

**Universidad de Sonora**  
**División de ciencias exactas y naturales**  
**Departamento de Física**



**Resonancia magnética: Un enfoque analítico y numérico**

Hiram Ernesto Damián

Tesis para obtener el título de  
*Licenciado en Física*

Hermosillo, Sonora

Abril de 2017

# Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos  
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess



## *Reconocimientos*

Me gustaría agradecer al doctor Rodrigo Rosas Burgos y su familia, quienes me han brindado apoyo durante esta tesis y en la carrera. También agradecer el apoyo del Dr. Carlos Calcáneo Roldán y su familia, y Dr. Carlos Lizárraga, que también me han apoyado durante la carrera. A mi madre, quien durante mucho tiempo me ha apoyado en la vida.



# Índice general

<b>Índice de figuras</b>	<b>VII</b>
<b>1. Resonancia magnética nuclear</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción	1
1.2. Espín	3
1.2.1. Operadores de espín	4
1.2.2. Espinores	7
1.3. Superposición del espín	8
1.4. Precesión de un electrón en un campo magnético	9
1.5. Eigenenergías	11
1.6. Resonancia magnética nuclear	13
<b>2. Usando simulaciones de computadora y visualizaciones</b>	<b>19</b>
2.1. Modelo de resonancia eléctrica	19
2.2. Sobre simulación y probabilidades	23
2.3. Análisis espectral	28
2.4. Solución numérica de la resonancia magnética nuclear	31
2.5. Resonancia magnética nuclear para caso ideal	35
<b>3. Aproximación mediante Teoría de perturbaciones</b>	<b>39</b>
3.1. Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo	39
3.2. Análisis perturbativo	40
3.3. Resonancia magnética usando teoría de perturbaciones. Caso ideal.	46
<b>4. Conexiones clásicas y el vector de espín cuántico</b>	<b>51</b>
4.1. Visualización de la transición de estados	51

---

<b>5. Conclusión</b>	<b>57</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>59</b>
<b>A. Algoritmo de Adams-Bashforth-Moulton</b>	<b>61</b>
<b>Apéndices</b>	<b>61</b>
<b>B. Método de Runge-Kutta</b>	<b>65</b>
<b>C. Movimiento de un cuerpo en un campo magnético</b>	<b>67</b>
<b>D. Cálculo de la probabilidad de espín abajo</b>	<b>69</b>
<b>E. Visualización de la transición de estado de espín</b>	<b>73</b>

# Índice de figuras

1.1. Precesión y momento . . . . .	11
1.2. Eigenenergías . . . . .	12
2.1. Gráfica de los valores esperados de $b$ , que llamamos $p_b$ , con $\omega_1 = 0.1$ GHz, y $\omega_0 = \omega = 1$ GHz. . . . .	24
2.2. Gráfica de espín arriba vs tiempo; $t = 200$ ns para $\omega_0 = \omega = 1$ GHz y $\omega_1 = 0.1$ GHz. . . . .	25
2.3. Gráfica de la probabilidad de espín abajo $p_b$ vs $t$ , usando algoritmo RK4, con $t = 200$ ns, $\omega_0 = \omega = 1.0$ GHz, $\omega_1 = 0.1$ GHz. . . . .	26
2.4. Gráfica que muestra la probabilidad de inversión de espín para varios valores de $\omega_1$ . La línea azul es para $\omega_1 = 0.10$ GHz, la roja es para $\omega_1 = 0.01$ GHz, y la verde es para $\omega_1 = 0.05$ GHz. . . . .	27
2.5. El espectro de potencia $Y(\omega')$ contra $\omega'$ (ambos en la figura principal y el inserto) con $\omega_0 = 1.0$ GHz y $\omega_1 = 0.1$ GHz para diferentes valores de $\omega$ y condiciones iniciales arbitrarias. . . . .	29
2.6. El espectro de potencia $Y(\omega')$ contra $\omega'$ para $\omega = \omega_0 = 1.0$ GHz (a la resonancia) para tres valores de $\omega_1$ y condiciones iniciales arbitrarias. . . . .	30
2.7. Probabilidad de transición espín abajo para $\omega_1 = 0.1$ GHz, $\omega = \omega_0 = 1$ GHz .	32
2.8. Espín abajo en la Resonancia Magnética Nuclear . . . . .	33
2.9. El espectro de potencias $Y(\omega')$ vs $\omega'$ para el caso de resonancia magnética nuclear con $\omega_0 = 1.34$ GHz y $\omega_1 = 0.13$ GHz para varias frecuencias angulares.	34
2.10. Probabilidad de transición para espín abajo, a la frecuencia de resonancia. Caso ideal. . . . .	36
2.11. Probabilidad de transición para $b(t)$ mediante el método analítico. El eje horizontal es el tiempo en segundos y el eje vertical es $p_{flip}$ . . . . .	36

2.12. Espectro de potencia para $Y(\omega')$ vs $\omega'$ para varias frecuencias con $\omega_0 = 1$ GHz y $\omega_1 = 0.1$ GHz. El eje horizontal es $\omega$ y el vertical $Y(\omega')$ . . . . .	37
3.1. Gráfica de probabilidad de espín abajo vs tiempo para caso perturbado. . . . .	44
3.2. Análisis de frecuencia $Y(\omega)^2$ vs $\omega$ para el caso perturbado. . . . .	45
3.3. Gráfica de las probabilidades de transición para espín abajo, dadas por la teoría de perturbaciones para el caso ideal, con $\omega_0 = 0.808$ y $\omega_1 = 0.19$ , ambos en GHz. . . . .	48
3.4. Transformada de Fourier y espectro de potencia de la probabilidad de transición para el caso aproximado vía teoría de perturbaciones. . . . .	49
4.1. Visualización de la transición del vector de espín al estado espín abajo, en un intervalo de 200 ns para la resonancia magnética electrónica. . . . .	51
4.2. Transición de estado de espín abajo para campo magnético estático $\omega = 0$ . . .	52
4.3. Transición del vector de espín al estado espín abajo causada por la resonancia magnética nuclear para el caso ideal. . . . .	53
4.4. Movimiento de transición del vector de espín para $\omega = 1.0$ , $\omega_1 = 0.1$ y $\omega_0 = 0.5$ . Frecuencias en GHz. . . . .	54
4.5. Movimiento de $\langle \hat{s} \rangle$ en un campo magnético para $\omega_0 = 1$ , $\omega = 0.5$ y $\omega_1 = 0.1$ . . . . .	55

# 1. *Resonancia magnética nuclear*

## 1.1. **Introducción**

Usualmente en la mecánica definimos vibraciones libres cuando un sistema vibratorio está ligeramente desplazado del punto de equilibrio y el sistema vibra solo. Pero es posible que una fuerza externa pueda poner al sistema vibratorio a oscilar. La frecuencia de esta oscilación es determinada por la frecuencia de la fuerza externa y entre más cerca esté la frecuencia de la fuerza externa a la frecuencia natural (libre), ésta se vuelve más fuerte y por lo tanto, más energética. Esto se conoce como resonancia, cuando la frecuencia de la fuerza externa coincide con la frecuencia natural del sistema. Esto sucede en muchos sistemas vibratorios tanto en la mecánica clásica como en la cuántica.

La resonancia magnética es un fenómeno encontrado en sistemas magnéticos que poseen tanto momento magnético como momento angular. Como veremos, el término resonancia implica que estamos en contacto con una frecuencia natural del sistema magnético; en este caso corresponde a la frecuencia de precesión giromagnética del momento magnético en un campo externo. El fenómeno de resonancia magnética se presenta cuando hay emisión o absorción de radiación electromagnética por los electrones o por el núcleo del átomo (nuclear) en presencia de un campo magnético. En este fenómeno es posible observar que el espín y el momento magnético se alinean con el campo magnético.

El sistema físico que se estudia en esta tesis trata del fenómeno de resonancia magnética nuclear y es de aplicación muy amplia en la imagenología aplicada tanto a la investigación científica como al diagnóstico médico en enfermedades y traumatismos de diverso tipo. Estos van desde métodos para localización de tumores malignos o benignos, hasta el estudio de músculos y tendones en deportistas de alto rendimiento, y también, es de utilidad en el estudio

de restos humanos tan antiguos como los cuerpos momificados de la civilización egipcia. La ventaja del método de resonancia es que nos permite seleccionar de la susceptibilidad magnética, una contribución particular de interés relativamente débil. Este fenómeno es posible tratarlo de forma analítica, pero usualmente se vuelve algo complejo, por lo que es bueno usar métodos numéricos para la resolución del problema.

Resolviendo estas ecuaciones numéricamente, soluciones complicadas pueden ser más fáciles de manejar e incluso visualizarlas en una gráfica. También es posible usar métodos perturbativos para obtener una solución aproximada de una forma mas sencilla que resolver directamente la ecuación de Schrödinger.

Los métodos de aproximación al método analítico, como la teoría de perturbaciones, reducen la complejidad de la solución y nos permiten pasar esa información sobre la transición de estados (frecuencias de emisión o absorción). Mediante estas técnicas, es posible apreciar cómo se comporta el momento magnético en presencia del campo magnético, y cómo cambian las probabilidades de transición entre dos niveles, así como también permiten describir la dirección del momento angular (espín) en dicha transición y entender cómo la frecuencia del campo magnético influye en la resonancia magnética.

En las siguientes páginas se dará una introducción tanto a la teoría de la resonancia magnética nuclear y la del electrón en campo magnético (caso sencillo), al uso de algoritmos numéricos para la resolución de ecuaciones diferenciales y también una aproximación analítica usando teoría de perturbaciones.

## 1.2. Espín

En 1921, Landé propuso la siguiente relación para la razón giromagnética:

$$\frac{\mu_z}{L_z} = -g \frac{e}{2mc} \quad 1$$

con  $L_z$  el momento angular en  $z$ ,  $e$  la carga del electrón,  $c$  la velocidad de la luz,  $m$  la masa del electrón,  $\mu$  el momento magnético y  $g$  es un factor numérico llamado factor de Landé.

Por la misma época Otto Stern (1921) propuso un experimento para comprobar las reglas de cuantización espacial del momento angular en un campo magnético, las cuales habían sido descubiertas poco tiempo antes. Estas reglas de cuantización espacial se refieren a las distintas proyecciones que puede tener el momento magnético según se sigue de

$$\mu_z = g \frac{e_0}{2m_0c} L_z = -\mu_0 m, \quad g = 1$$

Este resultado había sido establecido por Sommerfeld en 1916 (dentro de la teoría de Bohr) y le habían llamado cuantización espacial <sup>1</sup> [1].

Tanto en la mecánica clásica como en la cuántica, la ley de conservación del momento angular es una consecuencia de la isotropía del espacio. Esto ya demuestra la relación entre el momento angular y las propiedades de simetría bajo rotaciones.[2] La formulación en general involucra la transformación de funciones de onda cuando el sistema de coordenadas está rotado.

Una función de onda  $\Psi$  de un sistema de partículas no cambia cuando hay rotación del sistema de coordenadas alrededor del eje  $z$ . La rotación que altere la dirección del eje  $z$  provoca que el momento angular en este eje no tenga valor definido por lo que la función de onda es una superposición de  $2l + 1$  funciones que tienen diferentes valores de  $m$  para un valor dado de  $l$ . Por lo tanto, la transformación depende enteramente de  $l$ , por lo que se le considera un número cuántico que clasifica los estados del sistema de acuerdo a sus propiedades de transformación bajo rotaciones del sistema de coordenadas[2].

Para una partícula compuesta como un núcleo atómico en reposo como un todo y en un estado

---

<sup>1</sup>Para más información histórica checar "*Introducción a la mecánica cuántica*", Luis de la Peña

definido, aparte de tener energía interna, posee un momento angular  $l$  debido al movimiento de las partículas dentro del núcleo,  $l$  puede tener  $2l + 1$  orientaciones diferentes en el espacio. Considerando el movimiento complejo de una partícula, además de asignar sus coordenadas, se debe introducir la proyección de su momento angular intrínseco en alguna dirección en el espacio. Esta proyección intrínseca, o propiedad de la partícula, ya sea compuesta o elemental, sólo se manifiesta en el mundo cuántico. Esto se conoce como espín y el momento debido al movimiento explícito de la partícula se llama momento angular orbital  $l$ .

### 1.2.1. Operadores de espín

Considerando lo anterior, vemos que existen dos clases de momento angular, esto es, los valores del momento angular orbital  $l$  abarcan solo un subconjunto del espectro de valores  $j$  apropiados para  $\hat{j}^2$  y  $\hat{j}_z$

Al igual que el momento angular orbital, el momento angular espinorial ( $\hat{S}$ ) obedece las siguientes reglas de conmutación:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z \quad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x \quad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \quad 1.1$$

e igual para  $\hat{S}^2$  y  $\hat{S}_z$

$$\hat{S}^2|sm_s\rangle = \hbar^2s(s+1)|sm_s\rangle \quad \hat{S}_z|sm_s\rangle = \hbar m_s|sm_s\rangle \quad 1.2$$

para un valor dado  $s$ , el número  $m_s$  corre de  $-s$  a  $s$  en pasos enteros<sup>2</sup>. Estas relaciones de conmutación nos permiten determinar los valores posibles de la magnitud absoluta y componentes del espín.[2]

Para  $s = \frac{1}{2}$  y  $m_s = \pm\frac{1}{2}$ , existen los estados de **Espín hacia arriba** (espín arriba) ( $\chi_+ = |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$ ) y **Espín hacia abajo** (espín abajo) ( $\chi_- = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ )[3]. De aquí se obtienen cuatro ecuaciones de eigenvalores:

---

<sup>2</sup>donde  $m_s$  es el número cuántico azimutal

$$\hat{S}^2\chi_+ = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_+, \quad \hat{S}_z\chi_+ = \frac{\hbar}{2}\chi_+ \quad (\text{espín arriba}) \quad 1.3$$

$$\hat{S}^2\chi_- = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_-, \quad \hat{S}_z\chi_- = -\frac{\hbar}{2}\chi_- \quad (\text{espín abajo}) \quad 1.4$$

e igual para los operadores de escalera

$$\hat{S}_+|s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s+1)}|s, m_s+1\rangle \quad 1.5$$

$$\hat{S}_-|s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)}|s, m_s-1\rangle \quad 1.6$$

entonces

$$\hat{S}_+\chi_+ = 0, \quad \hat{S}_+\chi_- = \hbar\chi_+ \quad 1.7$$

$$\hat{S}_-\chi_+ = \hbar\chi_-, \quad \hat{S}_-\chi_- = 0 \quad 1.8$$

o bien, en términos de los operadores  $\hat{S}_x$  y  $\hat{S}_y$ :

$$\begin{aligned} (\hat{S}_x + i\hat{S}_y)\chi_+ &= 0 \\ (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\chi_+ &= \hbar\chi_- \\ (\hat{S}_x + i\hat{S}_y)\chi_- &= \hbar\chi_+ \\ (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\chi_- &= 0 \end{aligned} \quad 1.9$$

Sumando y restando la primera y segunda ecuaciones obtenemos para  $\chi_+$  que

$$\begin{aligned} \hat{S}_x\chi_+ &= \frac{1}{2}\hbar\chi_- \\ \hat{S}_y\chi_+ &= \frac{i}{2}\hbar\chi_- \end{aligned} \quad 1.10$$

mientras que para  $\chi_-$

$$\begin{aligned} \hat{S}_x\chi_- &= \frac{1}{2}\hbar\chi_+ \\ \hat{S}_y\chi_- &= -\frac{i}{2}\hbar\chi_+ \end{aligned} \quad 1.11$$

Con todo esto, es posible calcular los elementos de matriz de  $\hat{S}_i$  con  $i = x, y, z$ . Los vectores  $\chi_+$  y  $\chi_-$  son eigenvectores de un operador hermitiano, y tomándolos individualmente normalizados, los elementos de matriz son

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} \langle \chi_+ | \hat{S}_x | \chi_+ \rangle & \langle \chi_+ | \hat{S}_x | \chi_- \rangle \\ \langle \chi_- | \hat{S}_x | \chi_+ \rangle & \langle \chi_- | \hat{S}_x | \chi_- \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad 1.12$$

$$\hat{S}_y = \begin{pmatrix} \langle \chi_+ | \hat{S}_y | \chi_+ \rangle & \langle \chi_+ | \hat{S}_y | \chi_- \rangle \\ \langle \chi_- | \hat{S}_y | \chi_+ \rangle & \langle \chi_- | \hat{S}_y | \chi_- \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad 1.13$$

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \langle \chi_+ | \hat{S}_z | \chi_+ \rangle & \langle \chi_+ | \hat{S}_z | \chi_- \rangle \\ \langle \chi_- | \hat{S}_z | \chi_+ \rangle & \langle \chi_- | \hat{S}_z | \chi_- \rangle \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad 1.14$$

Si tomamos  $\chi_+$  y  $\chi_-$  como vectores columna de dos dimensiones, entonces en la expresión de eigenvalores para  $\hat{S}_z$ , tomamos  $\chi_+ = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$  y sustituyendo en la ecuación de eigenvalores

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ -a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

por lo tanto  $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Repitiendo lo mismo pero para  $\chi_-$  se obtiene que  $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

Verificamos las relaciones de ortonormalidad entre los eigenestados, de modo que tenemos

$$\langle \chi_+ | \chi_- \rangle = 0 \quad 1.15 \text{ a}$$

$$\langle \chi_- | \chi_- \rangle = 1 \quad 1.15 \text{ b}$$

$$\langle \chi_+ | \chi_+ \rangle = 1 \quad 1.15 \text{ c}$$

$$\langle \chi_- | \chi_+ \rangle = 0 \quad 1.15 \text{ d}$$

### 1.2.2. Espinores

Cuando el espín es cero, la función de onda tiene solo una componente,  $\psi(0)$ , de manera que el efecto del operador de espín es reducirla a cero ( $\hat{S}\psi = 0$ ). Para una partícula con espín  $s = \frac{1}{2}$ , la función de onda de la partícula tiene 2 componentes,  $\psi(\frac{1}{2})$  y  $\psi(-\frac{1}{2})$ , por lo que la función de onda es

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi(\frac{1}{2}) \\ \psi(-\frac{1}{2}) \end{pmatrix} \quad 1.16$$

que es conocida como un espinor.

