

FUNCIÓN DE ONDA Y NIVELES DE ENERGÍA DEL ÁTOMO DE HIERRO EN UN CAMPO MAGNÉTICO VARIABLE

B. D. Arduser-Villanueva, C. H. Zepeda-Fernández, J. M. Hernández-López, B. De Celis-Alonso,

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, brian.arduser@alumno.buap.mx,
hzepeda@fcfm.buap.mx, javierh@fcfm.buap.mx, bdca@fcfm.buap.mx

RESUMEN

En este trabajo se obtienen las energías y función de onda de los espines de los electrones del átomo de hierro en un campo magnético variable, como aquel presente en un aparato de imagen por resonancia magnética, de modo que se conozcan sus frecuencias resonantes. La motivación de este trabajo es aportar a la descripción de la interacción de este elemento con dicho campo magnético y así permitir la mejora de estudios en el cuerpo humano, donde está presente como distintos iones en diversas moléculas que se encuentran en varias proteínas que, por ejemplo, son transportadas en la sangre y almacenadas en el bazo, hígado, y médula ósea.

Palabras Claves: resonancia magnética; hierro; energía

ABSTRACT

In the present work, the energy levels and wave-function for the electrons in an iron atom immersed in a variable magnetic field, such as the one produced by a Magnetic Resonance Imaging (MRI) device, are obtained and, therefore, so are the electrons' resonant frequencies. This work intends to contribute to this elements' description of its interaction with these types of magnetic fields and thus allow an improvement in human body imaging, where iron is present in distinct ions found in several molecules and proteins which, for example, are transported in blood and stored in the spleen, liver and bone marrow.

Key words: magnetic resonance; iron; energy

1. INTRODUCCIÓN

El hierro en el cuerpo humano se encuentra en distintas composiciones, algunas comunes son proteínas como la hemoglobina y la ferritina, en las que se le encuentra dentro como ion +3 y +2, respectivamente. Estos compuestos sirven como medio de transporte y almacenamiento del hierro. Existen diversas enfermedades ocasionadas por un exceso o deficiencia de este elemento, como lo es la anemia para este último caso. Para detectar estas concentraciones en el cuerpo se emplea el estudio de Imagen por Resonancia Magnética (MRI, por sus siglas en inglés). Este aparato detecta los tiempos de relajación del medio, en específico, del espín de

los protones de los hidrógenos en las moléculas de agua que contiene el cuerpo humano. El hierro se estima generalmente mediante la observación de esas relajaciones, que se comparan respecto a valores conocidos cuando el medio no contiene cantidades significativas de hierro, debido a que la presencia de hierro entorno al agua altera sus relajaciones. En este trabajo se plantea y desarrolla un modelo para el hierro que se espera brinde una guía para la detectabilidad de los efectos por parte de un aparato de MRI, como sería conocer sus energías y frecuencias de resonancia, dado que no se ha encontrado algún otro trabajo que intente abordar este problema de detección a partir de la perspectiva de crear un modelo que describa el comportamiento del hierro bajo las circunstancias de este aparato.

2. OBJETIVO

El objetivo de este trabajo es resolver las degeneraciones de energía de los electrones de valencia del átomo de hierro, de modo que se puedan obtener sus frecuencias resonantes según el campo magnético del aparato a emplear, lo cual se espera permita una mayor excitación de los electrones que se encuentren dentro de un medio que contenga al hierro, que esto produzca una mayor señal y, por lo tanto, una mejora en las imágenes generadas.

3. TEORÍA

En la figura 1 se representan las componentes básicas de un aparato de MRI. Estas componentes son las que generan los diversos campos magnéticos que manipularán al medio de manera en que se produzca finalmente una señal y ésta sea procesada para obtener una imagen. El imán superconductor genera un campo magnético estático e intenso, del orden de 1 Tesla, en la dirección z , que es a lo largo del eje del aparato; las bobinas de gradiente generan campos variables de menor intensidad, del orden de mT, según la coordenada x , y , z deseada; y la bobina de radiofrecuencia (RF) emite pulsos que excitan al sistema. Al introducirse a un paciente dentro del aparato, los espines de los protones de los hidrógenos en las moléculas de agua del paciente tenderán a alinearse en forma paralela o antiparalela al campo principal; el pulso de RF inducirá su energía al medio, lo cual hará que los espines la absorban y cambien de dirección a la forma antiparalela, que es, de los dos estados posibles, el de mayor energía. Posteriormente el sistema se relaja; que el medio se “relaje” significa que los espines transiciones de regreso a su estado original, esto es, que liberen la energía absorbida; a este fenómeno se le designa Relajación Longitudinal y al tiempo que tarda en ocurrir se le denomina Tiempo de relajación T1. Este cambio de energía se mide mediante la inducción de campo magnético generado en el detector: algún arreglo de bobina que recibirá la señal para ser procesada; esta bobina generalmente está colocada sobre o alrededor del paciente.

