = l_i + s_i, \quad (1.1)$$

y entonces el espín nuclear será:

$$J = \sum_i j_i = \sum_i (l_i + s_i) = L + S. \quad (1.2)$$

La magnitud del momento angular orbital L satisface:

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \quad (1.3)$$

con $l = 0, 1, 2, \dots$. Su componente a lo largo del eje z es:

$$L_z = m_l \hbar, \quad (1.4)$$

donde m_l va desde $-l$ hasta l . Para el momento angular de espín S , análogamente, su magnitud satisface:

$$S^2 = s(s+1)\hbar^2, \quad (1.5)$$

con $s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$; y su componente z :

$$s_z = m_s \hbar, \quad (1.6)$$

Para mostrar la propiedad de la resonancia magnética, el núcleo necesita un valor de s distinto de cero. En general, los núcleos del material que se encuentre dentro del campo necesitan un número impar de neutrones debido a que su momento angular total sería cero si fuera par. Debido a que el

El fenómeno de Resonancia Magnética Nuclear (NMR)

1.3 Magnetización: El momento magnético y el campo

protón es un fermión porque tiene un valor de $s = 1/2$, tendrá dos posibles valores para $S_z : \pm\hbar/2$. Si las eigenfunciones que describen estos dos estados se designan como $|+1/2\rangle$ y $|-1/2\rangle$, la ecuación de eigenvalores que describe el estado de espín observado puede plantearse como:

$$S_z |m_s\rangle = m_s |m_s\rangle. \quad (1.7)$$

También se pueden plantear las proyecciones transversales en x y en y en términos del estado $|m_s\rangle$.

Cuando los momentos magnéticos de los núcleos interactúan con el campo magnético, la absorción y emisión de fotones con frecuencias adecuadas permite las transiciones entre los estados de energía posibles.

Como el protón tiene carga eléctrica, genera una espira de corriente, lo que resulta en la generación del momento magnético μ . Dado que también tiene masa, genera un momento angular J al girar. El momento magnético de espín está relacionado al momento angular de espín de la siguiente forma y es análogo para un momento J :

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S}, \quad (1.8)$$

donde γ es conocida como la razón giromagnética, cuyo valor varía según la partícula; por ejemplo, $\gamma/2\pi = 42,57 \text{ MHz/T}$ para protones. Al introducirse el momento magnético en un campo magnético B_z a lo largo del eje z , se tendrá una energía dada por:

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (1.9)$$

1.3. Magnetización: El momento magnético y el campo

Antes de introducir el campo magnético, el espín total del material es cero debido a la aleatoriedad de las orientaciones de cada núcleo, entonces la magnetización total también es cero. Al introducir un campo magnético externo, los ejes de precesión de los protones tenderán a alinearse al campo magnético y tendrán dos estados; el primer estado es aquel donde el eje de precesión es paralelo y en el mismo sentido que el campo magnético, y tiene menor energía que el anti-paralelo, aquel con sentido contrario al campo. Con estos dos estados, la magnetización total será a lo largo del campo magnético, sin componente en el plano transversal, debido al gran número de protones presentes y la aleatoriedad de sus fases. Conforme el campo magnético sea más intenso, el número de protones que no se alinean por completo tiende a cero:

$$M = cB_0/T. \quad (1.10)$$

Magnetización: Para la construcción de un operador hamiltoniano, se puede deducir del electromagnetismo clásico con la energía de un momento magnético colocado en un campo magnético [4]; el momento magnético μ de los núcleos es proporcional al momento angular de espín:

$$\mu = \gamma \hat{S}, \quad (1.11)$$

Al introducirse en el campo magnético $\vec{B}$, su estado base se degenera y la energía será:

$$E = -\mu \cdot \vec{B}, \quad (1.12)$$

Sustituida la μ en la ecuación anterior y al considerar que el campo magnético está orientado en la dirección z , el hamiltoniano es:

$$H = -\hbar\gamma S_z B_z, \quad (1.13)$$

El fenómeno de Resonancia Magnética Nuclear (NMR)

1.3 Magnetización: El momento magnético y el campo

Como H está en términos de S_z , los eigenvalores de S_z también están relacionados con H .

$$H|m_s\rangle = -\hbar\gamma S_z B_z|m_s\rangle = -\hbar\gamma B_z m_s|m_s\rangle, \quad (1.14)$$

de modo que las energías son:

$$E = -\hbar\gamma B_z m_s, \quad (1.15)$$

Así que la diferencia de energías es:

$$\Delta E = E(m_s = -1/2) - E(m_s = 1/2) = \hbar\gamma B_z, \quad (1.16)$$

La transición entre los dos estados, típicamente llamados "espín-arriba", de menor energía, y "espín-abajo", de mayor energía) representa un cambio de energía; a esto se le llama "Zeeman splitting" (rompimiento Zeeman), que muestra que conforme la intensidad del campo magnético incrementa, la diferencia de energía entre los estados aumenta. Se puede inducir una transición entre los estados mediante una absorción o emisión de un fotón tal que su diferencia de energía sea:

$$\Delta E = \hbar\gamma B_z = \hbar\omega, \quad (1.17)$$

de lo cual se obtiene la ecuación de Larmor (ω_0), la cual gobierna el fenómeno de la NMR:

$$\omega_0 = \gamma B_0, \quad (1.18)$$

con $B_0 = B_z$. Ésta es la frecuencia de resonancia, distinta para cada tipo de núcleo. Con este dato se conoce la energía apropiada de la onda electromagnética para irradiar en el sistema de modo que aquellos protones en estados de menor energía transicionen al estado de mayor energía. Este desarrollo representa lo que le ocurre al espín de un núcleo. Para extenderlo a un ensamble de espines se define un eigenestado Ψ , el cual es combinación lineal de los posibles estados de espín para un solo núcleo:

$$|\Psi\rangle = \sum_{m_s} a_{m_s} |m_s\rangle, \quad (1.19)$$

y el valor de expectación es:

$$\langle\Psi|S_z|\Psi\rangle = \sum_{m_s} |a_{m_s}|^2 m_s, \quad (1.20)$$

donde $|a_{m_s}|^2$ representa la probabilidad de encontrar a un solo núcleo en el estado m_s . Para el caso del protón, el estado del ensamble es la combinación de los estados para espín arriba y espín abajo.

$$|\Psi\rangle = a_{+\frac{1}{2}} \left|+\frac{1}{2}\right\rangle + a_{-\frac{1}{2}} \left|-\frac{1}{2}\right\rangle. \quad (1.21)$$

Se emplea de la estadística de Boltzmann la tasa de población de ambos estados de energía,

$$\frac{\left|a_{+\frac{1}{2}}\right|^2}{\left|a_{-\frac{1}{2}}\right|^2} = \exp\left(\frac{-\Delta E}{k_B T}\right) = \exp\left(\frac{\hbar\gamma B_0}{k_B T}\right), \quad (1.22)$$

de la cual se puede notar que, conforme la temperatura aumenta, la proporción tiende a ser igual a 1. Para cada estado, a temperatura ambiente la tasa de población para 10^{25} protones es de cien mil a cien mil seis, o sea, una diferencia de 6×10^{-5} por cada Tesla del campo magnético.

El fenómeno de Resonancia Magnética Nuclear (NMR)

1.4 Relajación

Conforme la energía aumenta, los protones tienden a alinearse en el estado $a_{+\frac{1}{2}}$, contrario a que si la energía disminuye, tenderán a encontrarse en el estado $a_{-\frac{1}{2}}$. Debido a que $k_B T \sim \hbar \gamma B_0$ se expande la exponencial a primer orden,

$$\frac{\left|a_{+\frac{1}{2}}\right|^2}{\left|a_{-\frac{1}{2}}\right|^2} \approx 1 - \frac{\hbar \gamma B_0}{k_B T} \quad (1.23)$$

y se obtiene la diferencia del número de espines respecto a los dos posibles estados de espín.

$$\left|a_{+\frac{1}{2}}\right|^2 - \left|a_{-\frac{1}{2}}\right|^2 \approx \left|a_{+\frac{1}{2}}\right|^2 \cdot \frac{\hbar \gamma B_0}{k_B T} \approx \frac{\hbar \gamma B_0}{2k_B T}. \quad (1.24)$$

La magnitud de la magnetización de un voxel que contiene una densidad ρ de núcleos está dada por:

$$M = \frac{\rho \hbar^2 \gamma^2 B_0}{4k_B T}, \quad (1.25)$$

donde se multiplicó la densidad en el voxel por el momento magnético de los núcleos ($\mu_z = \pm \hbar \gamma / 2$) y por la diferencia del número de estados; y tiene la dirección del campo magnético principal.

1.4. Relajación

1.4.1. Cuadros de referencia

Se plantean dos sistemas de coordenadas cartesianas. El estacionario (de laboratorio) y uno que rota respecto al eje z a la misma frecuencia ω que el campo B_1 (el de rotación), lo cual resulta en que el vector de magnetización parece estacionario mientras se mantenga la frecuencia de rotación a la par que el pulso inducido.

1.4.2. Tipos de relajación

Se definen los tiempos de relajación T_1 (longitudinal) y T_2 (transversal).

La relajación T_1 : indica el tiempo para llegar al 63 % del valor de equilibrio de la magnetización neta longitudinal y está asociado a las interacciones espín-lattice. Los valores de T_1 aumentan a la par del campo magnético.

La relajación T_2 : es la pérdida de magnetización transversal debido al desfase de los espines al preceder en el plano xy . Indica el tiempo para que las fases de las componentes en el plano transversal al campo magnético estén netamente desfasadas; esto está asociado a las interacciones espín-espín. T_2 termina cuando el decaimiento llega al 37 % de su valor de magnetización transversal. El campo magnético necesita ser lo más uniforme posible porque afecta el desfase de los protones vecinos; esencialmente un volumen de objetos vecinos a otro volumen percibirán un campo local distinto y precederán a una frecuencia distinta, lo que afecta a los espines entre sí. Mientras menos homogéneo, por ejemplo, debido a la construcción del aparato, más notorio el desfase. Todas las interacciones de los espines causan una relajación T_2 pero solo las interacciones de los espín con el medio causan la relajación T_1 , por esto es que T_2 siempre es menor a T_1 . A diferencia del T_1 , en este caso no hay pérdida de energía por desfasarse, sino solo intercambio entre ellos. Ambos

El fenómeno de Resonancia Magnética Nuclear (NMR)

1.4 Relajación

tiempos varían para distintos materiales/tejidos. Estos cambios son inducidos por los pulsos de radiofrecuencia (RF) mediante las bobinas de RF, con ondas EM cuyos campos magnéticos son transversales al principal, los cuales reorientan, según se necesite (puede variar en ángulo pero es típicamente de 90°), la magnetización neta desde el eje z hasta el plano xy . Las relajaciones ocurren posterior al pulso, conforme las precesiones de los protones reducen sus componentes en el plano xy hasta su posición de equilibrio; en ese momento se registran los datos, se da un margen de tiempo para que el sistema se relaje por completo y se repite el proceso.