En cualquier rotación del sistema de coordenadas, las componentes del espinor sufren una transformación lineal:

$$\Psi^{1'} = a\Psi^1 + b\Psi^2 \quad \Psi^{2'} = c\Psi^1 + d\Psi^2$$

esto puede ser escrito como

$$\Psi^{\lambda'} = (\hat{U}\Psi)^\lambda \quad \hat{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

donde  $\hat{U}$  es la matriz de transformación.

Sus elementos son, en general, funciones complejas de los ángulos de rotación de los ejes de coordenadas. Ellos están conectados por relaciones que siguen de las condiciones físicas impuestas sobre el espinor como la función de onda de la partícula. [3]

### 1.3. Superposición del espín

Supongamos que se tiene un haz de electrones que contiene una distribución de orientaciones de espín. Sean los electrones en el haz incidente polarizados con espines en la dirección  $+x$ . Esto es, cada electrón está en el eigenestado  $\alpha_x$  de  $\hat{S}_x$  y tiene una función de onda de la forma

$$\Psi = Ae^{i(ky-\omega t)} \alpha_x = \frac{A}{\sqrt{2}} e^{i(ky-\omega t)} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

El haz se propaga en la dirección  $+y$ , incidiendo sobre un aparato de Stern-Gerlach cuyo campo magnético  $\mathbf{B}$  está alineado con el eje  $z$ . Podemos preguntar, ¿cuál es la probabilidad de que la medición de la componente  $z$  del espín de un electrón en el haz encuentre los valores esperados de  $+\hbar/2$  y  $-\hbar/2$ ? Para resolver esto, podemos usar el principio de superposición. Expandiendo  $\alpha_x$  en términos de los eigenvectores de  $\hat{S}_z$  nos da

$$\alpha_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_z + \beta_z) \quad 3$$

Los dos coeficientes de la expansión son iguales. Luego, la probabilidad de medición de  $S_z = +\hbar/2$

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2} = |\langle \alpha_x | \alpha_z \rangle|^2$$

y resulta igual para  $S_z = -\hbar/2$ :

$$P\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2} = |\langle \alpha_x | \beta_z \rangle|^2$$

Así, cuando un haz con todos los electrones polarizados en el estado  $\alpha_x$  penetra en un aparato Stern-Gerlach, emergen dos haces igualmente poblados. Estos haces están polarizados, con electrones en los estados  $\alpha_z$  y  $\beta_z$ .<sup>3</sup>

---

<sup>3</sup>Más información en Introductory quantum mechanics, Liboff 1997 third edition

## 1.4. Precesión de un electrón en un campo magnético

Consideramos ahora el caso de un electrón fijo (sin espín), pero que está rotando en presencia de un campo magnético constante uniforme. Se selecciona la dirección del eje  $z$  en la dirección del campo. Supondremos que el electrón está inicialmente en el estado  $\alpha_x$ :

$$\xi(0) = \alpha_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad 1.17$$

Sabemos que para un electrón su momento magnético es proporcional a su momento angular (espín) dado por

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{mc} \mathbf{S} = \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} = -\mu_b \boldsymbol{\sigma}$$

donde  $\mu_b$  es llamado el magnetón de Bohr:

$$\mu_b = \frac{|e|\hbar}{2mc}$$

y  $\boldsymbol{\sigma}$  es un vector cuyas componentes son las matrices de Pauli.

Veamos ahora cómo se obtiene la evolución del estado eespínorial  $\xi(t)$ . Escribiendo la ecuación de Schrödinger tenemos que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi = \hat{H} \xi$$

El Hamiltoniano en este caso es

$$\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{H} = \mu_b \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H} = \mu_b H \hat{\sigma}_z \quad 1.18$$

usando la matriz de Pauli en  $z$  tenemos que

$$\hat{H} = \mu_b H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad 1.19$$

Buscamos entonces la solución para el vector de estado

$$\xi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

Así, usando (1.18) en la ecuación de Schrödinger tenemos que

$$\begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = -\frac{i\Omega}{2} \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix} \quad 1.20$$

donde  $\Omega/2$  es la frecuencia de Larmor y

$$\Omega = \frac{|e|H}{mc}$$

es la llamada frecuencia de ciclotrón. De aquí se obtienen dos ecuaciones independientes

$$\begin{aligned} \dot{a} &= -\frac{i\Omega}{2}a \\ \dot{b} &= \frac{i\Omega}{2}b \end{aligned} \quad 1.21$$

cuya solución es

$$\xi(t) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i(\Omega/2)t} \\ e^{i(\Omega/2)t} \end{pmatrix} \quad 1.22$$

Se concluye que el espín del electrón precesa alrededor del eje  $z$  con frecuencia angular  $\Omega/2$  [4].

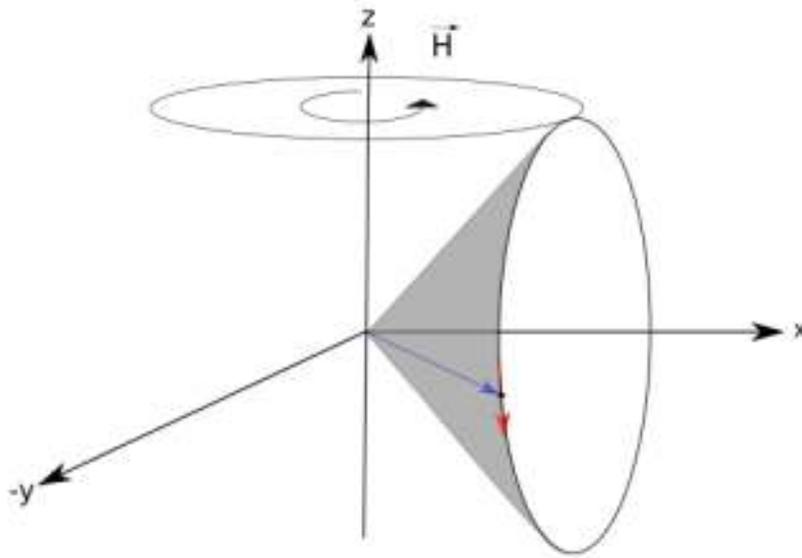


Figura 1.1 Movimiento de precesión de un electrón en un campo magnético uniforme, la línea azul es  $\hat{S}$ , y la roja la trayectoria de  $\hat{S}$  dentro del campo magnético

## 1.5. Eigenenergías

Para calcular los eigenestados y las eigenenergías, recurrimos a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\begin{aligned}\hat{H}\xi &= E\xi \\ \hat{H} &= \mu_b H \hat{\sigma}_z\end{aligned}\tag{1.23}$$

Para  $\xi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$  tenemos que

$$\mu_b H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

de aquí

$$(\mu_b H - E)a = 0$$

$$(\mu_b H + E)b = 0$$

Para  $a \neq 0$ ,  $E = \mu_b H$ ,  $b = 0$ . Si  $b \neq 0$ ,  $E = -\mu_b H$  para  $a = 0$ . Los eigenestados (normalizados) y las eigenenergías son

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad E = \mu_b H = \frac{\hbar\Omega}{2}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad E = -\mu_b H = -\frac{\hbar\Omega}{2}$$
1.24

En el estado de mayor energía, el espín del electrón es paralelo a  $\mathbf{H}$ , por lo que el momento magnético es antiparalelo a  $\mathbf{H}$  y la energía de interacción  $-\mu \cdot \mathbf{H}$  es máxima. En el estado de menor energía, el espín es antiparalelo a  $\mathbf{H}$ , por lo que el momento magnético es paralelo a  $\mathbf{H}$  y  $-\mu \cdot \mathbf{H}$  es mínima [4].

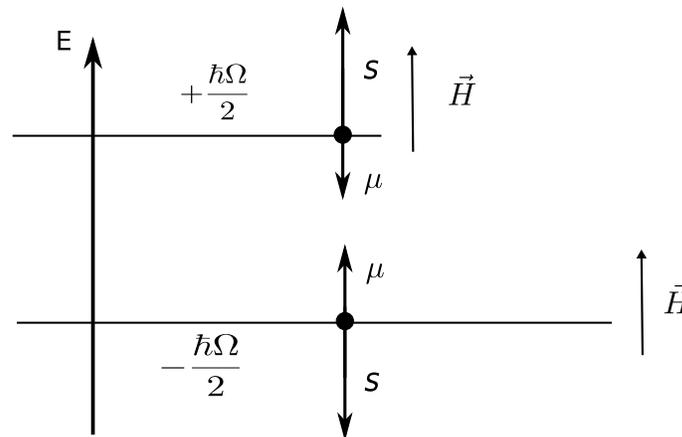


Figura 1.2 Transiciones entre los niveles de energía en presencia de un campo magnético.

## 1.6. Resonancia magnética nuclear

La ecuación (1.4) puede ser reescrita en términos del factor de Landé:

$$\boldsymbol{\mu} = -g \left( \frac{\mu_b}{\hbar} \right) \mathbf{S} \quad 1.25$$

con  $g = 2$ . Para el caso nuclear (protón, neutrón, ...) se utiliza al magnetón nuclear<sup>4</sup>

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2M_p c} = 0.0505 \times 10^{-23} \text{erg/gauss}$$

por lo tanto, el momento magnético para un protón es

$$\boldsymbol{\mu} = -g \left( \frac{\mu_N}{\hbar} \right) \mathbf{S} \quad 1.26$$

Dado el torque generado sobre el momento magnético por el campo magnético, el momento precesará alrededor del eje  $z$  (la dirección del campo) con frecuencia de Larmor. La medición del campo magnético es hecha mediante la inducción de una transición (espín flip) del momento magnético entre niveles de energía (para partícula de espín  $\frac{1}{2}$ ) paralelo y antiparalelo a  $\mathbf{H}$ . Esta transición puede definirse como la inversión del eje del espín. Imponiendo un campo magnético normal al plano formado por el eje  $z$  y  $\boldsymbol{\mu}$ , se logra un cambio en el ángulo entre  $\boldsymbol{\mu}$  y el eje  $z$ . Como el plano rota con la frecuencia de Larmor, en el esquema cuántico, se espera que ocurra una transición del momento magnético cuando la frecuencia del campo transversal rotante impuesto sea igual a la frecuencia de Larmor[4].

Para ejemplificar esto supongamos que se tiene un campo magnético cuya parte transversal ( $H_x, H_y$ ) rota con frecuencia  $\omega$ , mientras que  $H_z$  es constante, esto es:

$$H_x = H_{\perp} \cos \omega t \quad H_y = -H_{\perp} \sin \omega t \quad H_z = H_{\parallel}$$

Sustituyendo en el hamiltoniano tenemos que

$$\hat{H} = -\frac{g\mu_N}{2} \left[ H_{\perp} \cos \omega t \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - H_{\perp} \sin \omega t \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + H_{\parallel} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \quad 1.26$$

---

<sup>4</sup>Donde se cambió la masa del electrón con la del protón

de modo que la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

donde  $|\Psi\rangle$  es un espinor de la forma

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad 1.27$$

Entonces tenemos

$$\begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = i \frac{g\mu_N}{2\hbar} \left[ H_{\perp} \begin{pmatrix} 0 & \cos \omega t + i \sin \omega t \\ \cos \omega t - i \sin \omega t & 0 \end{pmatrix} + H_{\parallel} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Si ahora hacemos

$$\Omega_{\perp} = \frac{g\mu_N H_{\perp}}{2\hbar} \quad \Omega_{\parallel} = \frac{g\mu_N H_{\parallel}}{2\hbar}$$

y tomamos en cuenta que

$$e^{\pm i\omega t} = \cos \omega t \pm i \sin \omega t$$

la expresión anterior se convierte en

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} &= i \left[ \Omega_{\perp} \begin{pmatrix} 0 & \cos \omega t + i \sin \omega t \\ \cos \omega t - i \sin \omega t & 0 \end{pmatrix} + \Omega_{\parallel} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ &= i \begin{bmatrix} \Omega_{\parallel} & \Omega_{\perp} e^{i\omega t} \\ \Omega_{\perp} e^{-i\omega t} & -\Omega_{\parallel} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \end{aligned} \quad 1.28$$

De aquí, tras realizar el producto, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales de dos variables:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= i(\Omega_{\parallel} a + \Omega_{\perp} e^{i\omega t} b) \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= i(-\Omega_{\parallel} b + \Omega_{\perp} e^{-i\omega t} a) \end{aligned} \quad 1.29$$

Las condiciones iniciales para este sistema son  $a = 1$ ,  $b = 0$ , en  $t = 0$ . Se propone que la solución tenga la siguiente forma:

$$a = \bar{a}e^{i\omega_a t} \quad b = \bar{b}e^{i\omega_b t} \quad 1.30$$

de modo que al sustituir en el sistema de ecuaciones diferenciales se obtiene

$$\begin{aligned} i\omega_a \bar{a}e^{i\omega_a t} &= i(\Omega_{\perp} e^{i\omega t} \bar{b}e^{i\omega_b t} + \Omega_{\parallel} \bar{a}e^{i\omega_a t}) \\ i\omega_b \bar{b}e^{i\omega_b t} &= i(\Omega_{\perp} e^{-i\omega t} \bar{a}e^{i\omega_a t} - \Omega_{\parallel} \bar{b}e^{i\omega_b t}) \end{aligned}$$

Reagrupando términos

$$\begin{aligned} \bar{a}(\Omega_{\parallel} - \omega_a) + \Omega_{\perp} \bar{b}e^{i\omega t} e^{i\omega_b t} e^{-i\omega_a t} &= 0 \\ -\bar{b}(\Omega_{\parallel} + \omega_b) + \Omega_{\perp} \bar{a}e^{-i\omega t} e^{-i\omega_b t} e^{i\omega_a t} &= 0 \end{aligned}$$

y definiendo  $\phi = \omega_a - \omega_b - \omega$ :

$$\begin{aligned} \bar{a}(\omega_a - \Omega_{\parallel}) - \Omega_{\perp} \bar{b}e^{-i\phi t} &= 0 \\ -\Omega_{\perp} \bar{a}e^{i\phi t} + \bar{b}(\omega_b + \Omega_{\parallel}) &= 0 \end{aligned}$$

o bien en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \omega_a - \Omega_{\parallel} & -\Omega_{\perp} e^{-i\phi t} \\ -\Omega_{\perp} e^{i\phi t} & \omega_b + \Omega_{\parallel} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \end{pmatrix} = 0 \quad 1.31$$

Para que  $\bar{a}$  y  $\bar{b}$  sean independientes del tiempo, debemos hacer  $\phi = 0$ , por lo que  $\omega_a = \omega_b + \omega$ . Desarrollando el determinante e igualando a cero tenemos que

$$(\omega_b + \Omega_{\parallel})(\omega_a - \Omega_{\parallel}) - \Omega_{\perp}^2 = 0$$

y sustituyendo el valor de  $\omega_a$  en la expresión anterior obtenemos

$$\omega_b^2 + \omega_b \omega + \omega \Omega_{\parallel} - \Omega_{\parallel}^2 - \Omega_{\perp}^2 = 0$$

Resolvemos ahora esta ecuación para obtener

$$\omega_b = \frac{-\omega \pm \sqrt{\omega^2 - 4(\omega\Omega_{\parallel} - \Omega_{\parallel}^2 - \Omega_{\perp}^2)}}{2}$$

o bien

$$\omega_b = -\frac{\omega}{2} \pm \bar{\omega} \quad 1.32$$

con

$$\bar{\omega} = \frac{\sqrt{\omega^2 - 4(\omega\Omega_{\parallel} - \Omega_{\parallel}^2 - \Omega_{\perp}^2)}}{2} \quad 1.33$$

$$\bar{\omega}^2 = \left(\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}\right)^2 + \Omega_{\perp}^2 \quad 1.34$$

de aquí también podemos tener una expresión para  $\omega_a$

$$\omega_a = \frac{\omega}{2} \pm \bar{\omega} \quad 1.35$$

Estos son los únicos valores de  $\omega_a$  y  $\omega_b$  con los cuales las soluciones propuestas resuelven al sistema de ecuaciones.