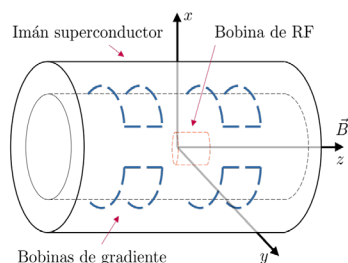


Figura 1. Esquema de un aparato de resonancia magnética clínica

El campo magnético de un aparato de MRI consiste en componente principal (B_0) y de gradientes (α, β, γ):

$$\vec{B} = \alpha \hat{x} + \beta \hat{y} + (\gamma + B_0) \hat{z} . \quad (1)$$

En el caso del hierro, la absorción se deberá al espín de los electrones de su capa de valencia. La configuración electrónica del hierro es la siguiente y la distribución de sus electrones de valencia está representada en la figura 2.

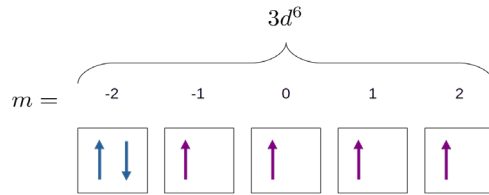


Figura 2. Representación de la última capa de la configuración electrónica del hierro

Tiene cuatro electrones sin emparejar en su última capa, sus números cuánticos son: $n = 3$; $l = 2$; $m = -1, 0, 1, 2$. Lo siguiente será un enfoque en alguno de esos electrones. La hipótesis del trabajo es la siguiente: Resolver la degeneración de las energías entre estos electrones resultará en valores de energía detectables por parte de un aparato de MRI. La absorción de un medio se estimula en general mediante la emisión de una sola frecuencia del aparato, lo que provoca una absorción en un entorno (Δ) de la frecuencia; el problema con esa ejecución es que no todo el medio reacciona, únicamente aquel cuya frecuencia de absorción sea cercana a la inducida por el aparato. El poder distinguir entre las energías de excitación posibles para los electrones de valencia del hierro, esto es, obtener los niveles de energía para alguno de los electrones al resolver la degeneración que existe entre ellos, permitiría conocer las frecuencias, a emitir simultáneamente, necesarias para una mayor absorción, de modo que más partículas sean excitadas. Entonces, resultará en una mayor emisión de señal por parte del medio al momento de relajarse; así, la detección debería mejorar y entonces la imagen también.

4. METODOLOGÍA

Cada electrón de valencia del hierro se puede modelar como átomo hidrogenoide respecto al núcleo porque la interacción entre los electrones no es relevante. Se propone una función general que sea la combinación de las funciones de cada electrón:

$$\Psi_{Fe} = \Psi_{n_1 l_1 m_1} \Psi_{n_2 l_2 m_2} \Psi_{n_3 l_3 m_3} \Psi_{n_4 l_4 m_4} \quad (3)$$

donde se puede demostrar que cada función cumple la ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno, entonces sus soluciones radiales (R), dadas por los polinomios asociados de Laguerre, y angulares (Y), dadas por los polinomios asociados de Legendre, se conservan para cada electrón. Si se sustituyen los respectivos números cuánticos para los electrones del

hierro y se emplean las soluciones mencionadas, se tiene que la función de onda para los electrones de valencia del átomo de hierro será de la siguiente forma:

$$\Psi_{Fe} = \prod_{i=1}^4 R_{3,2}^{(i)} Y_{2,m_i}^{(i)} . \quad (4)$$

El hamiltoniano que describe al sistema está dado de la siguiente forma e incluye las interacciones de estructura fina:

$$\hat{H}_{Zee} = -[\mu_L + \mu_S] \cdot \vec{B} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}}) \cdot \vec{B} , \quad (5)$$

donde μ_L es el momento magnético orbital, μ_S es el momento magnético de espín y μ_B es el magnetón de Bohr, dadas por:

$$\mu_L = -\frac{e\vec{L}}{2m_e c} , \quad \mu_S = -\frac{e\vec{S}}{m_e c} , \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} . \quad (6)$$

Se emplea la relación $J = L + S$, se sustituye la expresión del campo magnético (1) en el hamiltoniano (5) y se acomoda la expresión de acuerdo con sus componentes:

$$H_{Zee} = \frac{\mu_B}{\hbar} \left[\alpha (\hat{J}_x + \hat{S}_x) + \beta (\hat{J}_y + \hat{S}_y) + (\gamma + B) (\hat{J}_z + \hat{S}_z) \right] . \quad (7)$$