1.4.3. El pulso de RF y la relajación

Cuando el ensamble de espines reciben un campo de RF a la frecuencia apropiada (la de Larmor), los espines precederán alrededor de este campo que rota [3]. La emisión del pulso de RF está en el orden de micro-segundos. A 90° el pulso reorienta al vector de magnetización al plano xy , y un pulso de 180° invierte la magnetización respecto a su posición de equilibrio [4]. Después de un pulso de 90° , la componente longitudinal (en z) de la magnetización es cero. Debido a que la tasa de giro del sistema que rota es la frecuencia del pulso B_1 , B_1 es estacionario en ese sistema, entonces únicamente un campo estático B_1 en el eje y está presente en el sistema que rota. Los espines precederán alrededor de este campo así como precedían al B_0 antes del pulso. Entonces

$$\omega_1 = \gamma B_1. \quad (1.26)$$

Qué tan extensa es la precesión alrededor de B_1 depende de la intensidad del campo $B_1(\omega_1)$ y el tiempo τ durante el cual se aplica el pulso. Un pulso con esas características inclinará la magnetización en un ángulo de

$$\beta = \omega_1 \tau. \quad (1.27)$$

Ejemplo de rotación debido a un pulso: La máxima señal ocurre cuando $\beta = 90^\circ$. Como el pulso viaja en y , la rotación de la magnetización pasará del eje z al eje x . El resultado neto de un pulso de 90° es trasladar la magnetización desde el eje z al plano xy .

El fenómeno de detección, en resumen: antes de ser irradiados, la pequeña mayoría está en un estado de menor energía; se irradian y algunos transicionan al estado de mayor energía; al dejarse de irradiar, los estados que subieron de energía emiten el excedente y regresan al estado de menor energía.

1.4.4. El modelo uniforme

Una ilustración más adecuada sobre lo que ocurre en estos fenómenos es la representada por el modelo uniforme, también conocido como el modelo de Bloch [5]. El modelo uniforme se constituye de la siguiente forma: un ensamble de momentos magnéticos en un campo magnético se representa a partir de un punto en común y cada uno toma una dirección aleatoria. Cada momento precede entorno al campo magnético con su respectivo ángulo. Al introducir un pulso de RF, cada momento se reorienta según la inclinación debido al pulso y como resultado, el ensamble de momentos se reorienta como si fuese un solo objeto el que se rotó. De forma similar, al relajarse cada momento, el comportamiento neto es el mismo: si cada momento se relaja con cierto ángulo, todo el ensamble lo hará. La figura 1.2 ejemplifica el efecto de un pulso de 90° en un ensamble de momentos según este modelo.

El fenómeno de Resonancia Magnética Nuclear (NMR)
1.4 Relajación

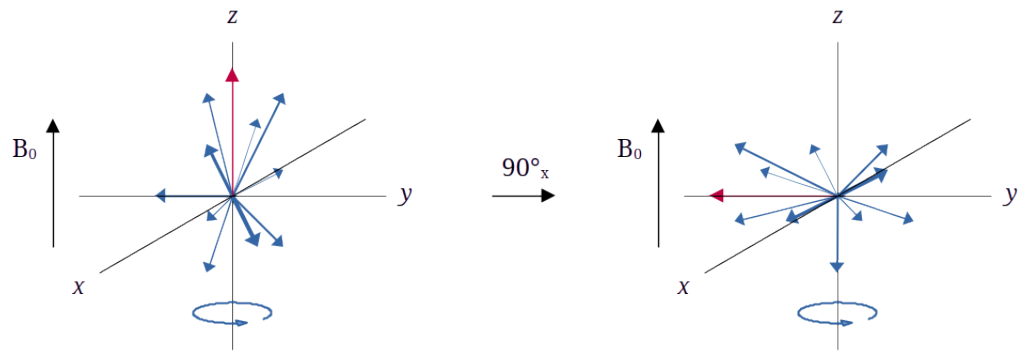


Figura 1.2: Efecto de un pulso de 90° según el Modelo Uniforme.

Capítulo 2

Aplicaciones

2.1. NMR e Imagen por Resonancia Magnética (MRI)

La Resonancia Magnética Nuclear (NMR) es un fenómeno físico en donde ciertos núcleos atómicos (aquellos con un número impar de protones o neutrones) son colocados en un campo magnético intenso y puede absorber energía, selectivamente, de ondas electromagnéticas generalmente en el rango de radiofrecuencias (RF)[4]. Una vez los núcleos absorben la energía, el excedente retorna a la vecindad mediante un proceso conocido como relajación, la cual es acompañada por una variación magnética local que induce una señal en una antena receptora, también llamadas bobinas de RF, para procesamiento digital y finalmente obtener una imagen o realizar un análisis espectral.

El proceso está compuesto por las siguientes partes:

- Preparación: Antes del pulso, hay equilibrio térmico y únicamente el campo B_0 estático.
- Excitación: El campo oscilatorio B_1 excita a los espines.
- Detección: Los espines excitados preceden bajo B_0 , lo que genera el FID (Free Induction Decay). La transformada de Fourier del FID resulta en el espectro.

La técnica de Imagen por Resonancia Magnética (MRI) aprovecha el fenómeno de NMR; es de alta resolución y no invasiva; permite visualizar tejidos blandos comparado con rayos-x y no ioniza. Típicamente aprovecha los núcleos de hidrógeno; consta de un campo magnético intenso y constante y un sistema computacional para procesar y obtener imágenes. El equipo para MRI consta típicamente de un imán principal, desde décimas de Teslas hasta 7 [4] [6]; bobinas de gradiente de campo magnético en direcciones x , y , z ; bobinas de radiofrecuencia (RF), de transmisión y/o recepción; sistema de controles; y rellenos/soportes (shimming).

2.2. Bobinas de Radiofrecuencia (RF)

2.2.1. Gradientes de campo magnético

Si varios voxels (volúmenes de partículas a observar) se encuentran en distintos campos magnéticos, se puede elegir a cuáles excitar al variar la frecuencia de transmisión de la antena. Un gradiente de campo magnético permite que los núcleos perciban un campo distinto, de modo que

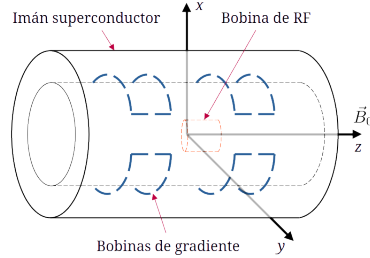


Figura 2.1: Esquema de un arreglo para MRI.

cada posición en el espacio tendrá un ancho de banda de frecuencias preferentes para resonar los núcleos de forma selectiva; esto es lo que forma en la imagen las intensidades detectadas con sus respectivas ubicaciones [7]. Para que las señales sean dependientes de la posición, se aplican los gradientes de modo que el campo magnético B varíe linealmente como función de la posición:

$$B = B_0 + G_x x + G_y y + G_z z = B_0 + \vec{G} \cdot \vec{r}. \quad (2.1)$$

Para ejemplificar, en la figura 2.1 se muestra un esquema del aparato de MRI y las componentes que pueden producir un campo de este tipo.

2.2.2. Inducción magnética

Además de la emisión, las bobinas de RF también se utilizan para la detección [8] [7], a través de inducción de Faraday: así como un imán genera corriente en una espira al moverse, o también una espira que se mueve relativo al imán, debido a que el flujo de campo magnético que pasa por la espira cambia). La inducción que reciben proviene de la relajación del vector de magnetización, que, como se explicará posteriormente, esencialmente libera la energía absorbida debido a la interacción de los espines con los campos locales. Esto es lo que produce el cambio de flujo magnético en las bobinas y por tanto induce la corriente a detectar.

2.3. Las señales captadas: Formas, procesamiento, procedimientos

Dos voxels colocados en distintos campos magnéticos al momento de relajarse tendrán distintas frecuencias de relajación, entonces podrán diferenciarse sus señales mediante un análisis de frecuencias como el análisis de Fourier. Al estudiar esas señales de relajación, se puede obtener información sobre la densidad de objetos en el voxel, e información relacionada con el medio material mediante los parámetros de relajación [7].

El tiempo T_1 se cuenta a partir de que se envía el pulso de RF. Se le conoce al eco como un pulso de RF a 180° , de modo que conforme se desfazan las componentes transversales de la magnetización, el pulso les invierta el sentido, y vuelvan a fasarse (conocido como el eco). Las señales detectadas varían en frecuencia debido a que se encuentran en distintos puntos en el espacio, lo que altera la relajación (como se mencionó en la sección 1.4). La transformada rápida de Fourier permite observar las señales en el espacio de frecuencias con mejor nitidez.

La señal inducida en las bobinas receptoras surge del efecto conocido como Free Induction Decay (FID), que es la corriente inducida en la bobina receptora debido al campo magnético producido por los estados excitados de los espines nucleares. Esta señal se muestrea conforme evoluciona en el tiempo. La transformada de Fourier del FID resulta en el espectro normal NMR con picos de absorción en frecuencias que representan la diferencia de energía entre los estados base y los excitados.

Debido a que la detección de estas frecuencias ocurre en el sistema que rota, el origen de las frecuencias es cero en ese sistema, pero en el sistema de laboratorio es ω , la frecuencia a la que se aplica el campo B_1 .

Cortes: Algunas tomas simples para imágenes son la Sagital, donde el plano es vertical y paralelo al eje z , la Axial, donde el plano es transversal al eje z , y la Coronal, donde el plano es horizontal y paralelo al eje z .

Aplicaciones de MRI: La MRI permite estudiar la anatomía mediante los distintos contrastes, por ejemplo el flujo cardiaco, trazar las conexiones neuronales (difusión), detección de cáncer, fMRI (funcional MRI) para investigación científica y planeación quirúrgica, etc. El fMRI mide la actividad cerebral a través del monitoreo del flujo sanguíneo durante una prueba cognitiva, dado que es proporcional a la activación neuronal.

Espectro de frecuencias del pulso aplicado: El pulso puede representarse como una función armónica continua, $\cos(\omega t)$ que ha sido multiplicada por una onda cuadrada cuyo ancho es el largo del pulso (τ), entonces su transformada será la convolución de cada transformada. La transformada del coseno es una delta en $\pm\omega$. La de la onda cuadrada es la función sinc. La convolución de las dos es la sinc en $\pm\omega$. El rango de frecuencias que el pulso excita está representado por el ancho de la sinc e incrementa conforme τ decrementa. Entonces pulsos cortos tienen perfiles de excitación amplios. En el límite, un pulso infinitamente alto puede excitar todas las frecuencias.