La existencia de dos frecuencias para  $\omega_a$  y  $\omega_b$  corresponde a la propiedad de que la matriz representa dos ecuaciones diferenciales independientes de segundo orden en el tiempo. La solución general para  $b$  se construye como una combinación lineal de ambas componentes de la frecuencia:

$$b(t) = b_1 \exp \left[ -i \left( \frac{\omega}{2} - \bar{\omega} \right) t \right] + b_2 \exp \left[ -i \left( \frac{\omega}{2} + \bar{\omega} \right) t \right] \quad 1.36$$

Aplicando condiciones iniciales  $b_1 = -b_2$ , para  $t = 0$ , y haciendo  $b_1 = -b_2 = \frac{C}{2i}$ , entonces

$$b(t) = \frac{C}{2i} e^{-i\frac{\omega}{2}t} [e^{i\bar{\omega}t} - e^{-i\bar{\omega}t}]$$

y dado que

$$\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$$

entonces

$$b(t) = Ce^{-i\frac{\omega}{2}t} \sin \bar{\omega}t \quad 1.37$$

Sustituyendo en (1.29) para resolver  $C$  tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( Ce^{-i\frac{\omega}{2}t} \sin \bar{\omega}t \right) = i \left( \Omega_{\perp} a e^{-i\omega t} - \Omega_{\parallel} C \sin \bar{\omega}t e^{-i\frac{\omega}{2}t} \right)$$

y aplicando condiciones iniciales,  $a(0) = 1$ , tenemos que

$$\bar{\omega}C = i\Omega_{\perp}$$

de donde

$$C = i \frac{\Omega_{\perp}}{\bar{\omega}}$$

por lo tanto

$$b(t) = i \frac{\Omega_{\perp}}{\bar{\omega}} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sin \bar{\omega}t \quad 1.38$$

Para obtener  $a(t)$ , de la segunda ecuación de (1.29), sustituyendo  $b(t)$ , tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( i \frac{\Omega_{\perp}}{\bar{\omega}} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sin \bar{\omega}t \right) = i \left[ \Omega_{\perp} a e^{-i\omega t} - \Omega_{\parallel} \left( i \frac{\Omega_{\perp}}{\bar{\omega}} e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sin \bar{\omega}t \right) \right]$$

$$\left( \frac{\omega}{2\bar{\omega}} \sin \bar{\omega}t - \frac{\Omega_{\parallel}}{\bar{\omega}} \sin \bar{\omega}t \right) e^{-i\frac{\omega}{2}t} + i \cos \bar{\omega}t e^{-i\frac{\omega}{2}t} = i a e^{-i\omega t}$$

$$a = -i \frac{\sin \bar{\omega}t}{\bar{\omega}} \left( \frac{\omega}{2} - \Omega_{\parallel} \right) e^{i\frac{\omega}{2}t} + \cos \bar{\omega}t e^{i\frac{\omega}{2}t}$$

Por lo tanto

$$a(t) = \frac{\sin \bar{\omega} t}{\bar{\omega}} \left[ i \left( \Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2} \right) + \bar{\omega} \cot \bar{\omega} t \right] e^{i \frac{\omega}{2} t} \quad 1.39$$

El espinor es, por lo tanto,

$$|\xi\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \frac{\sin \bar{\omega} t}{\bar{\omega}} \begin{pmatrix} [i (\Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2}) + \bar{\omega} \cot \bar{\omega} t] e^{i \frac{\omega}{2} t} \\ i \Omega_{\perp} e^{-i \frac{\omega}{2} t} \end{pmatrix} \quad 1.40$$

De acuerdo con las condiciones iniciales, el espinor está normalizado, ya que  $|a(0)|^2 + |b(0)|^2 = 1$ . Esta normalización debe mantenerse para todo tiempo posterior  $t$ , esto es, debe cumplirse que  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  para todo  $t$  [4].

Ahora, la norma del espinor es

$$\begin{aligned} \langle \xi | \xi \rangle &= |\xi|^2 = |a|^2 + |b|^2 = a^* a + b^* b \\ &= \frac{\sin^2 \bar{\omega} t}{\bar{\omega}^2} \left[ \left( \Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2} \right)^2 + \bar{\omega}^2 \cot^2 \bar{\omega} t \right] + \frac{\sin^2 \bar{\omega} t}{\bar{\omega}^2} \Omega_{\perp}^2 \\ &= \frac{\sin^2 \bar{\omega} t}{\bar{\omega}^2} \left[ \left( \Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2} \right)^2 + \Omega_{\perp}^2 \right] + \cos^2 \bar{\omega} t \end{aligned}$$

y como

$$\bar{\omega}^2 = \left( \Omega_{\parallel} - \frac{\omega}{2} \right)^2 + \Omega_{\perp}^2$$

entonces

$$\langle \xi | \xi \rangle = \sin^2 \bar{\omega} t + \cos^2 \bar{\omega} t = 1 \quad 1.41$$

lo que comprueba que  $|\xi\rangle$  está normalizado. De la parte de espín abajo, es posible calcular la frecuencia de resonancia, donde  $\omega$  se iguala a  $H_{\parallel}$ , el cual nos da lo siguiente

$$\omega = 2\Omega_{\parallel} = \frac{g\mu_N H_{\parallel}}{\hbar} \quad 1.42$$

## 2. *Usando simulaciones de computadora y visualizaciones*

### 2.1. **Modelo de resonancia eléctrica**

A menudo es bueno distinguir entre corrientes ligadas y corrientes libres. Las corrientes ligadas son corrientes asociadas con los momentos magnéticos o moleculares, incluyendo el momento magnético intrínseco de las partículas con espín. Estas son las espiras de corriente molecular previstas por Ampère. Las corrientes libres son las corrientes de conducción ordinaria que circulan en caminos macroscópicos: corrientes que pueden iniciarse o detenerse mediante un interruptor y pueden ser medidas con un amperímetro. Ya teniendo una idea introductoria es posible dar un ejemplo de un campo magnético de esta clase, con el fin de visualizar un fenómeno de resonancia magnética.

Sea un grupo de espines expuestos a un campo magnético de la forma

$$\mathbf{H} = H_0 \hat{z} + H_1 \cos \omega t \hat{x} \quad H_0 \gg H_1 \quad 2.1$$

donde se debe recordar que el campo  $\mathbf{H}$  está dado en términos de la magnetización y el campo magnético:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M}$$

El campo magnético externo divide los niveles atómicos y remueve la degeneración con respecto a las direcciones del momento angular total (efecto Zeeman).

El campo estático grande  $H_0$  crea un salto de energía  $\Delta E \propto H_0$  entre estados del espín arriba y espín abajo vía efecto Zeeman. Transiciones entre estos estados requieren la emisión y absorción de energía  $\Delta E$  (en forma de fotones) y esta emisión se puede medir experimentalmente. El pequeño campo oscilatorio  $H_1$  induce transiciones entre los dos estados.

En la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad 2.2$$

donde  $|\psi(t)\rangle$  representa el estado cuántico como una función del tiempo  $t$ , y  $\hat{H}$  es el operador hamiltoniano, para una partícula de espín  $1/2$ ,  $|\psi(t)\rangle$  puede ser expresado como un espinor:

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \quad 2.3$$

donde  $a(t)$  es la amplitud de probabilidad para el estado de espín arriba y  $b(t)$  es la amplitud de probabilidad para el estado espín abajo.

Las probabilidades dependientes del tiempo correspondientes son  $p_a(t) = |a(t)|^2$ , con el espín orientado a lo largo del eje  $+z$ , y  $p_b(t) = |b(t)|^2$ , con el espín orientado a lo largo del eje  $-z$ . Se debe indicar que el análisis está limitado al estudio del átomo de hidrógeno debido a que es el estándar en el estudio de fenómenos de transición y de ondas en la mecánica cuántica. En este caso, para obtener el hamiltoniano de una partícula dentro de un campo magnético, el operador hamiltoniano para un espín en un campo magnético está dado por

$$\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \mathbf{H}(t)$$

donde  $\hat{\mu}$  es el operador de momento magnético; para un protón

$$\hat{\mu} = g\mu_N \frac{\hat{\mathbf{S}}}{\hbar}$$

con  $g \approx 2$  (factor de Landé o factor giromagnético) para el electrón,  $\mu_B = 9.27400999 \times 10^{-24} JT^{-1}$  es el magnetón de Bohr,<sup>1</sup> y  $\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$  es el operador de espín. Sustituimos las relaciones para  $\hat{\mu}$  y  $\mathbf{H}(t)$  en el Hamiltoniano y definiendo  $\hat{s} = \hat{\mathbf{S}}/\hbar$  encontramos que

$$\hat{H}(t) = -g\mu_N \hat{s}_z H_0 - g\mu_N \hat{s}_x H_1 \cos \omega t \quad 2.4$$

---

<sup>1</sup>El magnetón nuclear es aproximadamente  $5.0507 \times 10^{-27} JT^{-1}$ .

Si ahora dividimos ambos lados de la ecuación entre  $\hbar$  y definimos los parámetros  $\omega_0 = g\mu_N H_0/\hbar$  y  $\omega_1 = g\mu_N H_1/\hbar$ , podemos escribir

$$\hat{H}(t)/\hbar = -\omega_0 \hat{s}_z - \omega_1 \hat{s}_x \cos \omega t \quad 2.5$$

Los operadores  $\hat{s}_z$  y  $\hat{s}_x$  pueden ser representados en términos de las matrices de Pauli

$$\hat{s}_z \longrightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_z \quad \text{y} \quad \hat{s}_x \longrightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_z \quad 2.6$$

El subíndice  $z$  significa que el eje  $z$  está orientado en la dirección del campo. Sustituyendo en el hamiltoniano tenemos que

$$\frac{\hat{H}(t)}{\hbar} = -\frac{\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_z - \frac{\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_z \cos \omega t$$

o bien

$$\frac{\hat{H}(t)}{\hbar} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & 0 \\ 0 & -\omega_0 \end{pmatrix}_z - \frac{\omega_1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \cos \omega t \\ \cos \omega t & 0 \end{pmatrix}_z$$

entonces

$$\frac{\hat{H}}{\hbar} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \cos \omega t \\ \omega_1 \cos \omega t & -\omega_0 \end{pmatrix}_z \quad 2.7$$

La ecuación de Schrödinger se convierte en

$$i \begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix}_z = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \cos \omega t \\ \omega_1 \cos \omega t & -\omega_0 \end{pmatrix}_z \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_z \quad 2.8$$

De aquí

$$\begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix}_z = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \cos \omega t \\ \omega_1 \cos \omega t & -\omega_0 \end{pmatrix}_z \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_z \quad 2.9$$

donde los puntos sobre  $a$  y  $b$  representan derivadas con respecto al tiempo. Multiplicando la matriz y el vector en el lado derecho de la Ec. (2.9), obtenemos una ecuación con un vector que es equivalente a dos ecuaciones escalares. Pero  $a$  y  $b$  son funciones complejas,  $a = a_r + ia_i$  y  $b = b_r + ib_i$ , las cuales pueden ser escritas en términos de cuatro funciones escalares reales:  $a_r$ ,  $a_i$ ,  $b_r$  y  $b_i$

$$\begin{pmatrix} \dot{a}_r + i\dot{a}_i \\ \dot{b}_r + i\dot{b}_i \end{pmatrix}_z = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \omega_0(a_r + ia_i) & + \omega_1(b_r + ib_i) \cos \omega t \\ \omega_1(a_r + ia_i) \cos \omega t & - \omega_0(b_r + ib_i) \end{pmatrix}_z \quad 2.10$$

Resolviendo separadamente las partes real e imaginaria de los lados izquierdo y derecho, obtenemos las siguientes cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden reales:

$$\dot{a}_r = -\frac{1}{2} [\omega_0 a_i + \omega_1 b_i \cos \omega t] \quad 2.11 \text{ a}$$

$$\dot{a}_i = \frac{1}{2} [\omega_0 a_r + \omega_1 b_r \cos \omega t] \quad 2.11 \text{ b}$$

$$\dot{b}_r = \frac{1}{2} [\omega_0 b_i - \omega_1 a_i \cos \omega t] \quad 2.11 \text{ c}$$

$$\dot{b}_i = -\frac{1}{2} [\omega_0 b_r - \omega_1 a_r \cos \omega t] \quad 2.11 \text{ d}$$

Se ha obtenido un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales de primer orden, con cuatro variables a resolver.

Ahora, es posible transferir estas ecuaciones a un lenguaje de programación, donde se podrán resolver mediante un algoritmo ejecutable; en este caso se seleccionó python por su facilidad a la hora de programar. Esto no significa que no pueda programarse en otro lenguaje, sino que se puede elegir el que sea de mayor familiaridad con el usuario.

## 2.2. Sobre simulación y probabilidades

Los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas o simplemente no lineales no siempre se pueden resolver analíticamente, y por ello es frecuente recurrir a procedimientos numéricos. Para lograr eso se toman pequeños pasos de tiempo  $t \rightarrow \Delta t$ . A cada paso de tiempo, actualizamos cada uno de las funciones de tiempo desconocidas. Mediante las paqueterías de python, específicamente Scipy y Matplotlib, se recurre a ODEINT<sup>2</sup>, el cual contiene una implementación de los métodos de Adams para multipasos.

Para obtener soluciones numéricas de las ecuaciones, se requieren valores de arranque (condiciones iniciales), para  $a_r, a_i, b_r, b_i$ , el tamaño de paso de tiempo  $\Delta t = 0.1$  ns, el intervalo de tiempo, que en este caso se hizo en 200 ns, partiendo de  $t = 0$ , y los parámetros  $\omega$ ,  $\omega_1$  y  $\omega_0$ . Todo esto se requiere para calcular las pendientes  $\dot{a}_r, \dot{a}_i, \dot{b}_r, \dot{b}_i$ .

Al transferir todos los datos a un código en python, en el cual los valores utilizados para los parámetros fueron  $\omega_0 = 1.0$ ,  $\omega_1 = 0.1$  y  $\omega = 1.0$ <sup>3</sup>, con condiciones iniciales de

$$a_r = 1.0$$

$$a_i = 0.0$$

$$b_r = 0.0$$

$$b_i = 0.0$$

y con un paso de tiempo  $\Delta t = 0.1$  ns, se calculó el resultado del sistema de ecuaciones diferenciales usando el algoritmo de Adams-Moulton.

---

<sup>2</sup>Esta paquetería puede llamar al algoritmo LSODA, el cual es un algoritmo en Fortran que resuelve sistemas de ecuaciones diferenciales ya sean rígidas o no, y al identificarlos mediante una densidad jacobiana, usa métodos de Adams(no rígidos) y rígidos.

Un sistema rígido es uno que tiene componentes que cambian rápidamente, junto con componentes de cambio lento. En muchos casos, las componentes de variación rápida son transitorios, desaparecen rápidamente, después de lo cual las componentes de variación lenta son los que dominan la solución.

<sup>3</sup>Frecuencia que cae en el espectro de microondas.

Una vez obtenidos los resultados, se recolectan los datos de las ecuaciones que representan al elemento del espinor  $b$ , que contiene los valores de probabilidad para el espín abajo, y obteniendo el valor esperado de  $b$ , se genera la siguiente gráfica usando el paquete matplotlib de python (Fig.2.1):

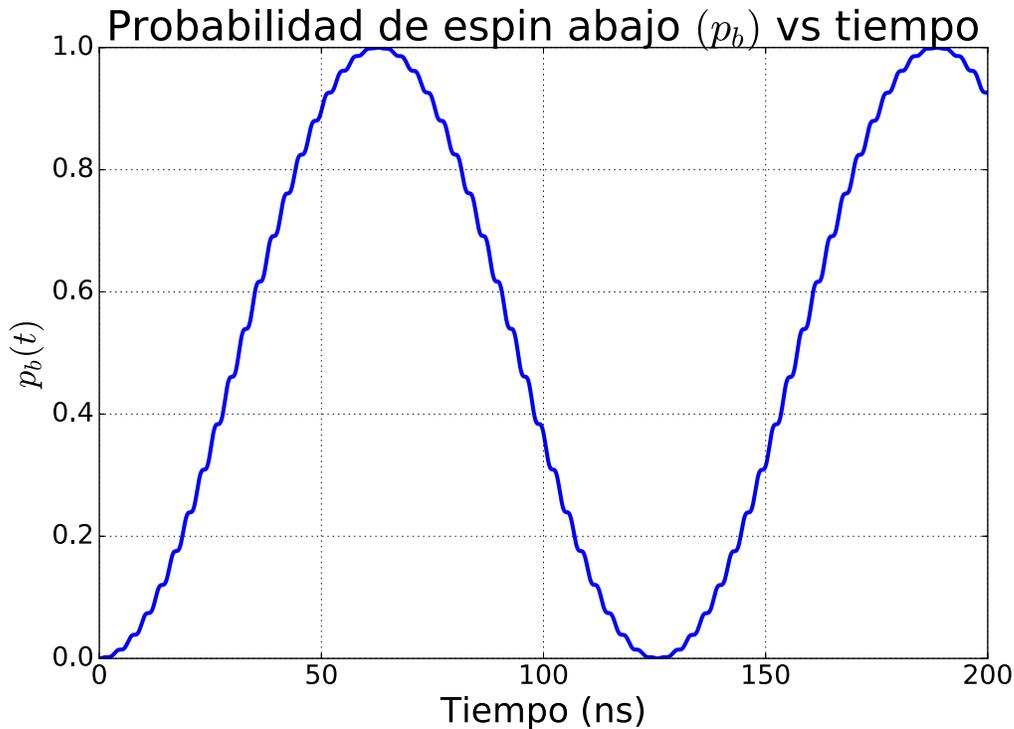


Figura 2.1 Gráfica de los valores esperados de  $b$ , que llamamos  $p_b$ , con  $\omega_1 = 0.1$  GHz, y  $\omega_0 = \omega = 1$  GHz.

Las intensidades de campo son aproximadamente  $H_0 = 5.685 \times 10^{-5}$  Gigateslas y  $H_1 = 5.685 \times 10^{-6}$  Gigateslas, es decir, una diferencia entre los valores de un orden de magnitud. Se observan ciertas perturbaciones para los valores esperados de  $b$ , por lo que la gráfica no es completamente limpia en la definición de las transiciones. El periodo es  $\tau \approx 126$  ns, el estado de espín oscila de arriba hacia abajo (de  $t = 0$  a  $t = \tau$ ). La inversión de espín, que es el cambio del eje del vector de espín, es muy sensible a  $\omega_1$ ,  $\omega_0$  y  $\omega$ . Si  $\omega_0 \neq \omega$ ,  $p_b$  nunca alcanza a 1, sino que oscila entre 0 y un valor máximo que podemos denotar como  $p_{flip}(\omega) = \max(p_b)$  [5], y la anchura (anchura completa al máximo medio del pico) es igual a  $\omega_1$ .

Para el espín arriba tenemos que



Figura 2.2 Gráfica de espín arriba vs tiempo;  $t = 200$  ns para  $\omega_0 = \omega = 1$  GHz y  $\omega_1 = 0.1$  GHz.

En la figura 2.2 es de esperarse que ocurra el cambio de espín en sentido contrario, lo que refleja una gráfica similar, pero al revés. También podemos deducir el estado de espín arriba en la primera gráfica; cuando  $p_b = 0$ , entonces  $p_a = 1$  y viceversa. Nótese que existen las mismas ondulaciones, por lo que la causa de esto es la misma que para el espín abajo, lo cual se discutirá más adelante.

Para soluciones usando métodos de Runge-Kutta para orden 4, tenemos la gráfica en la figura 2.3

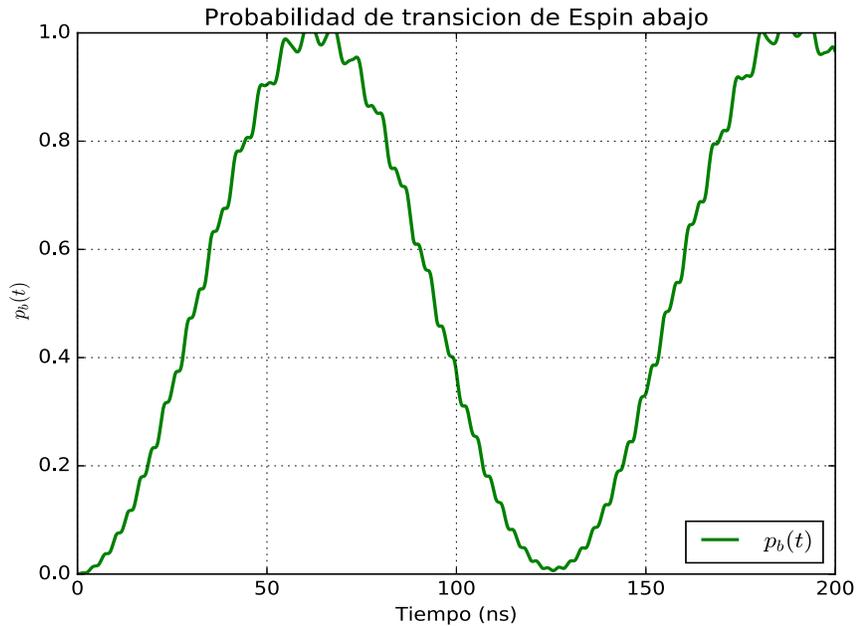


Figura 2.3 Gráfica de la probabilidad de espín abajo  $p_b$  vs  $t$ , usando algoritmo RK4, con  $t = 200$  ns,  $\omega_0 = \omega = 1.0$  GHz,  $\omega_1 = 0.1$  GHz.

En esta gráfica se observan más ondulaciones lo cual muestra una precisión menor comparada con la gráfica anterior de  $p_b$ , la cual fue obtenida mediante un método multipaso (predictor-corrector o de Adams). También hay que notar que existen ciertos puntos desechables (puntos que pasan del 1 en el eje de las ordenadas), por lo que se descartan. El propósito de esto es de comparación de resultados para observar la precisión de los métodos de resolución de ecuaciones diferenciales. Hay que dejar en claro que el algoritmo de Runge-Kutta es relativamente más sencillo de programar en comparación con el de Adams (Adams-Moulton). En el apéndice D se puede apreciar el código para generar la gráfica.

El  $p_{flip}$  depende de  $\omega_1$  cuando  $\omega \neq \omega_0$ , y cuando  $\omega_1$  disminuye por un orden de magnitud,  $p_{flip}$  decrece dos órdenes de magnitud, lo cual es consistente con la fórmula de Rabi<sup>4</sup>:

$$p_{flip} \propto \omega_1^2 \quad \text{para} \quad \omega_1^2 \ll (\omega_0 - \omega)^2 \quad 2.12$$

Usando valores pequeños de  $\omega_1$  es posible observar con precisión si o no  $\omega = \omega_0$ , y esto nos brinda información acerca de campos magnéticos microscópicos que contribuyen a  $H_0$  ( $\omega_0 \propto H_0$ ), incluso en campos débiles.

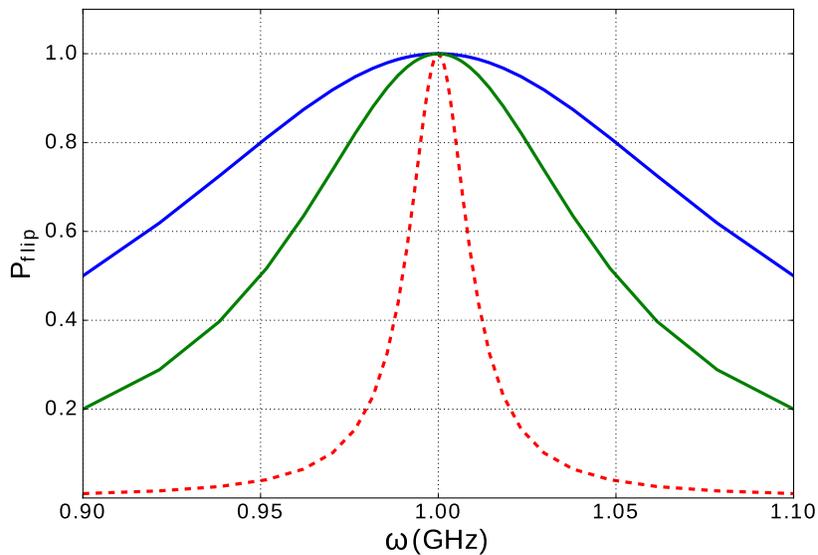


Figura 2.4 Gráfica que muestra la probabilidad de inversión de espín para varios valores de  $\omega_1$ . La línea azul es para  $\omega_1 = 0.10$  GHz, la roja es para  $\omega_1 = 0.01$ GHz, y la verde es para  $\omega_1 = 0.05$ GHz.

En la figura 2.4 se aprecian los picos para los máximos valores de  $p_b$ , en los cuales ocurre una inversión del espín; en este caso se recurre a un espaciado logarítmico para obtener más puntos en medio de la gráfica.

Para esta gráfica se utilizan varios valores de  $\omega_1$  en un intervalo de tiempo de  $t = [0, 2.1\pi/\omega_1]$ .

<sup>4</sup>La frecuencia de Rabi mide la intensidad del acoplamiento entre estados atómicos y el campo electromagnético aplicado. Más información en King B.E. "Angular Momentum Coupling and Rabi Frequencies for Simple Atomic Transitions", 2008

### 2.3. Análisis espectral

Ahora consideramos las oscilaciones de baja amplitud, y de frecuencia alta, vistas en la gráfica de  $p_b$ . Para encontrar cuáles frecuencias contribuyen a  $p_b(t)$  para un grupo dado de valores de parámetros ( $\omega$ ,  $\omega_1$ ,  $\omega_0$ ), generaremos el espectro de potencia de  $p_b(t)$ . Para analizar funciones no periódicas se recurre a las transformadas de Fourier. Se puede pasar de las series de Fourier a las transformadas de Fourier imaginando un sistema descrito por un continuo de frecuencias fundamentales. Por lo que trataremos con paquetes de onda que contienen frecuencias continuas en vez de discretas.<sup>5</sup>

La transformada de Fourier es de la forma

$$Y(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} y(t) dt \quad 2.13$$

Esto nos permite transformar una función con términos dependientes del tiempo en términos dependientes de la frecuencia.

El espectro de potencia  $Y(\omega')$  está definido como el módulo cuadrado de la transformada de Fourier de  $p_b(t)$  ( $|Y(\omega')|^2$ ) y proporciona una medida cuantitativa de cómo está representada cada frecuencia ( $\omega'$ ) en  $p_b(t)$ . Para los datos presentados en esta sección, generamos  $p_b(t)$  usando  $\Delta t = 0.1$  ns para  $0 \leq t \leq 10^4$  ns, lo cual proporcionó una separación de  $\Delta\omega' = 2\pi/(10^4$  ns) entre valores adjuntos de  $\omega'$ ; esto es, valores grandes de  $t$  son requeridos para generar  $Y(\omega')$  con alta resolución. La figura 2.5 muestra  $Y(\omega')$  para varios valores de  $\omega$ , usando valores fijos para  $\omega_0 = 1.0$  GHz y  $\omega_1 = 0.1$  GHz [5].

---

<sup>5</sup>En cálculo numérico la distinción entre serie continua y discreta se elimina debido a que la computadora hará una suma de cientos de números cuyo tamaño es muy pequeño, casi como si fuera continuo.

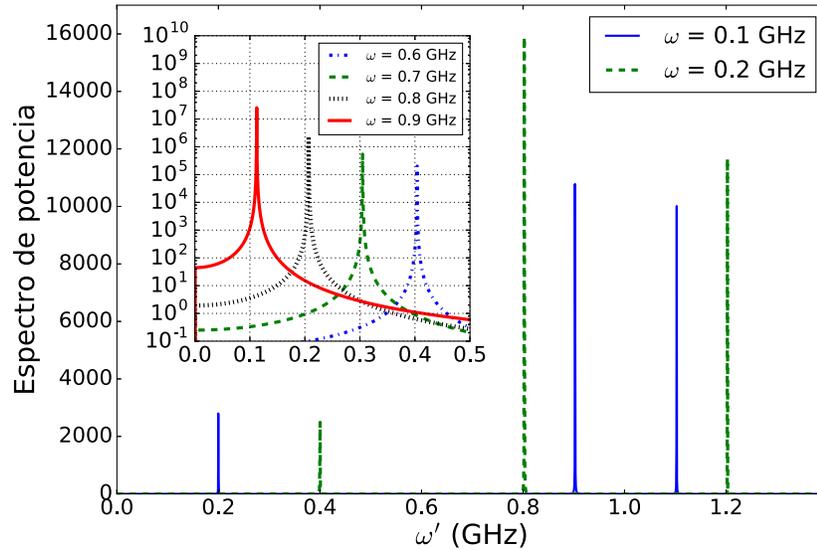


Figura 2.5 El espectro de potencia  $Y(\omega')$  contra  $\omega'$  (ambos en la figura principal y el inserto) con  $\omega_0 = 1.0$  GHz y  $\omega_1 = 0.1$  GHz para diferentes valores de  $\omega$  y condiciones iniciales arbitrarias.

Para cada valor de  $\omega$ , tres picos distintos pueden ser captados en la figura 2.5, asociados con las frecuencias  $\omega' = 2\omega$  y  $\omega' = \omega_0 \pm \omega$ . Nótese que para  $\omega \ll \omega_0$ , como es el caso para la figura principal,  $p_b(t) \ll 1$  y las localizaciones de los picos en  $Y(\omega')$  son independientes de  $\omega_1$  (aunque las alturas de los picos dependen de  $\omega_1$ ). El inserto de la figura 2.5 muestra también  $Y(\omega')$  para valores grandes de  $\omega$  aproximando  $\omega = \omega_0$  en una escala semilogarítmica. La altura de los picos de baja frecuencia crece exponencialmente como  $\omega \rightarrow \omega_1$  (en el inserto), lo cual corresponde a las oscilaciones de altas amplitudes y de baja frecuencia en  $p_b(t)$  y  $p_{flip} \rightarrow 1$ . Nótese que como  $\omega \rightarrow \omega_1$  este pico no está del todo localizado en  $\omega = \omega_0 - \omega$ . En vez de eso,  $\omega' > \omega_0 - \omega$  por una cantidad que depende de  $\omega_1$ .

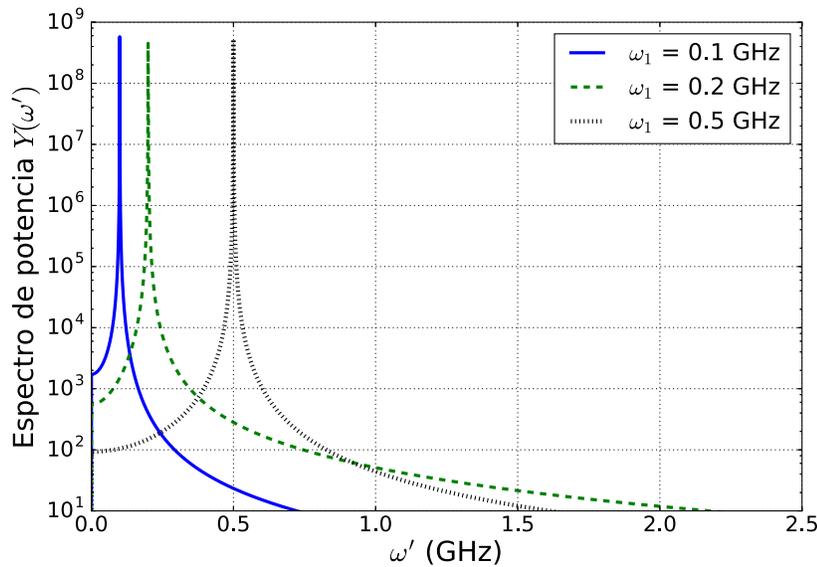


Figura 2.6 El espectro de potencia  $Y(\omega')$  contra  $\omega'$  para  $\omega = \omega_0 = 1.0$  GHz (a la resonancia) para tres valores de  $\omega_1$  y condiciones iniciales arbitrarias.

En la gráfica para  $Y(\omega')$  vs  $\omega'$  se observan diferentes valores de  $\omega$  cuando la condición de resonancia  $\omega = \omega_0 = 1$  GHz; las localizaciones de los picos dependen de  $\omega_1$ . De nuevo existen tres diferentes picos, pero ahora las localizaciones de los picos dependen de  $\omega_1$ . Hay un gran pico en  $\omega' = \omega_1/2$  y dos picos más pequeños en  $\omega' = 2\omega_0 \pm \omega_1/2$ . El gran pico en  $Y(\omega')$  a  $\omega' = 0.05$  GHz corresponde a un periodo de  $2\pi/\omega' = 4\pi/\omega_1$  o  $\tau \approx 126$  ns de la figura 2.3. Los dos picos más pequeños a  $\omega' = 0.95$  y  $\omega' = 1.05$  GHz de la figura 2.5, son responsables por las pequeñas oscilaciones en la figura 2.3. Estos picos pequeños corresponden a pulsaciones de baja amplitud, con frecuencia de pulso de  $\omega_0 = 0.1$  GHz o un periodo de  $\tau \approx 126$  ns, tal que las pequeñas oscilaciones se desvanecen cuando  $p_b$  es igual a 1 (espín abajo).

El periodo de las oscilaciones individuales es  $2\pi/2\omega_0$ , lo cual implica que el número de pequeñas oscilaciones entre  $t = [0, \tau]$  es  $2\omega_0/\omega_1$  (razón de los periodos), y esa es la razón por la cual vemos 20 oscilaciones entre cada inversión de espín en  $p_b(t)$ . En la gráfica  $Y(\omega')$  para  $\omega = \omega_0 = 1$  GHz se ve que la altura de los picos en  $\omega' = 2\omega_0 \pm \omega_1/2$  decrece como  $\omega_1 \rightarrow 0$  y así se puede pensar que esta característica no es relevante al experimento porque  $\omega_1 \ll \omega_0$  típicamente.

## 2.4. Solución numérica de la resonancia magnética nuclear

Retomando lo anterior, este análisis no se limita solamente al campo magnético  $\mathbf{H}$  inicial. Es posible cambiar el campo de acuerdo a la necesidad de observar el fenómeno ya que con el código se tiene un ambiente controlado. La ventaja de esto es que se puede predecir los movimientos de pasar a un gas de electrones en un campo  $\mathbf{H}$ , mediante parámetros adecuados.

Pero ahora, supongamos que los efectos del campo magnético rotante recaen en el protón, el cual tiene un factor giromagnético de  $g \approx 5.6$ , entonces se recurre al magnetón nuclear  $\mu_N \approx 5.050783699 \times 10^{-27} J \cdot T^{-1}$ . Por ejemplo, si la Ec. 2.1 toma la forma

$$\mathbf{H} = H_0 \hat{z} + H_1 (\cos \omega t \hat{x} + \sin \omega t \hat{y}) \quad 2.14$$

ahora vemos que hay un elemento en el eje  $y$  del campo que afecta al protón con espín. Y de igual forma que en el caso anterior, las ecuaciones de movimiento a resolver son

$$\dot{a}_r = \frac{1}{2} (\omega_0 a_i + \omega_1 \cos \omega t b_i - \omega_1 b_r \sin \omega t) \quad 2.15 \text{ a}$$

$$\dot{a}_i = -\frac{1}{2} (\omega_0 a_r + \omega_1 \cos \omega t b_r + \omega_1 b_i \sin \omega t) \quad 2.15 \text{ b}$$

$$\dot{b}_r = -\frac{1}{2} (\omega_0 b_i - \omega_1 \cos \omega t a_i - \omega_1 a_r \sin \omega t) \quad 2.15 \text{ c}$$

$$\dot{b}_i = \frac{1}{2} (\omega_0 b_r - \omega_1 \cos \omega t a_r + \omega_1 a_i \sin \omega t) \quad 2.15 \text{ d}$$

similar al caso anterior, pero ahora se introduce la parte de  $H_1$  en el eje  $y$ .

La gráfica de  $p_b$ , usando los mismos datos y condiciones iniciales que en el caso anterior, se aprecia en la figura 2.7

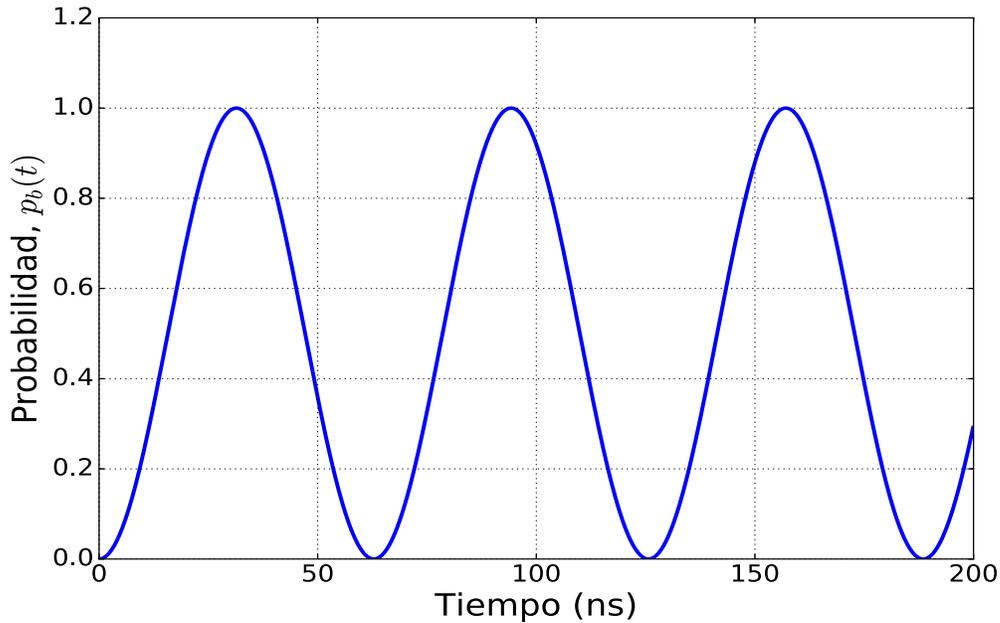


Figura 2.7 Probabilidad de transición espín abajo para  $\omega_1 = 0.1$  GHz,  $\omega = \omega_0 = 1$  GHz

A diferencia de la gráfica 2.1, se observan más transiciones durante el mismo periodo de tiempo, en este caso tres transiciones. Lo que se puede notar es que debido a la influencia de  $H_1$ , no se producen las pequeñas ondulaciones generadas en 2.1.