Capítulo 3

Teoría de los modelos a emplear

3.1. Caso del hidrógeno

El electrón en un átomo de hidrógeno experimenta un potencial de Coulomb atractivo debido al protón en el núcleo, que tiene carga opuesta, dado como sigue:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.1)$$

Se utiliza la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$H\Psi(r) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(r)\right)\Psi(r) = E\Psi(r), \quad (3.2)$$

con μ la masa reducida del sistema dada por

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \quad (3.3)$$

y $\hat{p}$ el operador de momento como

$$p = -i\hbar\nabla. \quad (3.4)$$

Como el potencial es central, conviene utilizar coordenadas esféricas, así que se procede a resolver la ecuación de Schrödinger mediante separación de variables, donde la sustitución es $\Psi = R\Theta\Phi = RY$ y el laplaciano está en coordenadas esféricas. Con esto se encuentra que la solución para la parte angular $Y = \Theta\Phi$, conocido como los armónicos esféricos, está dada en parte por los polinomios asociados de Legendre, que son los siguientes:

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = NP_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}, \quad (3.5)$$

donde N es la constante de normalización dada por

$$N = \left[\frac{(2l+1)!(l-1)!}{4\pi(l+1)!} \right]^{1/2}. \quad (3.6)$$

Se encuentra que la solución para R está dada por los polinomios asociados de Laguerre, que son los siguientes:

$$R(r) = \left[\alpha^3 \frac{(n-L-1)!}{2n[(n+L)!]^3} \right]^{1/2} e^{-\alpha r/2} (\alpha r)^L L_{n-L-1}^{2L+1}(\alpha r), \quad (3.7)$$

con $\alpha = 2Z/na_0$.

Entonces, al juntar ambas soluciones dadas en 3.5 y 3.7, la solución total es:

$$\begin{aligned} \Psi(r, \theta, \phi) &= R(r)Y(\theta, \phi) \\ &= \left[\alpha^3 \frac{(n-L-1)!}{2n[(n+L)!]^3} \right]^{1/2} \left[\frac{(2l+1)!(l-1)!}{4\pi(l+1)!} \right]^{1/2} \\ &\quad \times e^{-\alpha r/2} (\alpha r)^L L_{n-L-1}^{2L+1}(\alpha r) P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (3.8) \end{aligned}$$

con los números cuánticos n, l, m , con valores $n = 1, 2, 3, \dots$; $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$; $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$. Si se especifican los valores (n, l, m) deseados, el módulo cuadrado de su función de onda Ψ describe la probabilidad de encontrar al electrón en ese lugar en ese instante.

3.2. El efecto Zeeman

Se le denomina al efecto Zeeman como el efecto de corrimiento de los niveles de energía del electrón en el átomo de hidrógeno inmerso en un campo magnético $\vec{B}$. El efecto Zeeman anómalo se diferencia del efecto Zeeman al considerar no solo al momento magnético orbital sino también al momento magnético de espín del electrón.

El efecto considera correcciones debidas principalmente a la estructura fina del átomo de hidrógeno, compuesta por dos efectos: el acoplamiento espín-órbita y la corrección relativista.

3.2.1. Acoplamiento espín-órbita

El acoplamiento espín-órbita surge debido a la interacción entre el momento magnético de espín del electrón y el campo magnético del protón. Está dada por la siguiente expresión:

$$H_{SO} = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \hat{S} \cdot \hat{L}. \quad (3.9)$$

Para un electrón del átomo de hidrógeno, $V = -e^2/r$ y $dV/dr = e^2/r^2$, entonces 3.9 resulta en

$$H_{SO} = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} \hat{S} \cdot \hat{L}. \quad (3.10)$$

Al aplicar teoría de perturbaciones a primer orden y al considerarse que los estados $|nljm\rangle$ son los eigenestados de $\hat{S} \cdot \hat{L}$, entonces el valor de expectación resulta en la energía del sistema, que resulta en

$$E_{SO}^{(1)} = \frac{\alpha^4 m_e c^2}{2n^3} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} \right]; \quad (3.11)$$

donde $\alpha \approx 1/137$ es conocida como la constante de estructura fina.

3.2.2. Corrección relativista

La energía cinética relativista del electrón está dada por:

$$\hat{T} = \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2. \quad (3.12)$$

donde $m_e c^2$ es la energía de masa en reposo del electrón. Una expansión de esta ecuación en términos de $\hat{p}^2$ es:

$$\hat{T} \approx \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} + \dots \quad (3.13)$$

Al incluirse el término, el hamiltoniano del hidrógeno tiene la forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} = \hat{H}_0 + \hat{H}_R, \quad (3.14)$$

donde $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/(2m_e) - e^2/r$ es el hamiltoniano sin perturbar y $\hat{H}_R = \hat{p}^4/(8m_e^3 c^2)$ es la corrección relativista. Cuando se trata a este último término como una perturbación a primer orden, se obtiene la corrección de energía:

$$\begin{aligned} E_R^{(1)} &= \langle nljm_j | \hat{H}_R | nljm_j \rangle \\ &= -\frac{1}{8m_e^3 c^2} \langle nljm_j | \hat{p}^4 | nljm_j \rangle \\ &= -\frac{1}{8m_e^3 c^2} \left[\left(\frac{\alpha m_e c}{n} \right)^4 \left(\frac{8n}{2l+1} - 3 \right) \right] \\ &= -\frac{\alpha^4 m_e c^2}{8n^4} \left(\frac{8n}{2l+1} - 3 \right). \end{aligned} \quad (3.15)$$

3.2.3. Estructura fina

La corrección de estructura fina se obtiene al sumar las correcciones de acoplamiento espín-órbita 3.11 y relativista 3.15:

$$\begin{aligned} E_{EF}^{(1)} &= E_{SO}^{(1)} + E_R^{(1)} \\ &= \frac{\alpha^4 m_e c^2}{2n^3} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1)(2l+1)} \right] - \frac{\alpha^4 m_e c^2}{8n^4} \left(\frac{8n}{2l+1} - 3 \right), \end{aligned} \quad (3.16)$$

donde j puede tomar los valores $l \pm 1/2$; cualquiera de las dos sustituciones para l en términos de j resulta en la misma expresión:

$$E_{EF}^{(1)} = E_{SO}^{(1)} + E_R^{(1)} = \frac{\alpha^4 m_e c^2}{8n^4} \left(3 - \frac{4n}{j + \frac{1}{2}} \right). \quad (3.17)$$

Si se considera que la energía de un electrón en el estado base del átomo de hidrógeno, conocida como energía de Bohr, es

$$E_n^{(0)} = \alpha^2 m_e c^2 / 2n^2, \quad (3.18)$$

entonces la corrección de energía para la estructura fina es

$$E_{EF}^{(1)} = E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{4n^2} \left(\frac{4n}{j + \frac{1}{2}} - 3 \right); \quad (3.19)$$

y entonces la energía que considera la corrección de estructura fina a primer orden, para un electrón en un átomo hidrogenoide, es la siguiente

$$E_{nj} = E_n^{(0)} + E_{EF}^{(1)} = E_n^{(0)} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4n^2} \left(\frac{4n}{j + \frac{1}{2}} - 3 \right) \right]; \quad (3.20)$$

Capítulo 4

Modelos y metodología

4.1. El hierro

El hierro en el cuerpo humano está presente en distintas formas, en distintas moléculas, en distintos iones y con distinta cantidad de electrones disponibles para enlaces, según la composición de la molécula que lo contenga; por ejemplo, la deoxi-hemoglobina contiene a un átomo de hierro con únicamente un electrón sin enlazar [9] y éste puede ser el objetivo a inducirle resonancia en una muestra sanguínea. El isótopo común del hierro, conocido como hierro atómico, existe con seis electrones en su capa de valencia, con dos de ellos emparejados. En el cuerpo humano, el hierro se encuentra en moléculas como la hemoglobina y la ferritina [10] [11]. El hierro en la ferritina constituye un 20 % del total en el cuerpo y el resto está distribuido entre la hemoglobina, mioglobina y otras encimas. La ferritina actúa como la principal proteína de almacenamiento mientras que el resto son medios de transporte, por ejemplo, vía la sangre. La distribución y almacenamiento es regulada por el sistema digestivo según la necesidad corporal. Dentro de procesos como éste, surgen complicaciones de salud si el cuerpo no puede realizarlo de forma adecuada; es aquí donde entran los dos tipos de estudios, ESR y MRI, para observar cantidades asociadas a las moléculas que contienen a este elemento. El estudio del hierro presenta dificultades para su detección, por lo que se emplean algunas técnicas que la posibilitan, por ejemplo, la razón señal-intensidad (SIR, por sus siglas en inglés), las mediciones de relajación T_2 y T_2^* , así como las técnicas que emplean agentes de contraste [1]. Este trabajo pretende aportar al estudio del hierro desde la perspectiva del átomo en lugar de su estudio indirecto a través de la observación de los objetos que lo contengan.

La configuración electrónica del hierro atómico (Fe) es la siguiente:

$$Fe(26) : [Ar]4s^23d^6, \quad (4.1)$$

con número atómico $Z = 26$, de modo que sus números cuánticos son:

$$n = 3, \quad l = 2, \quad m = -2, -1, 0, 1, 2. \quad (4.2)$$

Existen 6 electrones en su capa de valencia, de éstos, dos están apareados y cuatro están sin emparejar, ejemplificados en la figura 4.1.

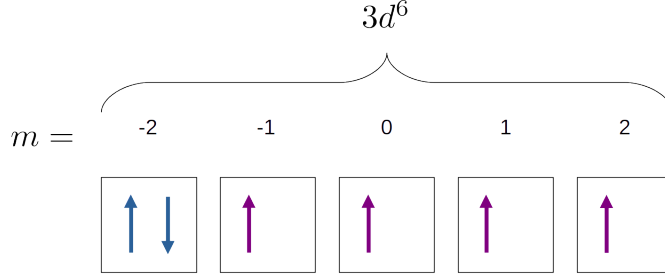


Figura 4.1: Configuración electrónica de la capa de valencia del hierro.

4.2. Átomo hidrogenoide

Una forma de obtener la función de onda correspondiente es modelar al átomo de hierro como un átomo hidrogenoide, donde se puede mostrar que la solución será la composición de las soluciones para cada uno de los cuatro electrones sin emparejar en su capa de valencia.

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \quad (4.3)$$

donde

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V. \quad (4.4)$$

Si se asume que la función de onda total es la multiplicación de las funciones de onda para cada electrón,

$$\Psi_{Fe} = \Psi_{n_1 l_1 m_1} \Psi_{n_2 l_2 m_2} \Psi_{n_3 l_3 m_3} \Psi_{n_4 l_4 m_4} \quad (4.5)$$

y se sustituye en la ecuación 4.3, resulta en que

$$\sum_{i=1}^4 \frac{1}{\Psi_i} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_i \right) \Psi_i = E. \quad (4.6)$$

Similarmente, si se considera que la energía total de los electrones es la suma de las energías individuales,

$$E = E_1 + E_2 + E_3 + E_4, \quad (4.7)$$

se obtiene lo siguiente al sustituirse en la ecuación 4.6:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_i \right) \Psi_i = E_i \Psi_i, \quad (4.8)$$

que tiene la forma de la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno cuyas soluciones son conocidas. Así que la solución para cada electrón en el átomo de hierro se puede considerar como la solución conocida del electrón en el átomo de hidrógeno, y por tanto se cumple la propuesta de la ecuación 4.5. Las soluciones individuales son de la forma:

$$\Psi_{nlm_i} = R_{nl} Y_l^m \rightarrow R_{32} Y_2^{m_i}, \quad (4.9)$$

con R_{nl} las soluciones radiales, que involucran a los polinomios asociados de Laguerre, y Y_l^m las soluciones angulares, dadas por los polinomios asociados de Legendre, y donde la representación de cada electrón está indicada por $i = 1, 2, 3, 4$. Estas dos soluciones se encuentran generalizadas en la ecuación C.1. Al considerarse que las m_i no se repiten, la solución general es:

$$\begin{aligned}\Psi_{Fe} &= \prod_{i=1}^4 R_{3,2}^{(i)} Y_{2,m_i}^{(i)} \\ &= R_{3,2}^{(1)} Y_{2,-1}^{(1)} R_{3,2}^{(2)} Y_{2,0}^{(2)} R_{3,2}^{(3)} Y_{2,1}^{(3)} R_{3,2}^{(4)} Y_{2,2}^{(4)},\end{aligned}\tag{4.10}$$

donde se sustituyeron en la expresión anterior los valores correspondientes, indicados en 4.2. La solución radial para estos valores está dada por la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}R_{3,2} &= \frac{Z^3}{81a_0^3} \left(\frac{8Z}{15a_0} \right)^{1/2} r^2 e^{-Zr/3a_0} \\ &= \frac{2^3 \cdot 13^3}{3^4 a_0^3} \left(\frac{2^4 \cdot 13}{15a_0} \right)^{1/2} r^2 e^{-26r/3a_0} \\ &= \frac{5408}{81a_0^3} \left(\frac{13}{15a_0} \right)^{1/2} r^2 e^{-26r/3a_0} \\ &\approx \left(62,15523/a_0^{7/2} \right) r^2 e^{-26r/3a_0} \\ &= (b_0) r^2 e^{-26r/3a_0}.\end{aligned}\tag{4.11}$$

Ahora las soluciones son evaluadas:

$$\begin{aligned}
\Psi_{Fe} &= \prod_{i=1}^4 R_{3,2}^{(i)} Y_{2,m_i}^{(i)} \\
&= \left[b_0 r_1^2 e^{-26r_1/3a_0} \cdot 3\sqrt{\frac{5}{24\pi}} \sin(\theta_1) \cos(\theta_1) e^{-i\phi_1} \right] \times \\
&\quad \left[b_0 r_2^2 e^{-26r_2/3a_0} \cdot \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}} (3\cos^2(\theta_2) - 1) \right] \times \\
&\quad \left[b_0 r_3^2 e^{-26r_3/3a_0} \cdot (-3)\sqrt{\frac{5}{24\pi}} \sin(\theta_3) \cos(\theta_3) e^{i\phi_3} \right] \times \\
&\quad \left[b_0 r_4^2 e^{-26r_4/3a_0} \cdot \frac{3}{4}\sqrt{\frac{5}{6\pi}} \sin^2(\theta_4) e^{2i\phi_4} \right] \\
&= \frac{-3^3 5^2}{3 \cdot 2^7 \sqrt{6\pi^2}} b_0^4 (r_1^2 + r_2^2 + r_3^2 + r_4^2) \times \\
&\quad \exp \left[-\left(\frac{26}{3a_0} \right) (r_1 + r_2 + r_3 + r_4) \right] \exp [i(-\phi_1 + \phi_3 + 2\phi_4)] \times \\
&\quad \sin(\theta_1) \cos(\theta_1) (3\cos^2(\theta_2) - 1) \sin(\theta_3) \cos(\theta_3) \sin^2(\theta_4) \\
&= \frac{-225}{128\sqrt{6\pi^2}} b_0^4 \left(\sum_1^4 r_i^2 \right) \exp \left[-\left(\frac{26}{3a_0} \right) \left(\sum_1^4 r_i \right) + i(-\phi_1 + \phi_3 + 2\phi_4) \right] \times \\
&\quad \sin(\theta_1) \cos(\theta_1) (3\cos^2(\theta_2) - 1) \sin(\theta_3) \cos(\theta_3) \sin^2(\theta_4). \quad (4.12)
\end{aligned}$$

Este resultado representa la función de onda para alguno de los electrones sin emparejar en la capa de valencia del átomo de hierro.

4.3. El campo magnético

De la ecuación 2.1, el campo magnético debido a un aparato de resonancia magnética, de forma general, será empleado como sigue:

$$\vec{B}_z = \alpha \hat{x} + \beta \hat{y} + (\gamma + B_0) \hat{z}, \quad (4.13)$$

al considerarse α , β y γ cantidades variables de gradientes de campo magnético según el aparato.

4.4. Analogía Efecto Zeeman

El hamiltoniano en el Efecto Zeeman (H_{Zee}) para un electrón está dado por:

$$\hat{H}_{Zee} = -[\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S] \cdot \vec{B}, \quad (4.14)$$

con el momento magnético orbital dado por

$$\vec{\mu}_L = -\frac{e\hat{L}}{2m_e c}; \quad (4.15)$$

y el momento magnético de espín dado por

$$\vec{\mu}_S = -\frac{e\hat{S}}{m_e c}, \quad (4.16)$$

de modo que la ecuación 4.14 queda como:

$$\hat{H}_{Zee} = \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\hat{L} + 2\hat{S} \right) \cdot \vec{B}, \quad (4.17)$$

donde

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \quad (4.18)$$

es el magnetón de Bohr. El hamiltoniano para el acoplamiento Espín-Órbita (H_{SO}) se define como:

$$\hat{H}_{SO} = W \hat{L} \cdot \hat{S}, \quad (4.19)$$

donde

$$W = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} = \frac{2\mu_B^2}{\hbar^2} \frac{1}{r^3}. \quad (4.20)$$

La condición de campo débil es:

$$B \ll \frac{W}{\mu_B}. \quad (4.21)$$

Así, el hamiltoniano completo para este sistema es:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{FS} + \hat{H}_{Zee}, \quad (4.22)$$

donde $\hat{H}_0$ es el hamiltoniano del átomo de hidrógeno, y $\hat{H}_{FS}$ es el hamiltoniano para su estructura fina, donde éste último también es observable en espectroscopía por EPR [1]. $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ representa al momento angular total del electrón, entonces se puede hacer el cambio:

$$\hat{L} + 2\hat{S} = \hat{J} + \hat{S} \quad (4.23)$$

en 4.17, de modo que:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{Zee} &= \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\hat{L} + 2\hat{S} \right) \cdot \vec{B} \\ &= \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\hat{J} + \hat{S} \right) \cdot \vec{B} \\ &= \frac{\mu_B}{\hbar} \left(\hat{J} + \hat{S} \right) \cdot [\alpha \hat{x} + \beta \hat{y} + (\gamma + B) \hat{z}] \\ &= \frac{\mu_B}{\hbar} \left[\alpha \left(\hat{J}_x + \hat{S}_x \right) + \beta \left(\hat{J}_y + \hat{S}_y \right) + (\gamma + B) \left(\hat{J}_z + \hat{S}_z \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Cálculo de perturbación a primer orden:

$$\begin{aligned} E_{Zee} &= \left\langle nljm_j \left| \hat{H}_{Zee} \right| nljm_j \right\rangle \\ &= \frac{\mu_B}{\hbar} \left[\alpha \left(\left\langle \hat{J}_x \right\rangle + \left\langle \hat{S}_x \right\rangle \right) + \beta \left(\left\langle \hat{J}_y \right\rangle + \left\langle \hat{S}_y \right\rangle \right) + (\gamma + B) \left(\left\langle \hat{J}_z \right\rangle + \left\langle \hat{S}_z \right\rangle \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Sea recordado que un operador de momento angular puede expresarse en términos de los operadores escalera:

$$\hat{J}'_x = \frac{1}{2} (\hat{J}'_+ + \hat{J}'_-), \quad (4.26)$$

$$\hat{J}'_y = \frac{1}{2i} (\hat{J}'_+ - \hat{J}'_-), \quad (4.27)$$

donde $\hat{J}' = \hat{J}, \hat{S}, \hat{L}$. Así que

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_x \rangle &= \langle nljm_j | \hat{S}_x | nljm_j \rangle \\ &= \langle nljm_j | \frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) | nljm_j \rangle \\ &= \frac{1}{2} (\langle nljm_j | \hat{S}_+ | nljm_j \rangle + \langle nljm_j | \hat{S}_- | nljm_j \rangle) = 0. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Los operadores escalera incrementan o decrementan el estado en el que operan; debido a que los estados son orto-normales, y a que el operador cambia a uno de los estados en el bra-ket, estos dos al operarse entre sí, resultan ortogonales entre ellos, de modo que su proyección es igual a cero. De forma análoga, $\hat{S}_y$, $\hat{L}_i$, y $\hat{J}_i$ son iguales a cero, para $i = x, y$. De esto, en la ecuación 4.25 permanecen únicamente los términos con subíndices z:

$$E_{Zee} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\gamma + B) (\langle \hat{J}_z \rangle + \langle \hat{S}_z \rangle). \quad (4.29)$$

Al emplearse que

$$\langle \hat{J}_z \rangle = \langle nljm_j | \hat{J}_z | nljm_j \rangle = \hbar m_j; \quad (4.30)$$

y que

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_z \rangle &= \langle nljm_j | \hat{S}_z | nljm_j \rangle \\ &= \frac{\langle nljm_j | \hat{J} \cdot \hat{S} | nljm_j \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle \hat{J}_z \rangle \\ &= \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \hbar m_j, \end{aligned} \quad (4.31)$$

se tiene que, de la ecuación 4.29:

$$\begin{aligned} E_{Zee} &= \frac{\mu_B}{\hbar} (\gamma + B) \left(\hbar m_j + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \hbar m_j \right) \\ &= \mu_B (\gamma + B) \left(1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right) m_j \\ &= \mu_B (\gamma + B) g_j m_j, \end{aligned} \quad (4.32)$$

donde g_j es conocido como el factor de Landé para el electrón, dado como sigue:

$$g_j = \left(1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right). \quad (4.33)$$