Se ha explicado que cuando no se cumple la condición de resonancia,  $p_b \neq 1$ , es posible visualizar cambiando las frecuencias (o el campo magnético), mediante la manipulación del algoritmo el cual puede visualizarse en la figura 2.8.

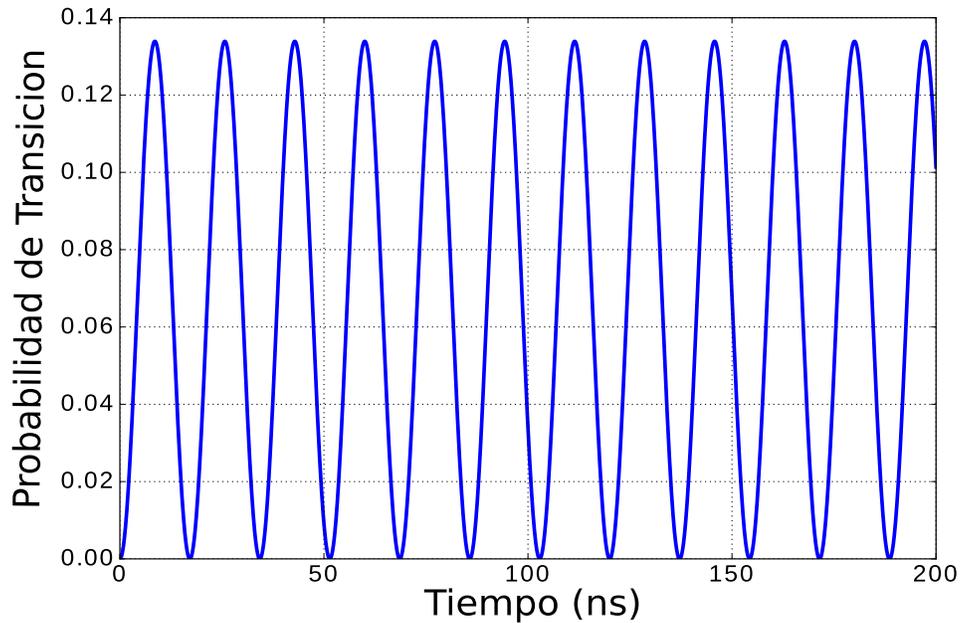


Figura 2.8 Gráfica de la probabilidad de espín abajo  $p_b(t)$ , para  $H_0 = 5$  y  $H_1 = 0.5$ , para  $\omega = 1$  GHz,  $\omega_0 = 1.34$  GHz, y  $\omega_1 = 0.13$  GHz. Las condiciones iniciales son las mismas que para el primer caso.

En esta gráfica tampoco se observan las pequeñas ondulaciones causadas por las oscilaciones durante la inversión de espín. Esto puede deberse a que ahora el campo magnético presente contiene un elemento en la coordenada  $y$ , por lo que la rotación del campo ocurre a lo largo del plano  $xy$ . Ahora la probabilidad de  $p_b$  no alcanza a ser 1, sino que se queda en un valor  $p_b$  máximo, que en este caso fue de  $p_b \approx 0.14$ .

De igual manera que en el anterior, es posible aplicar un tratamiento espectral, donde se calculen los espectros de potencia para analizar las frecuencias en la resonancia magnética nuclear.

El espectro de potencia para  $p_b$  se calcula igual como en el caso anterior. Los resultados se muestran en la figura 2.9.

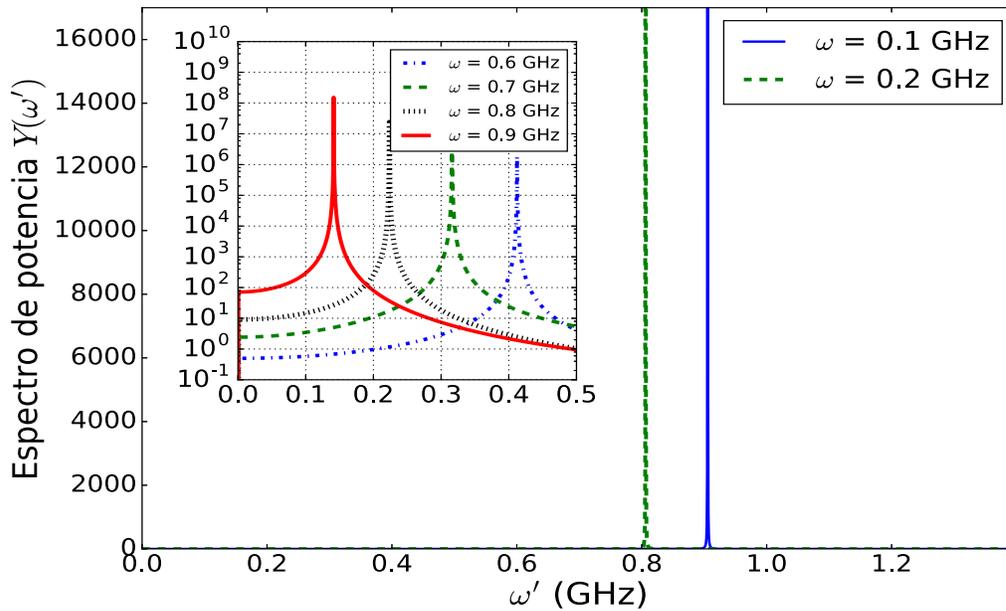


Figura 2.9 El espectro de potencias  $Y(\omega')$  vs  $\omega'$  para el caso de resonancia magnética nuclear con  $\omega_0 = 1.34$  GHz y  $\omega_1 = 0.13$  GHz para varias frecuencias angulares.

En esta gráfica solo se observan manifestaciones de las frecuencias a frecuencias mayores a 1 GHz, lo que muestra una gráfica más limpia en términos de que no se observan tantas frecuencias pequeñas debido a la transformada de Fourier. Se debe recordar que  $\omega_0 \neq \omega$ .

## 2.5. Resonancia magnética nuclear para caso ideal

Para el caso “ideal”<sup>6</sup>, se tiene un campo magnético de la forma

$$\mathbf{H} = H_1 \cos \omega t \hat{x} - H_1 \sin \omega t \hat{y} + H_0 \hat{z} \quad 2.16$$

con el correspondiente hamiltoniano de la forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2} \left[ \omega_1 \begin{pmatrix} 0 & \cos \omega t + \sin \omega t \\ \cos \omega t - \sin \omega t & 0 \end{pmatrix} + \omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \quad 2.17$$

Sustituyendo en la ecuación de Schrödinger tenemos que

$$\begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = \frac{i}{2} \left[ \omega_1 \begin{pmatrix} 0 & \cos \omega t + \sin \omega t \\ \cos \omega t - \sin \omega t & 0 \end{pmatrix} + \omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad 2.18$$

e igual que en los casos anteriores

$$\begin{pmatrix} \dot{a}_r + i\dot{a}_i \\ \dot{b}_r + i\dot{b}_i \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i\omega_0 a_r - \omega_0 a_i + i\omega_1 b_r \cos \omega t - \omega_1 b_r \sin \omega t - \omega_1 b_i \cos \omega t - i\omega_1 b_i \sin \omega t \\ i\omega_1 a_r \cos \omega t + \omega_1 a_r \sin \omega t - \omega_1 a_i \cos \omega t + i\omega_1 a_i \sin \omega t - i\omega_0 b_r + \omega_0 b_i \end{pmatrix} \quad 2.19$$

se genera un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales de 4 variables

$$\dot{a}_r = -\frac{1}{2} (\omega_0 a_i + \omega_1 b_r \sin \omega t + \omega_1 b_i \cos \omega t) \quad 2.20 \text{ a}$$

$$\dot{a}_i = \frac{1}{2} (\omega_0 a_r + \omega_1 b_r \cos \omega t - \omega_1 b_i \sin \omega t) \quad 2.20 \text{ b}$$

$$\dot{b}_r = \frac{1}{2} (\omega_0 b_i + \omega_1 a_r \sin \omega t - \omega_1 a_i \cos \omega t) \quad 2.20 \text{ c}$$

$$\dot{b}_i = \frac{1}{2} (\omega_1 a_r \cos \omega t + \omega_1 a_i \sin \omega t - \omega_0 b_r) \quad 2.20 \text{ d}$$

La solución para el espín abajo, se ilustra en la gráfica de la figura 2.10.

---

<sup>6</sup>Al decir ideal, se refiere a que esta forma del campo magnético es utilizado comúnmente en libros de mecánica cuántica

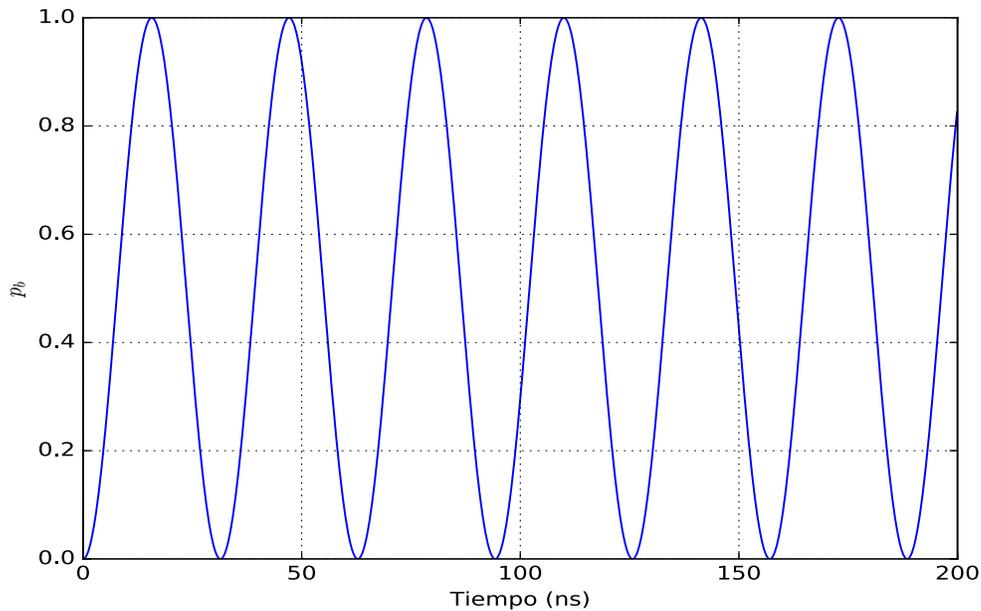


Figura 2.10 Probabilidad de transición para espín abajo, a la frecuencia de resonancia. Caso ideal.

En contraste, comparándolo con la expresión para el caso ideal obtenido del método analítico, y usando los mismos valores de  $H$  y las frecuencias, se generó la siguiente gráfica en *Mathematica* (Figura 2.11).

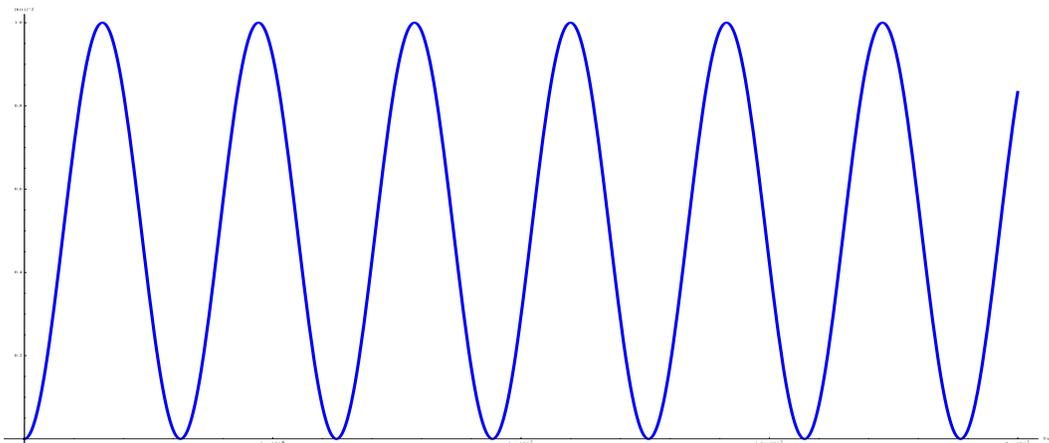


Figura 2.11 Probabilidad de transición para  $b(t)$  mediante el método analítico. El eje horizontal es el tiempo en segundos y el eje vertical es  $p_{flip}$

Como se aprecia, la solución numérica es compatible con lo obtenido usando el método analítico, y al igual que en el caso analítico, no existen estas discrepancias durante las transiciones entre los dos estados. Como se aprecia, la condición de resonancia que fue obtenida del caso analítico, se cumple igual para el caso numérico.

El periodo de cada transición es de aproximadamente 17 ns. Comparándolo con el comportamiento del primer campo propuesto para el átomo de hidrógeno, los periodos de transición son menores para los mismos datos de frecuencia de campo y de rotación. Aquí se nota cómo el elemento de campo para el eje  $y$  altera el periodo de las transiciones entre los dos estados. Por supuesto que si no se cumple la condición de resonancia, la probabilidad de transición se encontrará entre 0 y  $p_{flip}$ .

Realizando un análisis espectral, tenemos que para el caso ideal el espectro de potencia para varios valores de  $\omega$  es

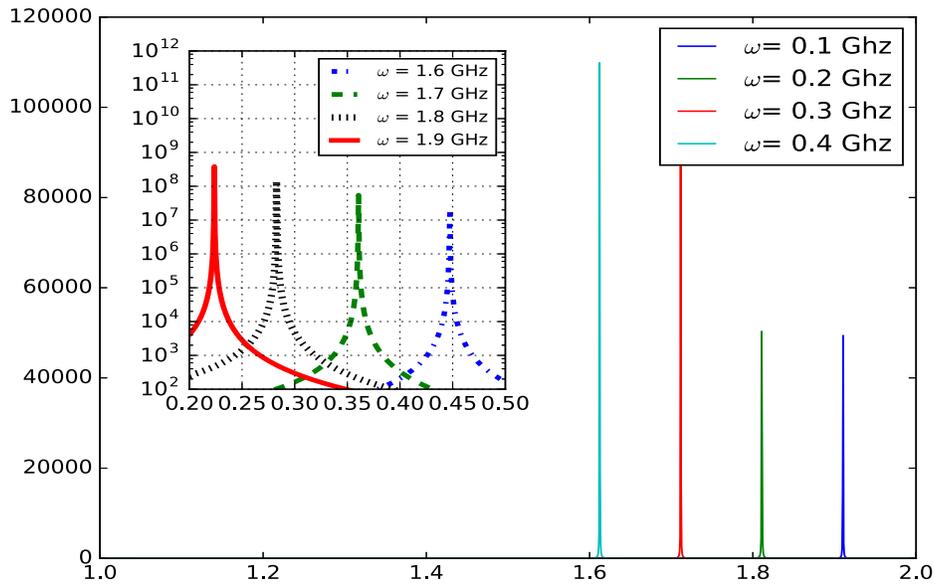


Figura 2.12 Espectro de potencia para  $Y(\omega')$  vs  $\omega'$  para varias frecuencias con  $\omega_0 = 1$  GHz y  $\omega_1 = 0.1$  GHz. El eje horizontal es  $\omega$  y el vertical  $Y(\omega')$

Así como en el segundo caso para NMR, solamente se muestra un pico para cada frecuencia de rotación  $\omega$ . Comparando con los otros casos,  $Y(\omega)$  produce mayores valores para frecuencias bajas. Conforme se acerca a la frecuencia de resonancia, los valores de  $Y(\omega)$  son menores en comparación al primer caso. Esto nos da un panorama que nos permite verificar por qué no existen discrepancias en la gráfica de la simulación; esto es, los efectos de resonancia magnética nuclear ocurren al acercarse a  $\omega_0$ .

## 3. *Aproximación mediante Teoría de perturbaciones*

### 3.1. **Teoría de perturbaciones dependiente del tiempo**

En muchas ocasiones, los problemas en la mecánica cuántica resultan ser muy complejos, de manera tal que no pueden ser resueltos exactamente. Frecuentemente estos sistemas incluyen cantidades de gran orden de magnitud y cantidades muy pequeñas. Sin embargo, si estas cantidades son tan pequeñas que pueden ser ignoradas, se puede simplificar el problema y acercarse a una solución exacta. Para resolver el problema, primero debe resolverse el sistema simplificado (elementos de orden grande), y después calcular el error debido a términos pequeños ignorados en el sistema simplificado.

Esto lleva al uso de una técnica llamada teoría de perturbaciones, la cual consiste en obtener de manera aproximada eigenestados del hamiltoniano total del sistema. Para lograr eso, se divide al hamiltoniano en dos partes:  $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$ ; una parte no perturbada, cuyos eigenvalores y eigenfunciones son conocidos, y otra parte cuya presencia modifica las propiedades de la primera de manera no muy significativa, este es el elemento perturbativo del hamiltoniano.