Considérese que una suma de momentos obedece las reglas de selección:

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2; \quad (4.34)$$

donde j es un momento general, y j_1 y j_2 son momentos individuales, sean del mismo tipo pero correspondiente a partículas distintas, o de distinto tipo pero correspondientes a una misma partícula. m_j va asociado a j de la forma:

$$-j \leq m \leq j. \quad (4.35)$$

Con $j_1 = l = 2$ y $j_2 = s = 1/2$, resulta en que $j = 2 - 1/2, 2 + 1/2$; entonces

$$j = 3/2, 5/2. \quad (4.36)$$

Así que las m_j para cada caso son:

$$m_{j=3/2} = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2; \quad (4.37)$$

$$m_{j=5/2} = -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2; \quad (4.38)$$

y las g_j para cada caso, de acuerdo a la ecuación 4.33 y los valores posibles de j dados en 4.36, son:

$$g_{j=5/2} = 6/5, \quad (4.39)$$

$$g_{j=3/2} = 4/5. \quad (4.40)$$

Los niveles de energía del hidrógeno, incluida la estructura fina, con cálculo a primer orden de teoría de perturbaciones, están dados por la ecuación 3.20, que es:

$$E_{n,j} = E_n^{(0)} + E_{FS}^{(1)} = E_n^{(0)} \left[1 + \frac{a^2}{4n^2} \left(\frac{4n}{j + \frac{1}{2}} - 3 \right) \right]; \quad (4.41)$$

con $a \approx 1/137,036$ la constante de estructura fina. En el caso del hierro (de 4.2 y 4.36): $n = 3$, $j = 3/2, 5/2$, entonces, con

$$E_{n,j} = E_{n=3}^{(0)} + E_{FS}^{(1)} + E_{Ze}^{(1)}, \quad (4.42)$$

dadas por las ecuaciones 4.41 y 4.32, las posibles energías de uno de los electrones son:

Para $j = 3/2$:

$$E_{n=3,j=3/2} = E_3^{(0)} \left(2 + \frac{a^2}{12} \right) + \frac{4}{5} \mu_B (\gamma + B) m_{j=3/2}, \quad (4.43)$$

donde m_j puede tomar los valores indicados en la ecuación 4.37;

Para $j = 5/2$:

$$E_{n=3,j=5/2} = E_3^{(0)} \left(2 + \frac{a^2}{36} \right) + \frac{6}{5} \mu_B (\gamma + B) m_{j=5/2}, \quad (4.44)$$

donde m_j puede tomar los valores indicados en la ecuación 4.38.

Se puede observar que las energías no se repiten, así que la degeneración ha sido removida.

Una diferencia de energías tiene asociada una frecuencia, la cual es la requerida para excitar al sistema y lograr la transición entre estados, de modo que posteriormente sea liberada y captada por el aparato a emplear. Esa frecuencia es inducida mediante el pulso, donde un fotón cede su energía al electrón; si se considera que el momento del fotón es $s = 1$ y que se conserva el momento total,

al revisar las reglas de selección en 4.34 se cumple que los estados j posibles antes de la absorción del fotón son los mismos a los que puede transicionar el electrón, siempre que la transición sea tal que la energía incremente. Lo siguiente es una observación sobre las posibles diferencias de energía y, por tanto, las frecuencias asociadas.

Si se cuida el orden de la diferencia de energías al restarlas, se pueden generalizar las ecuaciones 4.43 y 4.44 en lo siguiente:

$$\Delta E_{5/2 \leftarrow 3/2} = \frac{-a^2 E_3^{(0)}}{18} + \frac{2}{5} (3m_{j=5/2} - 2m_{j=3/2}) \mu_B (\gamma + B), \quad (4.45)$$

$$\Delta E_{3/2 \leftarrow 5/2} = \frac{a^2 E_3^{(0)}}{18} + \frac{2}{5} (2m_{j=3/2} - 3m_{j=5/2}) \mu_B (\gamma + B). \quad (4.46)$$

De las ecuaciones 4.43 y 4.44 se puede obtener la generalización de las diferencias de energía (ΔE) para dos estados de una misma j .

Para $j = 3/2$:

$$\Delta E_{n=3, j=3/2} = E_{3,3/2} - E'_{3,3/2} = \frac{4}{5} \mu_B (\gamma + B) (m_{3/2} - m'_{3/2}). \quad (4.47)$$

Para $j = 5/2$:

$$\Delta E_{n=3, j=5/2} = E_{3,5/2} - E'_{3,5/2} = \frac{6}{5} \mu_B (\gamma + B) (m_{5/2} - m'_{5/2}). \quad (4.48)$$

Es de notarse que la transición que las ecuaciones 4.45 y 4.46 representan, solo pueden admitirse si tienen valores positivos dado que, aunque puedan ocurrir de forma natural por relajación, no es viable experimentalmente porque, mediante un pulso, solo se puede inducir energía, no extraerla; esto es una consecuencia del signo en el resultado, entonces debe ser que en 4.45 el segundo término no puede ser menor al negativo del primero porque el primero es positivo; y que en 4.46 el segundo término debe ser mayor al primero porque el primero es negativo.

Dado que cualesquiera dos m_j adyacentes en una misma j son equidistantes, la diferencia $m_j - m'_j$ entre cualesquiera dos estados dentro de una misma j , no necesariamente adyacentes, será

$$m_j - m'_j = m^*/2; \quad (4.49)$$

con $m^* = 1, 2, 3, \dots$ el número de separación, donde $m^* = 1$ corresponde a dos estados adyacentes. Así, las ecuaciones 4.47 y 4.48 pueden plantearse de la siguiente forma:

$$\Delta E_{n=3, j=3/2} = \frac{2}{5} \mu_B (\gamma + B) (m^*), \quad (4.50)$$

$$\Delta E_{n=3, j=5/2} = \frac{3}{5} \mu_B (\gamma + B) (m^*); \quad (4.51)$$

y sus respectivas diferencias de frecuencia ($\Delta \nu$) son:

$$\Delta \nu_{n=3, j=3/2} = \frac{2}{5} \frac{\mu_B}{h} (\gamma + B) (m^*), \quad (4.52)$$

$$\Delta \nu_{n=3, j=5/2} = \frac{3}{5} \frac{\mu_B}{h} (\gamma + B) (m^*), \quad (4.53)$$

con $E = h\nu$.

4.4.1. Energías

Sean considerados los siguientes valores:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5,788 \times 10^{-5} \frac{eV}{T}, \quad (4.54)$$

$$a = \frac{e^2}{\hbar c} = 1/137,036, \quad (4.55)$$

$$B = 1T. \quad (4.56)$$

$$\gamma = 0,01T, \quad (4.57)$$

donde el valor del gradiente γ se considera un valor fijo y se interpreta como la observación de un punto en el espacio, dado que el campo gradiente en el volumen a estudiar, comparado al campo magnético principal, es de mínimo dos órdenes de magnitud menor y el cambio posible dentro del volumen se considera irrelevante. Ahora se toma la energía sin perturbar, E_n , como la aproximación de energía base para un electrón que se encuentra en un átomo de tipo hidrogenoide:

$$E_n = -Z^2 \frac{E_0}{n^2} \rightarrow E_{n=3} = -(26)^2 \frac{13,6}{3^2} eV \approx -1021,511 eV, \quad (4.58)$$

donde Z es el número atómico, entonces se tiene que, al sustituir los valores de las constantes 4.54, 4.56, 4.57 y 4.55 dentro de 4.43, la energía para un electrón en el estado $j = 3/2$ es la siguiente:

$$\begin{aligned} E_{n=3,j=3/2} &= E_3^{(0)} \left(2 + \frac{a^2}{12} \right) + \frac{4}{5} \mu_B (\gamma + B) m_{j=3/2} \\ &= 2E_3^{(0)} + E_3^{(0)} \left(\frac{[5,32793]}{12} \times 10^{-5} \right) + \frac{4}{5} \left[5,788 \times 10^{-5} \frac{eV}{T} \right] ([1 \times 10^{-2}T] + [1T]) m_j \\ &= 2E_3^{(0)} + [-1021,511 eV] (0,44399 \times 10^{-5}) + \left[4,6304 \times 10^{-5} \frac{eV}{T} \right] (1,01T) m_j \\ &= 2E_3^{(0)} + [-0,67057 \times 10^{-5} eV] + [5,84588 \times 10^{-5} eV] m_j \\ &= 2E_3^{(0)} + [-0,67057 + 4,676704 m_j] \times 10^{-5} eV. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Al introducir los posibles valores de $m_j = -3/2, -1/2, +1/2$ y $+3/2$, las energías tendrán una corrección como se muestran en la tabla 4.1. De manera análoga, al sustituir los valores en 4.44:

$$\begin{aligned} E_{n=3,j=5/2} &= E_3^{(0)} \left(2 + \frac{a^2}{36} \right) + \frac{6}{5} \mu_B (\gamma + B) m_{j=5/2} \\ &= 2E_3^{(0)} + E_3^{(0)} \left(\frac{[5,32793]}{36} \times 10^{-5} \right) + \frac{6}{5} \left[5,788 \times 10^{-5} \frac{eV}{T} \right] ([1 \times 10^{-2}T] + 1T) m_j \\ &= 2E_3^{(0)} + [-1021,511 eV] (0,14792) + \left[6,9456 \times 10^{-5} \frac{eV}{T} \right] (1,01T) m_j \\ &= 2E_3^{(0)} + [-0,22352 \times 10^{-5} eV] + [7,015056 \times 10^{-5} eV] m_j \\ &= 2E_3^{(0)} + [-0,22352 + 7,015056 m_j] \times 10^{-5} eV. \end{aligned} \quad (4.60)$$

e introducir los posibles valores de $m_j = -5/2, -3/2, -1/2, +1/2, +3/2$ y $+5/2$, las correcciones de energía son como se muestran en la tabla 4.2. En las tablas anexas se obtuvieron resultados

$m_{j=3/2}$	$E_d \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$
-3/2	-46.032
-1/2	-45.565
+1/2	-45.097
+3/2	-44.629

Tabla 4.1: Correcciones de energía dependientes de $j = 3/2$, con $B_0 = 1T$ y $\gamma = 0,01T$.