Mediante algunos cálculos podemos determinar cuánto afecta al hamiltoniano no perturbado. Así podemos aproximar una solución bastante aceptable del problema. Esta técnica puede simplificar, o analizar un fenómeno cuántico aproximándolo a un caso real. Mostraremos aquí el uso de esta técnica para aproximar fenómenos de resonancia magnética cuya perturbación depende del tiempo, es decir, usaremos la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo.

### 3.2. Análisis perturbativo

En los capítulos previos se hizo el análisis de una partícula con espín en presencia de un campo magnético tomando a la función de estado como un espinor, y luego usando métodos numéricos. Pero debido a que  $\hat{H}$  tiene la forma de un potencial perturbativo y depende del tiempo,  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t)$ , es posible analizar su comportamiento y generar aproximaciones usando teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Como en el caso anterior, tenemos un campo magnético, pero ahora para caso del protón

$$\mathbf{H} = H_0 \hat{z} + H_1 \cos \omega t \hat{x} \quad 3.1$$

y sea el hamiltoniano obtenido en la parte anterior

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 \cos \omega t \\ \omega_1 \cos \omega t & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad 3.2$$

Analizando el hamiltoniano tenemos que el elemento sin perturbar es

$$\hat{H}_0 = -\frac{g\mu_B H_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad 3.3$$

y el elemento perturbativo es

$$\hat{H}' = -\frac{g\mu_B H_1 \cos \omega t}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad 3.4$$

Sea  $\Psi$  la solución al problema no perturbado de la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}_0 \Psi = E \Psi \quad 3.5$$

si  $\Psi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ , entonces

$$-\frac{g\mu_B H_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Resolviendo el producto de matrices se generan dos ecuaciones:

$$\left(\frac{1}{2}g\mu_B H_0 + E\right)a = 0 \quad 3.6 \text{ a}$$

$$\left(\frac{1}{2}g\mu_B H_0 - E\right)b = 0 \quad 3.6 \text{ b}$$

si  $a \neq 0$ ,  $b = 0$ , entonces  $E = -\frac{1}{2}g\mu_B H_0$ ; si  $b \neq 0$ ,  $a = 0$ , entonces  $E = \frac{1}{2}g\mu_B H_0$ .

Tenemos que la solución al sistema no perturbado es

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad E = -\frac{1}{2}g\mu_B H_0 \quad 3.7 \text{ a}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad E = \frac{1}{2}g\mu_B H_0 \quad 3.7 \text{ b}$$

Ya resuelto el caso no perturbado, procedemos a analizar la parte perturbativa del sistema.

Es posible expresar una función de onda en términos de funciones  $\varphi_k$  estacionarias

$$\Psi(x, t) = \sum_k C_k(t) e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \varphi_k \quad 3.8$$

La expresión para calcular los coeficientes  $C_k(t)$  a primer orden es

$$C_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int H'_{kn}(t) dt = -\frac{i}{\hbar} \int H'_{kn}(t) e^{i\omega_{kn} t} dt \quad 3.9$$

donde se ha agregado un sufijo  $n$  para tomar en cuenta la función del caso no perturbado, del cual se desea hacer una corrección; además

$$H'_{kn}(t) = \int \Psi_k \hat{H}' \Psi_n dx = \langle \Psi_k | \hat{H}' | \Psi_n \rangle \quad ; \quad \Psi_k = \varphi_k e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}}$$

entonces, sustituyendo lo anterior en la ecuación para  $C_{nk}(t)$ , tenemos que los coeficientes están dados por

$$C_{nk}^{(1)} = -i \frac{H'_{kn}}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{kn} t'} (e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'}) dt' \quad 3.10$$

donde  $H'_{kn}(t) = H'_{kn}(e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'})$  contiene la perturbación armónica. El elemento  $H'_{kn}$  no depende de  $t$  y es de la forma

$$H'_{kn} = \langle \varphi_k | \frac{g\mu_B H_1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} | \varphi_n \rangle$$

Evaluando la integral

$$\begin{aligned} C_k^{(1)} &= -i \frac{H'_{kn}}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{kn}t'} (e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'}) dt' \\ &= -i \frac{H'_{kn}}{\hbar} \int_0^t \left( e^{i(\omega_{kn} + \omega)t'} + e^{i(\omega_{kn} - \omega)t'} \right) dt' \\ &= -i \frac{H'_{kn}}{\hbar} \left[ \frac{e^{i(\omega_{kn} + \omega)t'}}{i(\omega_{kn} + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_{kn} - \omega)t'}}{i(\omega_{kn} - \omega)} \right]_0^t \\ &= -\frac{H'_{kn}}{\hbar} \left[ \frac{e^{i(\omega_{kn} + \omega)t} - 1}{(\omega_{kn} + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_{kn} - \omega)t} - 1}{(\omega_{kn} - \omega)} \right] \end{aligned} \quad 3.11$$

donde  $\omega_{kn} = g\mu_B H_0$ . Esto fue obtenido del caso no perturbado dado que solo hay dos estados  $a$  y  $b$  en el sistema.

En el caso que nos ocupa los valores para  $k$  y  $n$  son 1 y 2, por lo tanto los elementos de matriz toman los siguientes valores, para los cuales consideramos que  $1 = \alpha$  y  $2 = \beta$ :

$$H'_{11} = \frac{g\mu_B H_1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad 3.12 \text{ a}$$

$$H'_{12} = \frac{g\mu_B H_1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{g\mu_B H_1}{4} \quad 3.12 \text{ b}$$

$$H'_{21} = \frac{g\mu_B H_1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{g\mu_B H_1}{4} \quad 3.12 \text{ c}$$

$$H'_{22} = \frac{g\mu_B H_1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \quad 3.12 \text{ d}$$

Los estados perturbados se pueden expresar como

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = C_{11} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + C_{12} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad 3.13$$

$$\begin{pmatrix} a'' \\ b'' \end{pmatrix} = C_{21} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + C_{22} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad 3.14$$

De los elementos de matriz sabemos que  $C_{11} = C_{22} = 0$ , por lo que los estados son

$$\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} = C_{12} e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow a' = 0 \quad b' = -\frac{H'_{12}}{\hbar} e^{\frac{i}{2\hbar}g\mu_B H_0 t} [\chi] \quad 3.15 \text{ a}$$

$$\begin{pmatrix} a'' \\ b'' \end{pmatrix} = C_{21} e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow a'' = -\frac{H'_{21}}{\hbar} e^{-\frac{i}{2\hbar}g\mu_B H_0 t} [\chi] \quad b'' = 0 \quad 3.15 \text{ b}$$

con

$$\chi = \frac{e^{i(\omega_{kn} + \omega)t} - 1}{(\omega_{kn} + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_{kn} - \omega)t} - 1}{(\omega_{kn} - \omega)} \quad 3.16$$

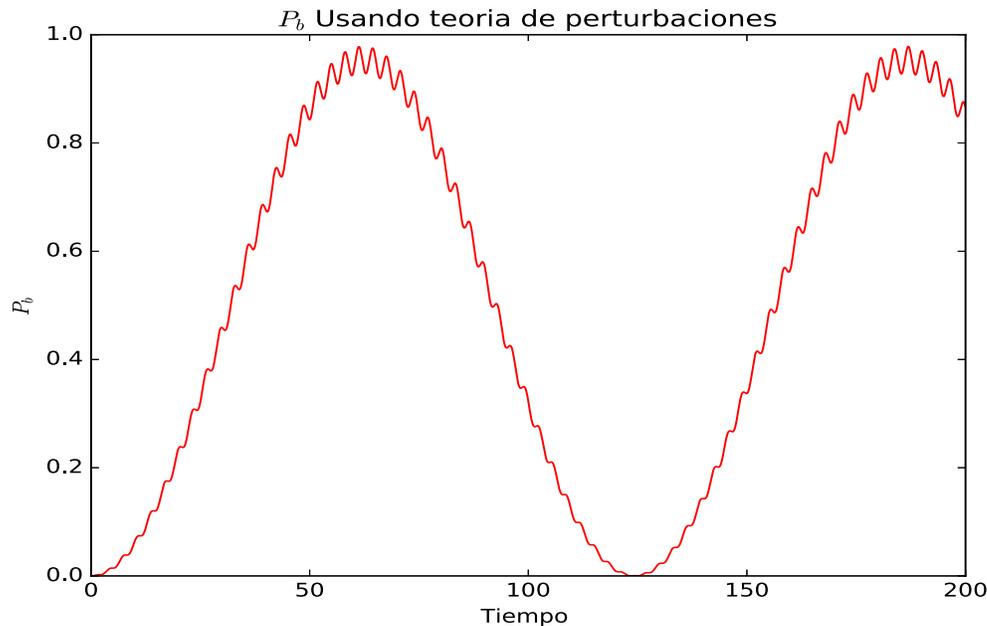


Figura 3.1 Gráfica de probabilidad de espín abajo vs tiempo para caso perturbado.

Con estos resultados es posible graficar la probabilidad de transición entre los estados en un intervalo de 200 ns, el cual nos proporciona la figura 3.1.

Para esta gráfica se usan las mismas condiciones de la aproximación numérica; en este caso los valores dados para los campos  $H_0$  y  $H_1$  son aproximadamente de  $3.54 \times 10^{-9}$  Gigateslas y  $3.72 \times 10^{-10}$  Gigateslas, respectivamente. Notamos que a diferencia del caso numérico, se notan mayores ondulaciones en la gráfica causadas durante la inversión de espín.

La transición de estado emite/absorbe mayor energía de acuerdo a la manifestación del campo estático, pero lo que realmente genera estas perturbaciones en las transiciones de energía sigue siendo la perturbación generada por el elemento rotante del campo magnético (que en el caso general cubre las tres dimensiones en el plano euclidiano).<sup>1</sup>

<sup>1</sup>En este caso tampoco se toman en cuenta procesos de relajación ya que es un acercamiento introductorio a la resonancia magnética.

Aplicando un análisis de frecuencias, mediante el uso de la transformada de Fourier, encontramos los resultados que se muestran en la figura 3.2.

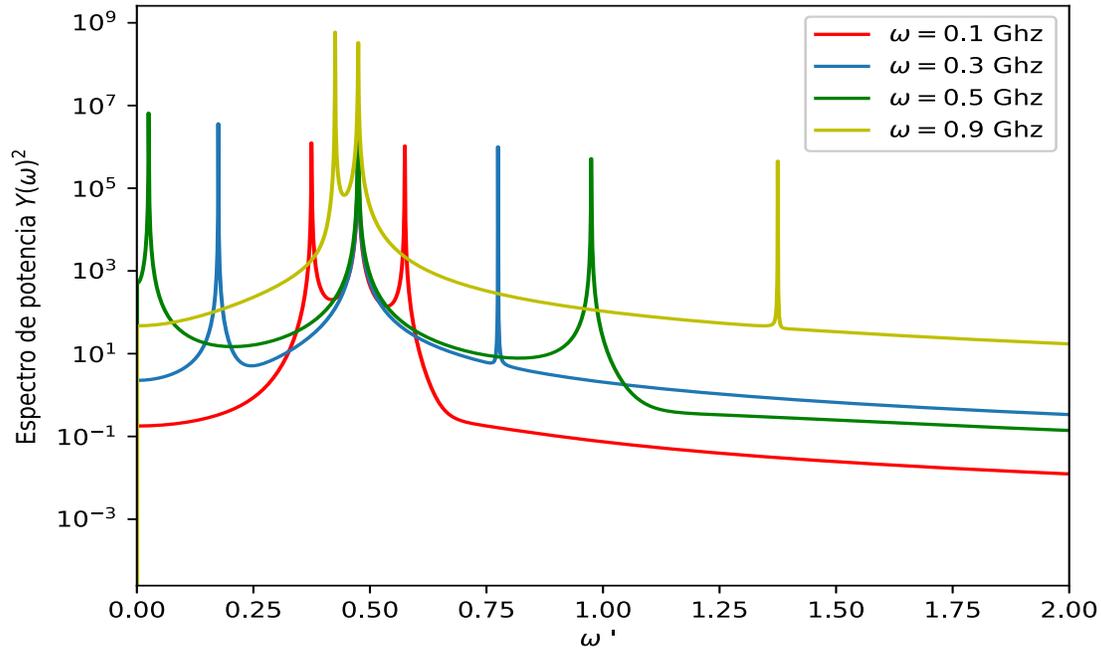


Figura 3.2 Análisis de frecuencia  $Y(\omega)^2$  vs  $\omega$  para el caso perturbado.

Checando el comportamiento de las frecuencias vemos que existen dos picos para  $Y(\omega)$  entre 0.4-0.6 GHz. Estos picos generan las discrepancias dentro de la gráfica de  $p_b$  para el caso de teoría de perturbaciones. Pero debido a que el espectro de potencia es mayor que en el caso numérico para  $\omega_1 = 0.1$  GHz, se generan mayores discrepancias.

### 3.3. Resonancia magnética usando teoría de perturbaciones. Caso ideal.

Ahora, para compararlo con el caso ideal, resolvemos el problema con el mismo método; en este caso el hamiltoniano perturbativo  $\hat{H}'$  es

$$\hat{H}' = -\frac{\hbar}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \omega_1 \sin \omega t + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \omega_1 \cos \omega t \right] \quad 3.17$$

A primera aproximación y tomando  $\omega_{kn} = \frac{g\mu_n H_0}{\hbar}$ , tenemos que

$$C_k^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int H'_{kn}(t) dt = \int H'_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt$$

Para  $H'_{kn} = \langle \Psi_k | \hat{H}' | \Psi_n \rangle$  tenemos que  $H_{11} = H_{22} = 0$ , y

$$H'_{12} = -\frac{\hbar\omega_1}{2} (\cos \omega t - i \sin \omega t) = -\frac{\hbar\omega_1}{2} e^{-i\omega t} \quad 3.18 \text{ a}$$

$$H'_{21} = -\frac{\hbar\omega_1}{2} (\cos \omega t + i \sin \omega t) = -\frac{\hbar\omega_1}{2} e^{i\omega t} \quad 3.18 \text{ b}$$

Entonces la perturbación a primer orden es

$$\begin{aligned} C_k^{(1)} &= \frac{-i}{\hbar} \int_0^t H'_{12} e^{i\omega_{kn}t} dt = \frac{i\omega_1}{2} \int e^{i(\omega_{kn}-\omega)t} dt \\ &= \frac{i\omega_1}{2} \left[ \frac{e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}}{i(\omega_{kn}-\omega)} \right]_0^t \\ C_k^{(1)} &= \frac{\omega_1}{2} \left[ \frac{e^{i(\omega_{kn}-\omega)t} - 1}{(\omega_{kn}-\omega)} \right] \end{aligned} \quad 3.19$$

y

$$C_k^{(1)} = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t H'_{21} e^{i\omega_{kn}t} dt = \frac{i\omega_1}{2} \int e^{i(\omega_{kn}+\omega)t} dt$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{i\omega_1}{2} \left[ \frac{e^{i(\omega_{kn} + \omega)t}}{i(\omega_{kn} + \omega)} \right]_0^t \\
C_k^{(1)} &= \frac{\omega_1}{2} \left[ \frac{e^{i(\omega_{kn} + \omega)t} - 1}{(\omega_{kn} + \omega)} \right]
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Por lo tanto la función de estado aproximada es

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} a' \\ b' \end{pmatrix} &= C_{11}^1 e^{-iE_1/\hbar} \phi + C_{12}^1 e^{-iE_2/\hbar} \phi \\
&= C_{12}^1 e^{-iE_0/\hbar} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.21}$$

con

$$C_{12}^{(1)} = \frac{\omega_1}{2} \left[ \frac{e^{i(\omega_{kn} - \omega)t} - 1}{(\omega_{kn} - \omega)} \right] \tag{3.22}$$

$$\text{y } E_1 = -\frac{1}{2}g\mu_n H_0.$$

Para la siguiente solución se tiene que

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} a'' \\ b'' \end{pmatrix} &= C_{21}^1 e^{-iE_1/\hbar} \phi + C_{22}^1 e^{-iE_2/\hbar} \phi \\
&= C_{21}^1 e^{-iE_1/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.23}$$

con

$$C_{21}^{(1)} = \frac{\omega_1}{2} \left[ \frac{e^{i(\omega_{kn} + \omega)t} - 1}{(\omega_{kn} + \omega)} \right] \tag{3.24}$$

$$\text{y } E_1 = \frac{1}{2}g\mu_n H_0.$$

Ahora, dada la condición de resonancia magnética,  $\omega = \frac{g\mu_N H_0}{\hbar} = \omega_0$ , se calcula la probabilidad de transición de estados dada por

$$W_{nk} = |C_{nk}^{(1)}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t H'_{kn} e^{i\omega_{kn}t'} dt' \right|^2 \quad 3.25$$

Comparando con las expresiones dadas por el método perturbativo, se nota que para el término de  $b(t)$ , el cual nos da las transiciones de espín abajo, hay una limitante, la cual es  $\omega_{kn} \neq \omega$ . Se debe recordar que este método es aproximado, por lo que se requieren parámetros de  $H_1$  y  $H_0$  aproximados, con el objeto de comparar los resultados con los resultados numéricos. Buscando valores de campo magnético aproximados a los propuestos en la solución numérica, se obtiene la figura 3.3.