$m_{j=5/2}$	$E_d \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$
-5/2	-16.864
-3/2	-16.163
-1/2	-15.461
+1/2	-14.760
+3/2	-14.058
+5/2	-13.356

Tabla 4.2: Correcciones de energía dependientes de $j = 5/2$, con $B_0 = 1T$ y $\gamma = 0,01T$.

j	$\Delta E \ (\times 10^{-5} \text{ eV})$	$\Delta\nu \ (\text{GHz})$
3/2	4.677	11.309
5/2	7.016	16.963

Tabla 4.3: Diferencias de energía y frecuencia entre estados adyacentes en una misma j , con $B_0 = 1T$ y $\gamma = 0.01T$.

análogos a los presentados en esta sección para varios valores distintos de B_0 . También se muestra en la figura 4.2 las separaciones de energía obtenidas para los dos posibles estados j de acuerdo distintos valores de campo magnético B_0 , mediante los datos de estas tablas anexas.

Considérese también que los niveles de dos energías adyacentes correspondientes a una misma j , cuales sean, tienen un valor fijo entre sí, o sea, son equidistantes debido al resultado general del rompimiento. Entonces, la diferencia de energía y de frecuencia entre dos niveles cuales sean, que se encuentren dentro de una misma j cumplen lo siguiente:

$$\nu' = n\Delta\nu, \tag{4.61}$$

$$E' = n\Delta E, \tag{4.62}$$

donde n toma valores enteros positivos, siempre y cuando exista una diferencia válida según el caso de la j que se ha de considerar. En este caso, para $j = 3/2$, n tomaría los valores 1, 2 y 3, mientras que para $j = 5/2$, n tomaría los valores 1, 2, 3, 4 y 5.

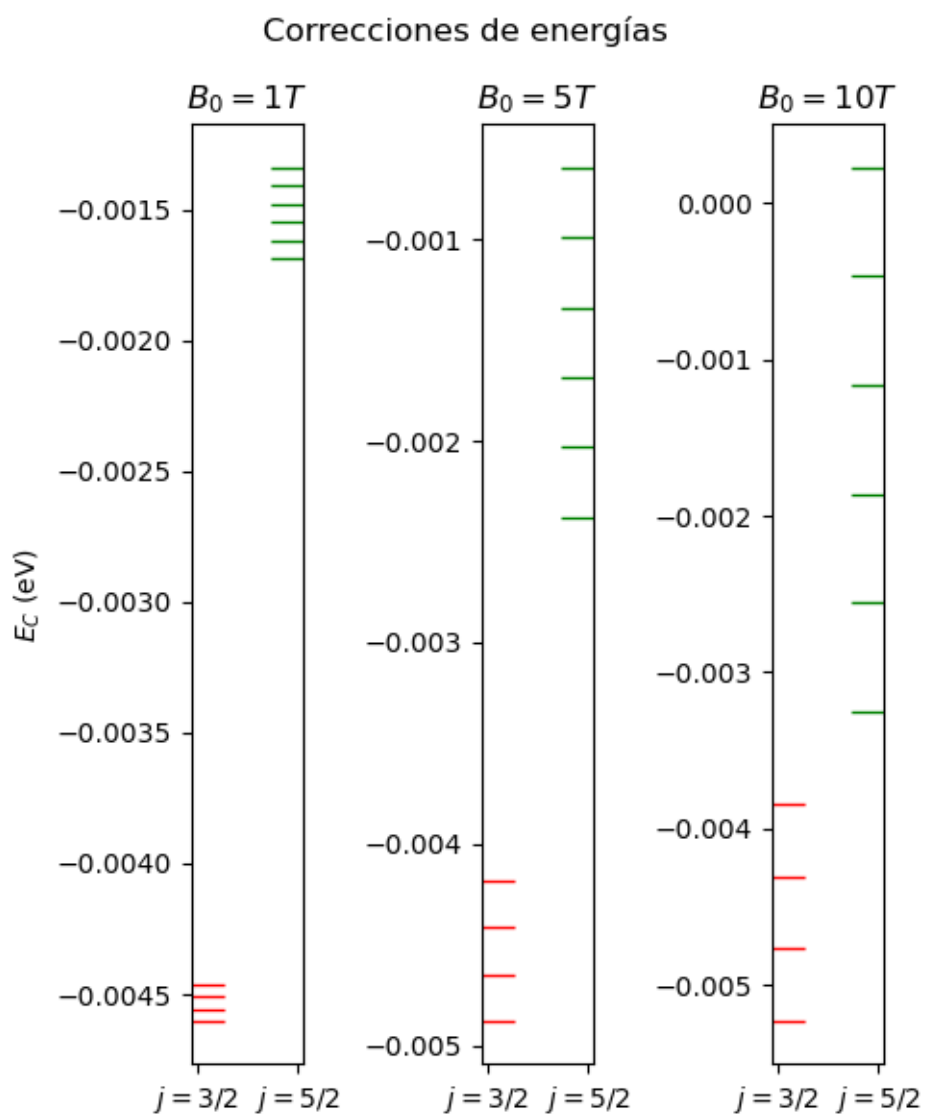


Figura 4.2: Separación de energías, según las dos j posibles, para distintas magnitudes de campo magnético B_0 .

Capítulo 5

Discusión y conclusiones

En este trabajo se obtuvieron los niveles de energía y frecuencias posibles para alguno de los electrones sin emparejar, perteneciente a la capa de valencia del átomo de hierro. Esto se obtuvo al romper las degeneraciones de energía que existen entre ellos debido a que comparten el mismo número cuántico n , a través de una analogía del efecto Zeeman anómalo. Mediante los resultados generales a los que se han llegado, en especial las ecuaciones 4.43 y 4.44, se espera que sea posible inducir en un medio contenedor de hierro alguna de las frecuencias deducibles y esto ocasione que la absorción de energía por parte del medio sea mayor; esta reacción se traduce directamente en una mayor emisión y, por tanto, también en una mayor inducción en las bobinas, lo cual aumentaría la señal a procesar; esto resultaría en un mejor contraste de imagen o un espectro más definido.

Hasta este momento, no se ha encontrado en la literatura algún trabajo que aborde el problema de detección del hierro en el cuerpo humano al emplear una perspectiva desde el comportamiento del elemento y bajo estas condiciones de campo; la mayoría trata cuestiones de tipo aditivas o moleculares, por ejemplo, modelos de porfirinas [9] que son objetos químicos que pueden contener hierro y se encuentran en diversos sistemas biológicos, para predecir su comportamiento; y agentes de contraste [1], que actúan como alteradores de los campos magnéticos locales, lo que resulta en cambios de los tiempos de relajación habituales para el entorno del objeto a estudiar, de modo que su concentración se deduce a partir de la alteración este entorno. Debido a esto, no se tiene actualmente alguna comparación experimental para estos resultados aunque se prevé que éstos sean detectables de acuerdo al aparato a emplear, debido a que los órdenes de las frecuencias ejemplificadas en este trabajo son coherentes con las empleadas en diversos experimentos, así como con diversas intensidades de campo magnético, en específico para resonancia de espín de electrones (ESR, por sus siglas en inglés). Diversas técnicas y aplicaciones de ESR, RMN y/o MRI las realizan mediante algún aparato de resonancia magnética con alguna magnitud específica de campo magnético principal y bobina de transmisión, según la construcción del aparato. Sean considerados, por ejemplo, de los siguientes trabajos que abordan situaciones de este tipo, los valores de campo y frecuencias empleadas, donde en la tabla 5.1 se presentan estas características al igual que algunos valores obtenidos en este trabajo. En [12] se maneja un resonador con un rango de campo magnético de 0-12.1 T y frecuencias de 107-120 GHz y 215-240 GHz; estos valores son comparables, por ejemplo, con las frecuencias obtenidas en la tabla A.10 para un campo de 10 T, donde la frecuencia resonante para los estados de $j = 3/2$ (≈ 112 GHz) está en el primer rango mencionado, así que este aparato resulta apto para ese caso. En [13] se mencionan capacidades de emisión de 16, 34 y 95 GHz, donde el segundo es cercano a la frecuencia resonante (≈ 33 GHz) de

Referencia v. datos	B_0 (T)	ν (GHz)
[12]:	0-12.1	107-120, 215-240
Tabla A.10:	10 ($j = 3/2$)	112
[13]:		16, 34, 95
Tabla A.4:	3 ($j = 3/2$)	33
[14]:	0.1-1.2	≤ 35
Tabla 4.3:	1	
[14]:	3.4	95
Tabla A.4:	3 ($j = 3/2$)	

Tabla 5.1: Comparaciones entre valores reportados y los obtenidos en este trabajo.

los estados en $j = 3/2$ para un campo de 3 T (tabla A.4). Para resonadores de ESR se empleaban magnitudes de campo de típicamente ≈ 0.1 -1.2 T con frecuencias máximas de ≈ 35 GHz [14], y en éste se presenta la elaboración de un resonador para ESR de ≈ 3.4 T con transmisión de ≈ 95 GHz; las frecuencias resonantes para un campo de 1 T presentadas en la tabla 4.3 concuerdan con el rango mencionado inicialmente, mientras que los valores posteriores son cercanos a los del estado $j = 3/2$ para un campo de 3 T, presentados en la tabla A.4.

Estas comparaciones ejemplifican porqué se espera puedan ser corroborados experimentalmente los resultados principales y su posible utilidad, dado que se muestra que existen aparatos con la capacidad de reproducir varios de los valores obtenidos, ya sea que estos aparatos cuenten con el campo magnético apropiado, la capacidad de emisión apropiada, o ambas. Para los casos en que no sean aptos en ambos factores simultáneamente, queda la posibilidad de la construcción de un aparato adecuado, o sea, que se adecúe a ambos factores, si es que no hay uno ya. En otras palabras, debido a la generalidad de las ecuaciones obtenidas, puede ser más factible enfocarse en las características de un aparato a elegir y después verificar si es posible confirmar, mediante las ecuaciones, que sea observable el fenómeno o si se requieren adaptar las antenas.

De acuerdo a los resultados generales obtenidos en el presente trabajo, pueden obtenerse las frecuencias necesarias para estimular un medio material o muestra que contenga átomos de hierro que sea adecuado para un valor de campo magnético específico (o lo opuesto, para alguna frecuencia conocer la intensidad de campo requerido), por ejemplo para los mencionados en los artículos anteriores o en magnitudes comunes para campos empleados en MRI [15] [6], como lo son 1.5, 3 y 7 T.

En el fenómeno de RMN, generalmente se excita a un medio material al inducirse cierta frecuencia tal que ésta sea la resonante para el medio. Con esta idea, se espera que el hierro pueda ser estimulado independientemente de la molécula en la que se encuentre (sea por ejemplo, hemoglobina o ferritina), así como ocurre con la molécula de agua en MRI, donde la mayor señal se produce por parte del espín de los protones de sus hidrógenos que reaccionan con su RF resonante, pero cuyo valor varía según el campo magnético [16] [6], por ejemplo, 64 MHz para 1.5 T y 128 MHz para 3 T.

La mayoría de los electrones están en el estado de energía más bajo, así que la frecuencia más conveniente para excitarlos y producir la mayor señal es aquella con la mayor diferencia de energía, que sería la diferencia entre el menor y mayor estado de energía posible. Esto es lo más apropiado físicamente pero depende también del aparato, en específico de la capacidad de captación de las bobinas receptoras, según su sensibilidad; en otras palabras, las bobinas del aparato a emplearse

quizá no tenga la capacidad de emitir tales frecuencias, de captarlas y/o de procesarlas. Debido a esto, puede ser que este primer punto no sea necesariamente el adecuado experimentalmente para elegir la mejor frecuencia a inducir. Como generalización de lo anterior, los estados para $j = 3/2$ son los de menor energía, entonces son los más estables; las transiciones de mayor diferencia son desde estos estados hacia los de $j = 5/2$ y viceversa. En ese caso, es necesario que el aparato a emplear tenga la capacidad de inducir una frecuencia del orden de cientos de GHz. Como ejemplo, en el caso abordado para $B_0 = 1$ T (tabla 4.3), la frecuencia mínima necesaria para una transición desde algún estado de $j = 3/2$ (menor) hacia alguno del $j = 5/2$ (mayor) es ≈ 670 GHz, que corresponde a la transición más pequeña: desde $m_{j=3/2} = +3/2$ hasta $m_{j=5/2} = -5/2$; pero la transición ideal es entre el estado mínimo ($m_{j=3/2} = -3/2$) y máximo ($m_{j=5/2} = +5/2$), respectivamente.

Se puede observar de la tabla A.1 y en la figura 4.2 que, si el campo magnético aumenta, el mayor estado de $j = 3/2$ y el menor estado de $j = 5/2$ se acercan entre sí, entonces inducir una transición entre estados de distintas j es más viable si el campo es suficientemente intenso. Por ejemplo para $B_0 = 10$ T podría ser posible la experimentación mediante un aparato similar al comentado anteriormente; y como la diferencia de energía en este caso es mayor a una transición dentro de estados de una misma j , la señal producida debe ser mayor. La figura 4.2 también muestra la naturaleza de las ecuaciones generales obtenidas, 4.43 y 4.44, donde la separación de energías ocurre centrada entorno a un mismo valor según cada j , donde el valor central es el primer término en cada una de estas ecuaciones.

Al ser $m_{j=3/2} = -3/2$ el menor nivel posible para cualquier electrón, si se asume que la mayoría de los electrones están en este nivel, la transición desde este estado hacia el estado $m_{j=3/2} = +3/2$ puede ser una diferencia más adecuada que la transición entre j distintas para algunos casos, donde por ejemplo, mediante la ecuación 4.61 se obtiene la frecuencia necesaria, que es en general $\nu' = 3\Delta\nu$, lo cual resulta en ≈ 101 GHz y es cercano a las características de campo magnético y frecuencia mencionadas previamente en [14].

En general, se obtuvieron dos diferencias de energía para estados adyacentes, mostradas en la tabla 4.3 para el caso de $B_0 = 1$ T y para algunos otros valores de campo magnético mostrados las tablas anexas, en el que quizá no sea la mayor diferencia posible pero sí la más común entre estados, así que también podría ser conveniente emitir estas frecuencias para lograr que la mayoría de los electrones sean estimulados aún si no es la más intensa. Además, es necesario considerar que, al ser posible la emisión simultánea de pulsos [6], se obtengan dos conjuntos de emisiones distintas, cada una correspondiente a una de las dos diferencias de frecuencia según su estado j . Esto puede ser favorable para generar mayor señal a costa de una menor capacidad de emisión porque, aún si provienen de distintos conjuntos y sean señales distintas, la emisión proviene únicamente de la excitación de los electrones de la capa de valencia del hierro. Con esto en mente, una propuesta de este análisis es que el procesamiento de la señal puede orientarse a superponer las intensidades de ambas emisiones para mejorar las imágenes obtenidas.

Dado que las energías y por tanto sus frecuencias asociadas, para estos electrones están directamente relacionadas a la intensidad del campo magnético del aparato en el que se encuentre el medio que los contiene, es conveniente que el campo magnético sea lo más intenso posible. Esto se puede observar en el fenómeno de resonancia magnética, donde el espín tiende a «alinearse» de forma más cercana al campo magnético conforme sea más intenso. Al excitarse el medio, la relajación dura menos debido a la atracción hacia el campo magnético principal, así que la energía inducida se libera en un tiempo más corto, por tanto la señal emitida es más breve e intensa; pero con esto también se requiere una mayor frecuencia para lograr «inclinarse» o «desalinearse» a un espín de su precesión original. Lo anterior también se ve reflejado en las ecuaciones principales obtenidas en este trabajo (4.43 y 4.44), así como en las diferencias de energía y frecuencia entre estados de una

Discusión y conclusiones

misma j , mostradas en las tablas anexas, donde las correcciones serán de mayor magnitud conforme B_0 sea mayor; la desventaja principal de emplear campos más intensos es que, físicamente, la homogeneidad se debilita conforme la magnitud del campo y el volumen de la cavidad crecen. En estos trabajos [14] [13] [12] se aborda, por ejemplo, la sensibilidad de resonadores para ESR, donde las cavidades tienen diámetros de centenas y decenas de micrómetros mientras que en un aparato de MRI, en cambio, cabe una persona dentro y tan solo las bobinas de RF tienen un diámetro del orden de centímetros [15]. Con estas observaciones, se sugiere que los resultados son aún más aptos para aparatos que se emplean en espectroscopía por ESR, dado que su construcción es de menor tamaño, lo cual permite muestras de menor volumen y campos magnéticos más intensos que los de un aparato de MRI.

Aunque el método para emplear el modelo del hierro y realizar la analogía del efecto Zeeman se puede trasladar a otros elementos de la tabla periódica, una consecuencia directa del desarrollo en este trabajo es que los resultados son teóricamente válidos para cualquier electrón que se ubique en una capa de valencia de un átomo tal que sus números cuánticos n y l sean los mismos que los del hierro, y que el átomo contenga al menos a un electrón sin emparejar en esa capa y sin enlazar en el medio material que lo contenga. Así que los números atómicos válidos son $Z = 21, 22, 23, 25, 26, 27$ y 28 . Esto se debe a que las posibles transiciones entre estados de energía están definidos por el factor de Landé (4.33) y las m_j (4.35), donde estos dos valores son idénticos a los del hierro siempre y cuando n y l lo sean también, porque s se conserva dado que se trata de electrones y j , que depende de l y s , tampoco cambia en tales condiciones.

Apéndice A

Correcciones de energía, diferencias de energía y frecuencias asociadas

Se presentan las correcciones de energía, según sus respectivos estados m_j , para diversas magnitudes de campo magnético B_0 ; y sus correspondientes diferencias de energía y frecuencia para estados adyacentes en una misma j . Todos los valores están redondeados a la tercer cifra decimal, así se limita a MHz para el caso de las frecuencias.

B_0	ΔE ($\times 10^{-4}$ eV)	$\Delta\nu$ (GHz)
1	27.765	671.356
5	18.041	436.219
10	5.885	142.298

Tabla A.1: Diferencias de energía para transiciones desde un estado $m_{j=3/2} = +3/2$ a $m_{j=5/2} = -5/2$, para varios valores de B_0 y $\gamma = 0,01T$.

$m_{j=3/2}$	E_d ($\times 10^{-4}$ eV)
-3/2	-47.421
-1/2	-46.028
+1/2	-44.634
+3/2	-43.240

Tabla A.2: Correcciones de energía dependientes de $j = 3/2$, con $B_0 = 3T$ y $\gamma = 0,01T$.

Correcciones de energía, diferencias de energía y frecuencias asociadas

$m_{j=5/2}$	$E_d \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$
-5/2	-20.337
-3/2	-18.246
-1/2	-16.156
+1/2	-14.065
+3/2	-11.974
+5/2	-9.883

Tabla A.3: Correcciones de energía dependientes de $j = 5/2$, con $B_0 = 3T$ y $\gamma = 0,01T$.

j	$\Delta E \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$	$\Delta\nu \ (\text{GHz})$
3/2	1.394	33.703
5/2	2.091	50.554

Tabla A.4: Diferencias de energía y frecuencia entre estados adyacentes en una misma j , con $B_0 = 3T$ y $\gamma = 0,01T$.

$m_{j=3/2}$	$E_d \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$
-3/2	-48.811
-1/2	-46.491
+1/2	-44.171
+3/2	-41.851

Tabla A.5: Correcciones de energía dependientes de $j = 3/2$, con $B_0 = 5T$ y $\gamma = 0,01T$.

$m_{j=5/2}$	$E_d \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$
-5/2	-23.810
-3/2	-20.330
-1/2	-16.850
+1/2	-13.370
+3/2	-9.890
+5/2	-6.410

Tabla A.6: Correcciones de energía dependientes de $j = 5/2$, con $B_0 = 5T$ y $\gamma = 0,01T$.

j	$\Delta E \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$	$\Delta\nu \ (\text{GHz})$
3/2	2.320	56.097
5/2	3.480	84.145

Tabla A.7: Diferencias de energía y frecuencia entre estados adyacentes en una misma j , con $B_0 = 5T$ y $\gamma = 0,01T$.

Correcciones de energía, diferencias de energía y frecuencias asociadas

$m_{j=3/2}$	$E_d \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$
-3/2	-52.284
-1/2	-47.648
+1/2	-43.013
+3/2	-38.378

Tabla A.8: Correcciones de energía dependientes de $j = 3/2$, con $B_0 = 10T$ y $\gamma = 0,01T$.

$m_{j=5/2}$	$E_d \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$
-5/2	-32.493
-3/2	-25.540
-1/2	-18.588
+1/2	-11.634
+3/2	-4.681
+5/2	+2.272

Tabla A.9: Correcciones de energía dependientes de $j = 5/2$, con $B_0 = 10T$ y $\gamma = 0,01T$.

j	$\Delta E \ (\times 10^{-4} \text{ eV})$	$\Delta \nu \ (\text{GHz})$
3/2	4.635	112.082
5/2	6.953	168.123

Tabla A.10: Diferencias de energía y frecuencia entre estados adyacentes en una misma j , con $B_0 = 10T$ y $\gamma = 0,01T$.