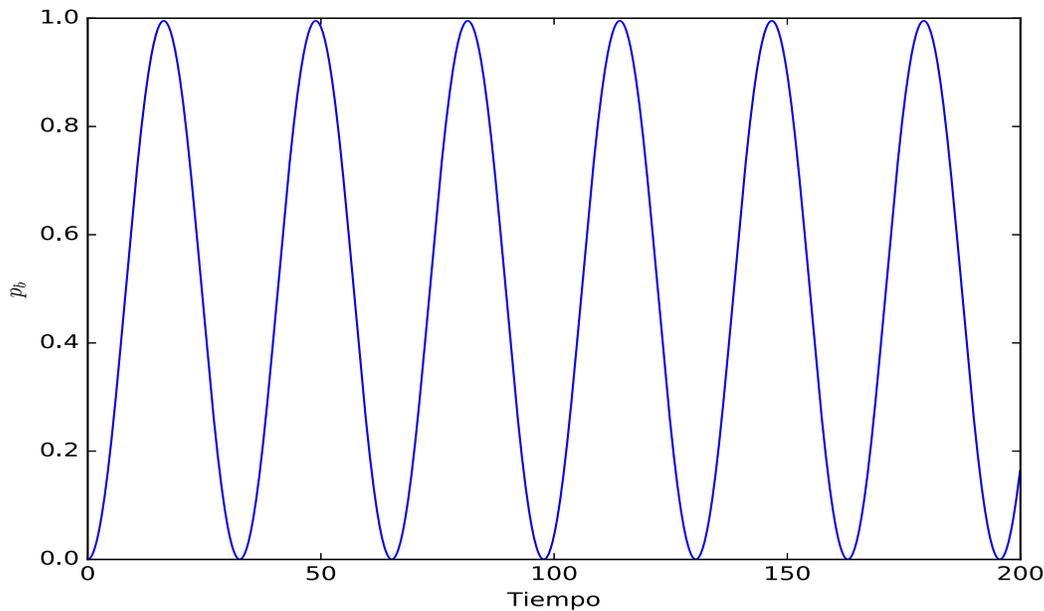


Figura 3.3 Gráfica de las probabilidades de transición para espín abajo, dadas por la teoría de perturbaciones para el caso ideal, con  $\omega_0 = 0.808$  y  $\omega_1 = 0.19$ , ambos en GHz.

En comparación con el caso numérico, no se presentan las anomalías al igual que en el caso numérico, excepto que la probabilidad de transición es casi igual a 1. También puede verse que el resultado es muy similar al caso numérico y al analítico.

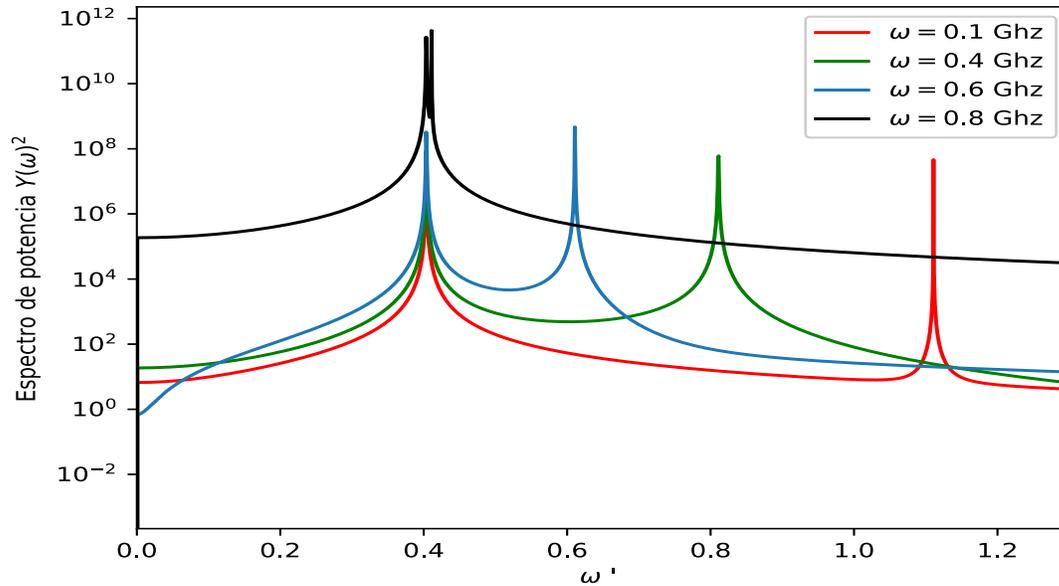


Figura 3.4 Transformada de Fourier y espectro de potencia de la probabilidad de transición para el caso aproximado vía teoría de perturbaciones.

Checando el comportamiento de las frecuencias en la figura 3.4, vemos que existen dos picos para  $Y(\omega)$  entre 0.4-0.6 GHz. Estos picos generan las discrepancias dentro de la gráfica de  $p_b$  para el caso analizado con teoría de perturbaciones. Pero debido a que el espectro de potencia es mayor que en el caso numérico para  $\omega_1 = 0.1$  GHz, se generan mayores discrepancias.



## 4. *Conexiones clásicas y el vector de espín cuántico*

### 4.1. **Visualización de la transición de estados**

Para un sistema de espín  $\frac{1}{2}$ , el valor esperado del momento magnético  $\langle \hat{s} \rangle$  (el cual es proporcional a  $\langle \hat{\mu} \rangle$ ) también precesa alrededor del campo magnético. La precesión de Larmor puede ser descrita usando el hamiltoniano (ecuación 2.1) para  $\omega = 0$ . Como  $\hat{H}$  es independiente del tiempo,  $|\Psi(t)\rangle$  puede ser calculado tanto analíticamente como numéricamente.[5]

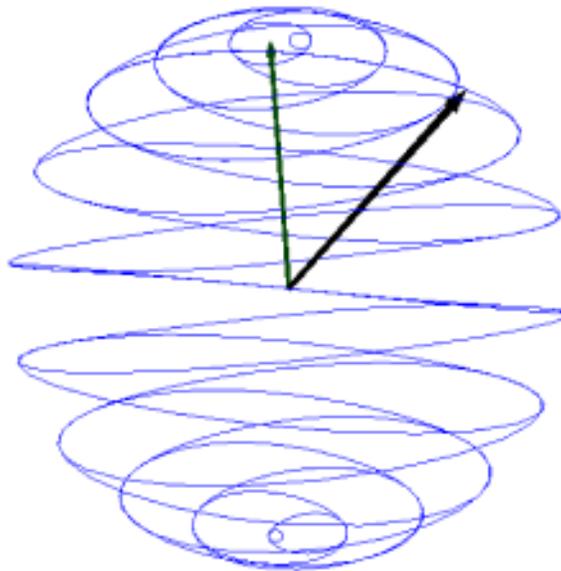


Figura 4.1 Visualización de la transición del vector de espín al estado espín abajo, en un intervalo de 200 ns para la resonancia magnética electrónica.

Aquí se ha realizado una visualización en 3D (animación) para apreciar cómo cambia el espín (vector de espín) durante la transición entre los estados de espín abajo y espín arriba. Los campos pequeños  $H_x = H_1 \cos(\omega t)$  son la causa de que el espín precese alejándose del eje vertical ligeramente, mientras  $H_x > 0$  (apunta a lo largo del eje  $x$  positivo). Entonces, en vez de permitir al espín completar su precesión y regresar al eje  $z$ , la dirección de  $H_x$  es revertida y el espín precesa alrededor de la nueva dirección de  $\mathbf{H}$ , para el cual  $H_x < 0$ . Esto puede apreciarse al manipular los valores del campo  $H_1$ .

El proceso se repite y como resultado  $\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle$  rota muchas veces alrededor de la superficie de una esfera de radio  $\sqrt{\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle^2} = \frac{1}{2}$ , progresando del eje  $+z$  al eje  $-z$ .

Este camino esférico nos permite entender los pulsaciones de baja amplitud que aparecen en  $p_b(t)$ .

Ahora supongamos que el campo magnético está estático, es decir  $\omega = 0$ , la naturaleza del fenómeno puede visualizarse de la siguiente manera

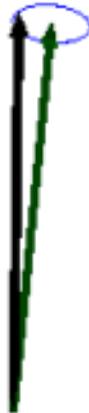


Figura 4.2 Transición de estado de espín abajo para campo magnético estático  $\omega = 0$ .

Aquí se observa que no hay movimiento de oscilación, sino que la punta del vector de espín marca un movimiento circular si  $\omega = 0$  o si  $\omega_1 = 0$ ; entonces simplemente no hay un movimiento en espiral, por lo que un fenómeno de transición causado por el campo es inexistente.

Cuando  $\langle \hat{\mathbf{s}} \rangle$  está orientado cerca del plano  $xy$ , un camino circular alrededor de la esfera es capaz de alcanzar un cambio relativamente grande en la dirección  $z$ , lo cual corresponde a la

amplitud máxima de los pulsaciones. Los nodos de los pulsaciones ocurren cuando  $\langle \hat{s} \rangle$  está orientado a lo largo del eje  $\pm z$ . La razón de que las pequeñas oscilaciones en  $p_b$  tengan una frecuencia de  $2\omega_0$  es que  $\langle \hat{s} \rangle$  es jalado dos veces por ciclo, cuando  $H_x > 0$  y  $H_x < 0$ .

Para el caso ideal, siguiendo los mismos pasos, tenemos la siguiente visualización de las transiciones:

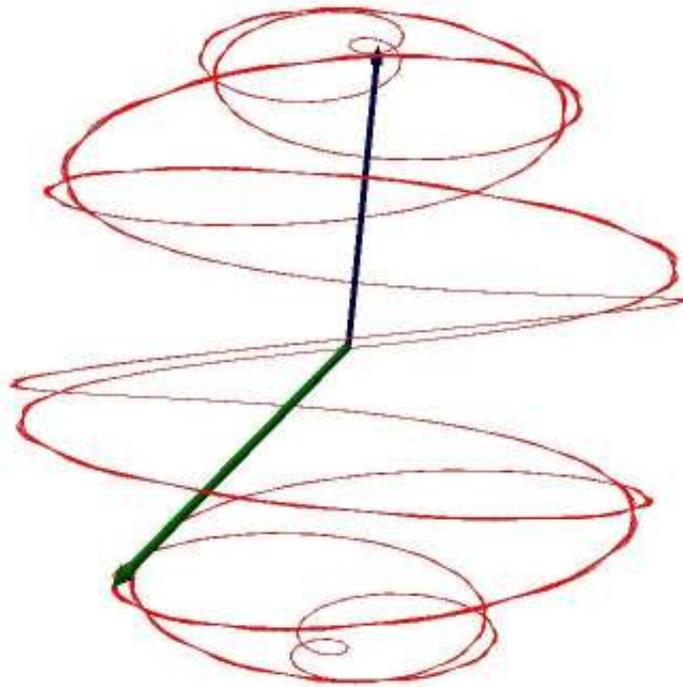


Figura 4.3 Transición del vector de espín al estado espín abajo causada por la resonancia magnética nuclear para el caso ideal.

Aquí se han introducido los datos de la simulación, para  $\omega = \omega_0 = \frac{g\mu_N H_0}{\hbar}$  (condición de resonancia), donde la flecha azul representa el campo magnético  $\mathbf{H}$  y la flecha verde  $\langle \hat{s} \rangle$ . En la imagen anterior se observa que durante la transición el vector de espín recorre un camino más pequeño dentro de la misma esfera, lo cual se explica por lo dicho anteriormente. Se muestra que en el movimiento en espiral, en comparación con el primer caso, dado que el periodo es menor se observan menos líneas durante precesión. La línea de abajo representa el diámetro de la esfera, la cual es recorrida por la punta del vector de espín.

Debido a que las transiciones ocurren a mayor frecuencia, se generaron transiciones sin esas perturbaciones en 2.10, en comparación con la gráfica 2.1.

Ahora veamos lo que ocurre cuando  $\omega \neq \omega_0$ ; si para el primer caso hacemos  $\omega_0 = 0.5$  GHz, y el resto se mantiene igual tenemos que



Figura 4.4 Movimiento de transición del vector de espín para  $\omega = 1.0$ ,  $\omega_1 = 0.1$  y  $\omega_0 = 0.5$ . Frecuencias en GHz.

Aquí se observa que la punta del vector de espín (flecha negra), recorre una especie de círculo, cuyo centro se encuentra dentro de un foco de la elipse, igual generado por la misma punta. Esto nos muestra que no hay una transición completa tras no cumplir la condición de resonancia.

Ahora supongamos que para los mismos datos modificamos a  $\omega_1 = 0.5\text{GHz}$ , tenemos que

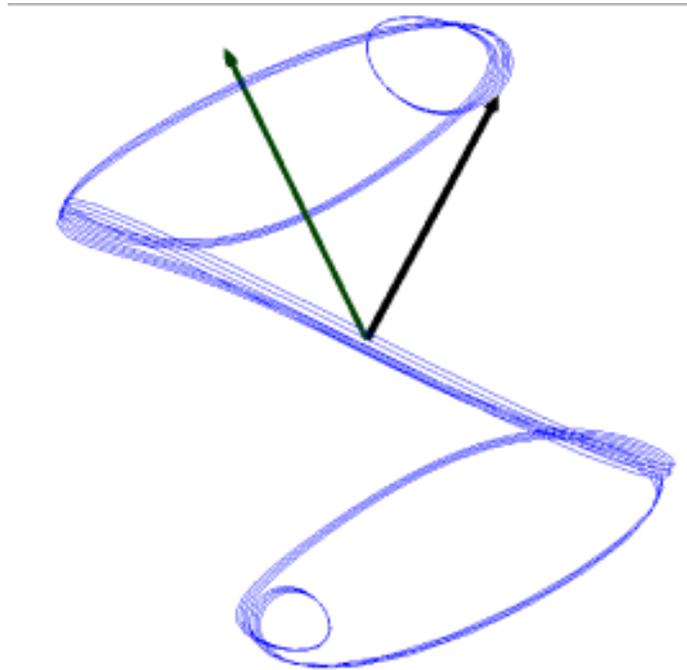


Figura 4.5 Movimiento de  $\langle \hat{s} \rangle$  en un campo magnético para  $\omega_0 = 1$ ,  $\omega = 0.5$  y  $\omega_1 = 0.1$ .

El camino recorrido por el vector de espín no toma una forma esférica, sino una especie de camino conectado por tres elipses. Esto puede representarse como una transición errante, y para frecuencias mayores, conforme aumentemos el campo, las transiciones en un mismo intervalo aumentan y por ende, el periodo entre transiciones se reduce. Pero para uso práctico, teniendo un campo pequeño es más adecuado para los experimentos en la vida real, dado que perturbando el campo ligeramente, se manifiesta en gran medida modificaciones a las transiciones de estado.



## 5. *Conclusión*

En todos los casos analizados, mediante varios caminos, se han observado las ventajas y desventajas de los métodos, cuando se desea comprender el fenómeno de la resonancia magnética nuclear. Este fenómeno nos muestra cómo el campo magnético afecta las transiciones de estados para protones (y electrones) en el átomo de hidrógeno. Gracias al camino analítico, se pudo comprobar que la condición de resonancia magnética para un campo magnético rotante se presenta cuando  $\omega = \omega_0 = \frac{g\mu_N H_0}{\hbar}$ , donde  $H_0$  es el campo magnético estático.

Usando una aproximación numérica, se pudo observar, mediante gráficas, las funciones de onda, cuyas probabilidades de transición eran influenciadas por los elementos del campo magnético rotante. Durante el análisis del campo, se observó que para que exista probabilidad de transición de spin down igual a 1, debe existir una separación de un orden de magnitud entre el elemento de campo magnético rotante y el elemento estático. También se vió que cuando  $\omega \neq \omega_0$ , la  $p_{flip}$  depende de  $\omega_1$ , la cual es la responsable de la probabilidad de transición, la cual se visualizó como vectores marcando una trayectoria esférica.

El fenómeno de resonancia magnética le ha dado a la sociedad múltiples aplicaciones, principalmente en física médica. Esta aplicación la pude constatar mediante la realización de una investigación de campo en nuestra ciudad, donde encontré que el equipo que se utiliza consiste de un gran imán (cuya intensidad de campo magnético es fija) con el cual se genera un campo magnético en la parte de interés del paciente, y mediante un control de las frecuencias, se genera una resonancia dentro de los átomos de hidrógeno, y mediante un detector, se mide la frecuencia de emisión y con ello es posible generar una imagen para que los médicos observen de forma clara y segura posibles anomalías en los pacientes.

Por el camino teórico, se vió que usando teoría de perturbaciones se logró generar ciertas aproximaciones satisfactorias, sin embargo se generó un límite para que existan transiciones de estado, cosa que no aparece en el caso ideal usando la ecuación de Schrödinger directamente en coordenadas planas.

Por supuesto que, para casos más generalizados, existen fenómenos de carácter relativista, por lo que para su análisis requiere el uso de la ecuación de Dirac. O también, para grandes poblaciones de electrones y protones, se puede recurrir a la ecuación de Bloch, para casos más realistas.

También en la práctica de resolver un problema, es importante que el investigador teórico tenga cierto adiestramiento en conocimientos de métodos numéricos, los cuales le permiten generar soluciones satisfactorias en su campo de investigación.

# Bibliografía

- [1] Luis De la Peña. *Introducción a la mecánica cuántica*. Texto científico universitario. Fondo de Cultura Económica, 3 edition, 2006.
- [2] L.D. Landau y E.M. Lifschitz. *Quantum Mechanics (Non relativistic theory)*, volume 3 of *Course of Theoretical Physics*. Butterworth Heinemann, third edition, 1966.
- [3] D.J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Pentice Hall, second edition, 2005.
- [4] R. Liboff. *Introductory Quantum Mechanics*. Addison Wesley Longman Inc., third edition, 1998.
- [5] Larry Engelhardt. Magnetic resonance: Using computer simulations and visualizations to connect quantum theory with classical concepts. *American Journal of Physics*, 83(12):7, June 2015.
- [6] D.J. Griffiths. *Introduction to Electrodynamics*. Pearson Pentice Hall, third edition, September 1999.
- [7] J.D. Faires Richard Burden y. *Análisis Numérico*. Thomson Learning, séptima edition, 2002.
- [8] Richard Courant y John Fritz. *Introducción al cálculo y al Análisis Numérico*, volume 1. Editorial Limusa, 1974.
- [9] Walter D. Knight y Malvin A. Ruderman Charles Kittel. *Mecánica*, volume 1 of *Berkeley physics course*. Editorial reverté, first edition, 1973.
- [10] Krishnan Radhakrishnan y Alan C. Hindmarsh. *Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations*. Number 1327. NASA, 1993.
- [11] Manuel José Páez y Cristian C. Bordeianu Rubin H. Landau. *A Survey of Computational Physics*. PRINCETON UNIVERSITY PRESS, 2012.
- [12] Charles P. Slichter. *Principles of Magnetic Resonance*. Harper & Row, 1963.
- [13] Edward Purcell. *Electromagnetismo*, volume 2 of *Berkeley physics course*. Editorial Reverté, 2 edition, 2001.
- [14] Cristopher Gerry y Peter Knight. *Introductory Quantum Optics*. Cambridge University Press, 2005.
- [15] William E. Boyce y Richard D. Prima. *Ecuaciones diferenciales y problemas con valores en la frontera*. Editorial Limusa, 4 edition, 2000.

- [16] Charles Poole y John Safko Herbert Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison Wesley Longman Inc., 3 edition, 2002.
- [17] Robert Martin Eisberg. *Fundamentos de física moderna*. Editorial Limusa, 1 edition, 1978.
- [18] Kendall Atkinson. *Elementary numerical analysis*. John Wiley & Sons Inc., 1 edition, 1985.
- [19] B.E. King. Angular momentum coupling and rabi frequencies for simple atomic transitions. *arXiv*, april 2008.
- [20] Marcos Moshinsky y Elpidio Chacón. *Apuntes del curso de mecánica cuántica de Marcos Moshinsky*. Facultad de ciencias, primera edition, Agosto 2010.

## A. *Algoritmo de Adams-Bashforth-Moulton*

### **Método predictor-corrector**

Usualmente, para resolver ecuaciones diferenciales numéricamente, se utilizan métodos de un paso (Euler, Runge-Kutta, etc.) donde la aproximación del punto  $t_{i+1}$  contiene información de uno de los puntos anteriores  $t_i$ . Se conoce como método multipasos a aquéllos que emplean la aproximación de uno de los puntos precedentes para determinar la aproximación en el siguiente punto. La ventaja que tiene este método es que no se pierde información a la hora de evaluar el siguiente punto, o sea, guarda los valores anteriores para ser utilizados más tarde en la evaluación.

Sea un problema de valor inicial

$$y' = f(t, y), \quad a \leq t \leq \quad y(a) = a \quad \text{a-1}$$

integrando en el intervalo  $[t_i, t_{i+1}]$  tenemos que

$$y(t_{i+1}) - y(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} y'(t) dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt \quad \text{a-2}$$

de aquí

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt \quad \text{a-3}$$

Integrando sobre un polinomio interpolante  $P(t)$  en  $f$ , usando los puntos obtenidos previamente  $(t_i, w_i)$ , y suponiendo que  $w_i \approx y(t_i)$ , entonces la ecuación anterior se vuelve

$$y(t_{i+1}) \approx w_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} P(t) dt \quad \text{a-4}$$

Aplicando la fórmula de diferencia regresiva de Newton, creamos un polinomio de diferencias regresivas[7]  $P_{m-1}(t)$  a través de de  $(t_i, f(t_i, y(t_i))) \dots, (t_{i+1-m}, f(t_{i+1-m}, y(t_{i+1-m})))$ . Como  $P_{m-1}$  es un polinomio interpolante de grado  $m-1$ , entonces existe  $\xi_i$  en  $(t_{i+1-m}, t_i)$  que

$$f(t, y(t)) = P_{m-1} + \frac{f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))}{m!} (t-t_i)(t-t_{i-1}) \cdots (t-t_{i+1-m}) \quad \text{a-5}$$

donde se introdujo una sustitución de variable  $t = t_i + sh$  para  $dt = hds$  en  $P_{m-1}$ ; incluyendo el error esto se vuelve

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \sum_{k=0}^{m-1} (-1)^k \binom{-s}{k} \nabla^k f(t_i, y(t_i)) dt \\ &\quad + \frac{f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))}{m!} (t-t_i)(t-t_{i-1}) \cdots (t-t_{i+1-m}) \\ &= \sum_{k=0}^{m-1} \nabla^k f(t_i, y(t_i)) h (-1)^k \int_0^1 \binom{-s}{k} ds \\ &\quad + \frac{h^{m+1}}{m!} \int_0^1 s(s+1) \cdots (s+m-1) f^m(\xi_i, y(\xi_i)) ds \end{aligned} \quad \text{a-6}$$

Desarrollando la primera integral tenemos que

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) dt &= h \left[ f(t_i, y(t_i)) + \frac{1}{2} \nabla f(t_i, y(t_i)) + \frac{5}{12} \nabla^2 f(t_i, y(t_i)) + \cdots \right] \\ &\quad + \frac{h^{m+1}}{m!} \int_0^1 s(s+1) \cdots (s+m-1) f^m(\xi_i, y(\xi_i)) ds \end{aligned}$$

Aplicando el teorema del valor medio para integrales, se deduce un valor  $d_i$ , donde  $t_{i+1-m} < d_i < t_{i+1}$  por lo que la segunda integral (error) es entonces

$$\begin{aligned} & \frac{h^{m+1}}{m!} \int_0^1 s(s+1) \cdots (s+m-1) f^m(\xi_i, y(\xi_i)) ds = \\ & \frac{h^{m+1}(d_i, y(d_i))}{m!} \int_0^1 s(s+1) \cdots (s+m-1) ds \\ & h^{m+1} f^{(m)}(d_i, y(d_i)) (-1)^m \int_0^1 \binom{-s}{m} ds \end{aligned} \quad \text{a-7}$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} y(t_{i+1}) = y(t_i) + h \left[ f(t_i, y(t_i)) + \frac{1}{2} \nabla f(t_i, y(t_i)) + \frac{5}{12} \nabla^2 f(t_i, y(t_i)) + \cdots \right] + \\ h^{m+1} f^{(m)}(d_i, y(d_i)) (-1)^m \int_0^1 \binom{-s}{m} ds \end{aligned} \quad \text{a-8}$$

Para los métodos de Adams de cuarto orden, sin el error local, son (m=4)

$$P_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (55f(t_n, y_n) - 59f(t_{n-1}, y_{n-1}) + 37f(t_{n-2}, y_{n-2}) - 9f(t_{n-3}, y_{n-3})) \quad \text{a-9}$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} (9f(t_{n+1}, P_{n+1}) + 19f(t_n, y_n) - 5f(t_{n-1}, y_{n-1}) + f(t_{n-2}, y_{n-2})) \quad \text{a-10}$$

Para iniciar el algoritmo, se requieren cuatro valores evaluados (incluyendo el de condición inicial), por lo que comúnmente se recurre a métodos de un paso (Euler, RK4, etc.) para generar los otros valores[7].



## B. *Método de Runge-Kutta*

### **Método RK4**

Uno de los métodos de resolución de ecuaciones diferenciales más utilizados por la gente para obtener soluciones numéricas es el algoritmo de Runge-Kutta, el cual, a diferencia del método de Euler, tiene mejor desempeño mejor para funciones no lineales o funciones trigonométricas (sin, cos, etc.).

Los métodos de Runge-Kutta son una familia de métodos iterativos en los cuales se utilizan más puntos que en los métodos de aproximación de Taylor. Este método, además de incluir el método de Euler, permite una mejor aproximación a funciones lineales y no lineales al tomar más puntos. El método RK4 (Runge-Kutta de orden 4) es uno de los métodos más usados para resolver ecuaciones diferenciales numéricamente, ya que es sencillo de aplicar. Sea una ecuación diferencial

$$\frac{dy(t)}{dt} = y'(t) = f(y(t), t)$$

con  $y(t_0) = y_0$  la condición inicial. Los métodos de Runge-Kutta de orden 4 calculan la aproximación de una pendiente en algún tiempo  $t_0$  de la siguiente forma

$$k_1 = f(y_n, t_n) \quad \text{b-1}$$

$$k_2 = f\left(y_n + k_1 \frac{h}{2}, t_n + \frac{h}{2}\right) \quad \text{b-2}$$

$$k_3 = f\left(y_n + k_2 \frac{h}{2}, t_n + \frac{h}{2}\right) \quad \text{b-3}$$

$$k_4 = f(y_n + k_3 h, t_n + h) \quad \text{b-4}$$

$$y_{n+1}(t) = y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad \text{b-5}$$

donde  $h$  es el tamaño de paso. Los requerimientos para usar esto es contar con una condición inicial, un tamaño de paso y un número de pasos. En un programa, estas expresiones se deben colocar dentro de un *loop* para así tener varios resultados dentro de un rango de tiempo definido por el usuario.

## C. *Movimiento de un cuerpo en un campo magnético*

Para entender qué ocurre en experimentos de resonancia magnética y conectar con resultados clásicos, generamos y visualizamos el comportamiento del valor esperado del operador de espín cuántico  $\langle \hat{s} \rangle$  en función del tiempo.

Clásicamente, el momento magnético de un sistema de cargas en movimiento relativo a un origen particular se define como

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2} q_i (\mathbf{r}_i \times \mathbf{v}_i) \quad i = 1, \dots \quad \text{c-1}$$

Para el caso continuo tenemos que

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2} \int dV \rho_e(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \times \mathbf{v})$$

donde  $\rho_e$  es la densidad de carga. El momento angular del sistema bajo la convención correspondiente es

$$\mathbf{L} = m_i (\mathbf{r}_i \times \mathbf{v}_i) \longrightarrow \int dV \rho_m(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \times \mathbf{v}) \quad \text{c-2}$$

Tanto el momento magnético como el momento angular tienen forma similar. Restringiéndonos a situaciones en las cuales  $\boldsymbol{\mu}$  es directamente proporcional a  $\mathbf{L}$

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{L}$$

donde  $\gamma = \frac{q}{2m}$  es la razón giromagnética. Las fuerzas y torques en un dipolo magnético pueden ser consideradas como derivadas de un potencial

$$V = -(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H})$$

El campo magnético es sustancialmente constante sobre el sistema. Con  $\mathbf{H}$  uniforme, el potencial depende solamente de la orientación de  $\boldsymbol{\mu}$  relativa a  $\mathbf{H}$ , ninguna fuerza es ejercida sobre el momento magnético, pero hay un torque  $\mathbf{N} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{H}$ . El promedio del cambio en el tiempo del momento angular total es igual al torque; sustituyendo  $\boldsymbol{\mu} = \gamma \mathbf{L}$  tenemos que

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \gamma \mathbf{L} \times \mathbf{H} \quad \text{c-3}$$

Pero esto es exactamente la ecuación de movimiento para un vector de magnitud rotando en el espacio alrededor de la dirección de  $\mathbf{H}$  con velocidad  $\boldsymbol{\omega} = -\gamma \mathbf{H}$ . El efecto de un campo magnético en un dipolo magnético es que el vector de momento angular y el momento magnético realicen un movimiento de precesión uniforme. Para la razón giromagnética clásica la velocidad de precesión angular es

$$\omega_L = -\frac{qH}{2m} \quad \text{c-4}$$

que es la frecuencia de Larmor. La precesión de Larmor es contra reloj alrededor de  $\mathbf{H}$ [16].

## D. *Cálculo de la probabilidad de espín abajo*

Aquí se encuentra un algoritmo de Runge-Kutta en lenguaje de programación python para la resolución de la ecuación de Schrödinger para el caso de resonancia magnética electrónica. El algoritmo produce una animación de la gráfica de  $p_b$  animada. Esto permite al usuario ver de forma semi interactiva cómo se genera la transición entre los dos estados.

```
#A runge-kutta method example for resolving Schrodinger equation
for the NMR case.
#Made by Hiram Ernesto Damian
#using RK4 method
*****
from numpy import *
import matplotlib
matplotlib.use('Agg')
import matplotlib.pyplot as plt
from pylab import *
import matplotlib.animation as animation
#define parameters for frequencies in GHz
w=1.0
w0=1.0
w1=0.1
*****
#define ODE system equations obtbnded directly from Schrodinger's equation
def f(a,t):
return 0.5*(w0*b + w1*cos(w*t)*d)
```

```

def f1(b,t):
return -0.5*(w0*a + w1*cos(w*t)*c)
def f2(c,t):
return -0.5*(w0*d - w1*cos(w*t)*b )
def f3(d,t):
return 0.5*(w0*c - w1*cos(w*t)*a)
#initial conditions
a = 1.0 ; c=0.0
b = 0.0 ; d=0.0
#This is where the data is saved during the Loop
apoints = []
bpoints = []
cpoints =[]
dpoints=[]
rpoints=[]
#step size
h=0.1 #nanoseconds
tmax=200 #time
time = arange(0,tmax,h)
#*****
#Fourth order runge-kutta algorithm (RK4)
#Here the program generate the solution for the ODE system
for t in time:
apoints.append(a)
k1 = h*f(a,t)
k2 = h*f(a+0.5*k1,t+0.5*h)
k3 = h*f(a+0.5*k2,t+0.5*h)
k4 = h*f(a+k3,t+h)
a =a+ (k1+2.0*k2+2.0*k3+k4)/6.0
bpoints.append(b)
ky1 = h*f1(b,t)
ky2 = h*f1(b+0.5*ky1,t+0.5*h)
ky3 = h*f1(b+0.5*ky2,t+0.5*h)
ky4 = h*f1(b+ky3,t+h)

```

```

b=b+ (ky1+2.0*ky2+2.0*ky3+ky4)/6.0
cpoints.append(c)
kz1 = h*f2(c,t)
kz2 = h*f2(c+0.5*kz1,t+0.5*h)
kz3 = h*f2(c+0.5*kz2,t+0.5*h)
kz4 = h*f2(c+kz3,t+h)
c=c+ (kz1+2.0*kz2+2.0*kz3+kz4)/6.0
dpoints.append(d)
kd1 = h*f3(d,t)
kd2 = h*f3(d+0.5*kd1,t+0.5*h)
kd3 = h*f3(d+0.5*kd2,t+0.5*h)
kd4 = h*f3(d+kd3,t+h)
d=d+ (kd1+2.0*kd2+2.0*kd3+kd4)/6.0
#calculate the probability for spin down (b**2+a**2=1 for normalized state)
r=(c**2+d**2)
rpoints.append(r)
print(a,b,c,d,r)

#*****
#plot the probability of spin down
fig=figure()
ax = axes(xlim=(0, 200), ylim=(0, 1))
line, = ax.plot([], [], label='$p_b$',lw=2)

def init():
    line.set_data([], [])
    return line,

def animate(i): #Here defines the animation settings
    x = time
    y = rpoints
    line.set_data(x[:i], y[:i])
    return line,
#generate the animation

```

```
ani = animation.FuncAnimation(fig, animate, init_func=init,
frames=2000, interval=0, blit=True)
*****
#graph info
xlabel('Tiempo (nanosegundos)')
ylabel('Probabilidad')
title('Probabilidad spin down')
legend()
grid(False)
#save animation as a video
#ani.save('rk4.mp4',writer='ffmpeg',fps=60)
show()
```

## E. *Visualización de la transición de estado de espín*

```
#Program by Hiram Ernesto Damian
#case static field
#electronic magnetic resonance
from matplotlib.pyplot import *
from numpy import *
from scipy.integrate import odeint

def sys(var,t,w,w0,w1):
    ar,ai,br,bi=var
    #####
    #ODE system
    AR=-(w0*ai+w1*br*sin(w*t)+w1*bi*cos(w*t))
    AI=(w0*ar+w1*br*cos(w*t)-w1*bi*sin(w*t))
    BR=(w0*bi+w1*ar*sin(w*t)-w1*ai*cos(w*t))
    BI=(-w0*br+w1*ar*cos(w*t)+w1*ai*sin(w*t))
    return [AR,AI,BR,BI]

t=linspace(0,200,1000)

#####3
#frecuencias en GHz
w0=1.0
w1=0.1
```

```

w=2.0 #g*nu*h0/hbar
#####
#condiciones iniciales
ar=1.0
ai=0
br=0
bi=0
#####3
psi0=(ar,ai,br,bi)
initialCond = (ar, ai, br, bi) # condiciones iniciales
param = (w,w0,w1) # Other parameters

#calcula la soluci\`on a la ecuaci\`on de Sch\`odinger
results = odeint(sys, psi0, t, args=param)

# matrices del vector de esp\`in
sx = 0.5 * array( [[0, 1], [1, 0]] )
sy = 0.5 * array( [[0, -1j], [1j, 0]] )
sz = 0.5 * array( [[1, 0], [0, -1]] )

bra = zeros(2, dtype=complex)
ket = zeros(2, dtype=complex)
numSteps = size(t)
spinVector = zeros([numSteps,3])

for i in range(numSteps):
ket[0] = results[i,0] + 1j*results[i,1]
ket[1] = results[i,2] + 1j*results[i,3]
bra = conj(ket)
x = real(dot(bra, dot(sx, ket)))
y = real(dot(bra, dot(sy, ket)))
z = real(dot(bra, dot(sz, ket)))

```

```

spinVector[i, :] = array([x, y, z])
*****

from visual import * #Libr\'eria visual para animaciones

tip = sphere(pos=(0,0,0.5), radius=0.0, color=color.orange,
opacity=0.8, make_trail=True, retain=numSteps)
spin = arrow(pos=(0,0,0), axis=(0,0,0.5), color=color.black, shaftwidth=0.01)
field = arrow(pos=(0, 0, 0), axis=(0.5*w1, 0, 0.5*w0),
color=color.blue, shaftwidth=0.01)
timeLabel = label(pos=(0.6,0,0))

*****
#Canvas settings
*****
scene.background=color.white
scene.up=vector(0,0,1)
scene.forward=vector(0,1,0)
scene.autoscale=1

#animaci\'on
for i in range(numSteps): # Loop through all time steps
rate(20)                 # Max of 20 frames per second
spin.axis = spinVector[i,:]
field.axis =(0.5*w1*cos(w*i),0,0.5*w0)
tip.pos = spinVector[i,:]

show()

```