Apéndice B

Los estados y su base

A continuación, se cambian los respectivos estados de cada energía a términos del momento total j , de la forma $|j, m\rangle$. Con $m_1 = m_l = -2, -1, 0, 1, 2$, y $m_2 = m_s = -1/2, +1/2$, los posibles estados para cada electrón son:

Para $j = \frac{3}{2}$:

$$\left| j = \frac{3}{2}, m \right\rangle = \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle; \quad (\text{B.1})$$

Para $j = \frac{5}{2}$:

$$\left| j = \frac{5}{2}, m \right\rangle = \left| \frac{5}{2}, -\frac{5}{2} \right\rangle, \left| \frac{5}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{5}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{5}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{5}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{5}{2}, \frac{5}{2} \right\rangle; \quad (\text{B.2})$$

y los estados en términos de j_1, j_2, m_1 , y m_2 son:

$$|j_1, m_1\rangle = |l, m_l\rangle = |2, -2\rangle, |2, -1\rangle, |2, 0\rangle, |2, 1\rangle, |2, 2\rangle, \quad (\text{B.3})$$

$$|j_2, m_2\rangle = |s, m_s\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (\text{B.4})$$

Estos estados generales, representados por $|j, m\rangle$, están descritos en términos de los individuales, $|j_i, m_i\rangle$, mediante la siguiente expresión:

$$|j_1, j_2; jm\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; jm \rangle, \quad (\text{B.5})$$

donde se omitirán las notaciones de j_1 y j_2 . El último factor es conocido en conjunto como los coeficientes de Clebsch-Gordon y cumplen orto-normalidad:

$$\sum_{m_1, m_2} |\langle m_1, m_2 | jm \rangle|^2 = 1. \quad (\text{B.6})$$

Sea considerada la siguiente regla de recurrencia:

$$\begin{aligned} \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle m_1, m_2 | j, m \pm 1 \rangle \\ = \sqrt{(j_1 \pm m_1)(j_1 \mp m_1 + 1)} \langle m_1 \mp 1, m_2 | j, m \rangle \\ + \sqrt{(j_2 \pm m_2)(j_2 \mp m_2 + 1)} \langle m_1, m_2 \mp 1 | j, m \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Los estados y su base

Si se le emplea el cambio $m' = m \pm 1 \rightarrow m = m' \mp 1$, resulta en:

$$\begin{aligned} \sqrt{(j \mp m + 1)(j \pm m)} \langle m_1, m_2 | j, m \rangle \\ = \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle m_1 \mp 1, m_2 | j, m \mp 1 \rangle \\ + \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle m_1, m_2 \mp 1 | j, m \mp 1 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Mediante estas relaciones (B.5, B.6, B.8) se obtienen los siguientes estados:

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \left| -1, \frac{-1}{2} \right\rangle - \frac{2}{\sqrt{5}} \left| -2, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (\text{B.9})$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{5}} \left| 0, \frac{-1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{3}{5}} \left| -1, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (\text{B.10})$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} \left| 1, \frac{-1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (\text{B.11})$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{2}{\sqrt{5}} \left| 2, \frac{-1}{2} \right\rangle - \frac{1}{\sqrt{5}} \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle. \quad (\text{B.12})$$

$$\left| \frac{5}{2}, \frac{-5}{2} \right\rangle = \left| -2, \frac{-1}{2} \right\rangle, \quad (\text{B.13})$$

$$\left| \frac{5}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \left| -2, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}} \left| -1, \frac{-1}{2} \right\rangle, \quad (\text{B.14})$$

$$\left| \frac{5}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} \left| 0, \frac{-1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{5}} \left| -1, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (\text{B.15})$$

$$\left| \frac{5}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{5}} \left| 1, \frac{-1}{2} \right\rangle, \quad (\text{B.16})$$

$$\left| \frac{5}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \left| 2, \frac{-1}{2} \right\rangle + \frac{2}{\sqrt{5}} \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle, \quad (\text{B.17})$$

$$\left| \frac{5}{2}, \frac{5}{2} \right\rangle = \left| 2, \frac{1}{2} \right\rangle. \quad (\text{B.18})$$

Apéndice C

Constantes y relaciones

Descripción	Símbolo y relación	Valor
Carga del electrón	e	$1.6 \times 10^{-19} \text{ C} = 1 \text{ eV}$
Constante de Planck	h	$4.135 \times 10^{-15} \text{ eV s}$
Constante de Planck reducida	$\hbar = h/2\pi$	$6.5 \times 10^{-16} \text{ eV s}$
Constante de estructura fina	$a = e^2/\hbar c$	$1/137.036$
Velocidad de la luz en el vacío	c	$2.99 \times 10^8 \text{ m/s}$
Masa del electrón	m_e	$0.511 \text{ MeV}/c^2$
Masa del protón	m_p	$938.272 \text{ MeV}/c^2$
Masa del neutrón	m_n	$939.565 \text{ MeV}/c^2$
Radio atómico de Bohr	$a_0 = \hbar/m_e c a$	$5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$
Magnetón de Bohr	$\mu_B = e\hbar/2m_e$	$5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$

Función de onda para el átomo de hidrógeno:

$$\Psi_{nLM}(r, \theta, \phi) = \left[\alpha^3 \frac{(n-L-1)!}{2n[(n+L)!]^3} \right]^{1/2} e^{-\alpha r/2} (\alpha r)^L L_{n-L-1}^{2L+1}(\alpha r) Y_M^L(\theta, \phi), \quad (\text{C.1})$$

con $\alpha = 2Z/na_0$ y Y los armónicos esféricos.

Bibliografía

- [1] Yoichi Takakusagi, Ryoma Kobayashi, Keita Saito, Shun Kishimoto, Murali C. Krishna, Ramachandran Murugesan, and Ken-ichiro Matsumoto. Epr and related magnetic resonance imaging techniques in cancer research. *Metabolites*, 13(1), 2023. ISSN 2218-1989. doi: 10.3390/metabo13010069. URL <https://www.mdpi.com/2218-1989/13/1/69>.
- [2] Michael J. Davies. Detection and characterisation of radicals using electron paramagnetic resonance (epr) spin trapping and related methods. *Methods*, 109:21–30, 2016. ISSN 1046-2023. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ymeth.2016.05.013>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1046202316301438>. Current Methods to unravel Reactive Oxygen Species (ROS) Biology.
- [3] Lars G. Hanson. Is quantum mechanics necessary for understanding magnetic resonance? *Concepts in Magnetic Resonance Part A*, 32A(5):329–340, 2008. doi: <https://doi.org/10.1002/cmr.a.20123>. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cmr.a.20123>.
- [4] J.A. Soto, T. Córdova, M. Sosa, and S. Jerez. Quantum-mechanical aspects of magnetic resonance imaging. *Revista Mexicana de Física*, 2017. ISSN 0035-001X. URL <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=57048167007>.
- [5] Mike P. Williamson. Drawing single nmr spins and understanding relaxation. *Natural Product Communications*, 14(5):1–9, 2019. doi: 10.1177/1934578X19849790. URL <https://doi.org/10.1177/1934578X19849790>.
- [6] D. Hernandez and Kim K.N.. A review on the rf coil designs and trends for ultra high field magnetic resonance imaging. *Investig Magn Reson Imaging.*, 24(3):95–122, 2020. doi: 10.13104/imri.2020.24.3.95. URL <https://doi.org/10.13104/imri.2020.24.3.95>.
- [7] A. O. Rodríguez. Principles of magnetic resonance imaging. *Revista Mexicana de Física*, 50:272–286, 2004. ISSN 0035-001X. URL <https://www.redalyc.org/articulo.oa?id=57062710>.
- [8] B. Gruber, M. Froeling, T. Leiner, and D.W.J. Klomp. Rf coils: A practical guide for nonphysicists. *Journal of Magnetic Resonance Imaging*, 2018. URL 10.1002/jmri.26187.
- [9] Damián A. Scherlis and Darío A. Estrin. Structure and spin-state energetics of an iron porphyrin model: An assessment of theoretical methods. *International Journal of Quantum Chemistry*, 87(3):158–166, 2002. doi: <https://doi.org/10.1002/qua.10043>. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qua.10043>.

- [10] Kathan Amin, Achille Mileto, and Orpheus Kolokythas. Mri for liver iron quantification: Concepts and current methods. *Seminars in Ultrasound, CT and MRI*, 43(4): 364–370, 2022. ISSN 0887-2171. doi: <https://doi.org/10.1053/j.sult.2022.03.006>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0887217122000336>. Dual source CT: Applications, Technology.
- [11] Diego Hernando, Yakir S. Levin, Claude B. Sirlin, and Scott B. Reeder. Quantification of liver iron with mri: State of the art and remaining challenges. *Journal of Magnetic Resonance Imaging*, 40(5):1003–1021, 2014. doi: <https://doi.org/10.1002/jmri.24584>. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jmri.24584>.
- [12] Franklin H. Cho, Viktor Stepanov, Chathuranga Abeywardana, and Susumu Takahashi. Chapter five - 230/115ghz electron paramagnetic resonance/double electron–electron resonance spectroscopy. In Peter Z. Qin and Kurt Warncke, editors, *Electron Paramagnetic Resonance Investigations of Biological Systems by Using Spin Labels, Spin Probes, and Intrinsic Metal Ions, Part A*, volume 563 of *Methods in Enzymology*, pages 95–118. Academic Press, 2015. doi: <https://doi.org/10.1016/bs.mie.2015.07.001>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S007668791500405X>.
- [13] Ygal Twig, Ekaterina Dikarov, and Aharon Blank. Ultra miniature resonators for electron spin resonance: Sensitivity analysis, design and construction methods, and potential applications. *Molecular Physics*, 111(18-19):2674–2682, 2013. doi: 10.1080/00268976.2012.762463. URL <https://doi.org/10.1080/00268976.2012.762463>.
- [14] Ygal Twig, Anton Sorkin, David Cristea, Akiva Feintuch, and Aharon Blank. Surface loop-gap resonators for electron spin resonance at W-band. *Review of Scientific Instruments*, 88(12):123901, 12 2017. ISSN 0034-6748. doi: 10.1063/1.5000946. URL <https://doi.org/10.1063/1.5000946>.
- [15] Hiroyuki FUJITA. New horizons in mr technology: Rf coil designs and trends. *Magnetic Resonance in Medical Sciences*, 6(1):29–42, 2007. doi: 10.2463/mrms.6.29.
- [16] Boris Epel and Howard J. Halpern. *Imaging*, pages 149–160. John Wiley & Sons, Ltd, 2017. ISBN 9780470034590. doi: <https://doi.org/10.1002/9780470034590.emrstm1512>. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9780470034590.emrstm1512>.