La energía se obtiene del valor de expectación del hamiltoniano:

$$\begin{aligned} E_{Zee} &= \langle nlm_j | \hat{H}_{Zee} | nlm_j \rangle \\ &= \frac{\mu_B}{\hbar} \left[\alpha (\langle \hat{J}_x \rangle + \langle \hat{S}_x \rangle) + \beta (\langle \hat{J}_y \rangle + \langle \hat{S}_y \rangle) + (\gamma + B) (\langle \hat{J}_z \rangle + \langle \hat{S}_z \rangle) \right] . \end{aligned} \quad (8)$$

Para obtener los valores de expectación individuales se emplean los operadores escalera J_+ y J_- :

$$\hat{J}'_x = \frac{1}{2} (\hat{J}'_+ + \hat{J}'_-) ; \quad \hat{J}'_y = \frac{1}{2i} (\hat{J}'_+ - \hat{J}'_-) , \quad (9)$$

donde J' puede representar a alguno de los operadores J , L , o S . Al introducirlos en cada componente de los operadores en (8) y al considerarse que estos estados cumplen ortogonalidad entre ellos (empleada la delta de Kronecker), sobreviven únicamente las componentes en z :

$$E_{Zee} = \frac{\mu_B}{\hbar} (\gamma + B) (\langle \hat{J}_z \rangle + \langle \hat{S}_z \rangle) . \quad (10)$$

Estos dos valores de expectación son conocidos, dados por los siguientes valores:

$$\langle \hat{J}_z \rangle = \hbar m_j, \quad \langle \hat{S}_z \rangle = \hbar g'_j m_j. \quad (11)$$

con \hbar la constante de Planck reducida y $g'_j = g_j - 1$, donde g_j es conocida como el factor de Landé, dado de la siguiente forma:

$$g_j = \left(1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2j(j+1)} \right). \quad (12)$$

donde j , l y s son los eigenvalores asociados a los operadores J , L y S , respectivamente. Así, introducidas (11) y (12) en (10), la energía está dada finalmente por la siguiente expresión:

$$E_{Zee} = \mu_B (\gamma + B_0) g_j m_j. \quad (13)$$

Se recurre a las reglas de selección de momento angular para obtener los valores posibles de j :

$$|j_1 - j_2|, \leq j \leq, j_1 + j_2; \quad -j \leq m \leq j; \quad (14)$$

donde $j_1 = l = 2$ y $j_2 = s = 1/2$. Entonces los posibles valores para j son $3/2$ y $5/2$, sus posibles valores de g_j son $4/5$ y $6/5$, respectivamente; los posibles valores para $m(j = 3/2)$ son $-3/2$, $-1/2$, $1/2$ y $3/2$, y para $m(j = 5/2)$ son $-5/2$, $-3/2$, $-1/2$, $1/2$, $3/2$ y $5/2$. E_{Zee} (13) representa la corrección de energía debido a un campo magnético externo, para la energía total del sistema se le incluye la corrección de estructura fina (E_{FS} , que incluye las interacciones de espín-órbita y relativista para el electrón) dada como sigue:

$$E_{FS} = E_n^{(0)} \left[\frac{a^2}{4n^2} \left(\frac{4n}{j + \frac{1}{2}} - 3 \right) \right]; \quad (15)$$

y la energía base del electrón ligado a un núcleo más pesado ($E_n^{(0)}$) es:

$$E_n^{(0)} \doteq E'_3 \approx -\frac{13.6}{n^2} eV \approx -1.511 eV. \quad (16)$$

Al juntar estas tres expresiones (13, 15 y 16) se obtiene la energía total, según su j :

$$E_{n=3, j=3/2, m_j} = E'_3 \left(2 + \frac{a^2}{12} \right) + \frac{4}{5} \mu_B (\gamma + B) m_{3/2}, \quad (17)$$

$$E_{n=3, j=5/2, m_j} = E'_3 \left(2 + \frac{a^2}{36} \right) + \frac{6}{5} \mu_B (\gamma + B) m_{5/2}, \quad (18)$$

5. RESULTADOS

Se emplean los siguientes valores para las constantes:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.788 \times 10^{-5} \frac{eV}{T}, \quad (19)$$

$$B_0 = 1T, \quad (20)$$

$$\gamma = 0.01T, \quad (21)$$

$$a \approx \frac{1}{137}, \quad (22)$$

$$h = 4.135 \times 10^{-15} eV \cdot s; \quad (23)$$

donde a , es la constante de estructura fina y h es la constante de Planck. El motivo de usar estos valores para las componentes del campo magnético es representar sus magnitudes reales típicas. Para el caso del campo magnético principal (B_0), los valores comúnmente hallados en el ambiente clínico son de 1.5, 3, 5 y 7 Teslas; para los gradientes (α, β, γ), rondan los valores de mili-Teslas. Al sustituir estos tres valores: para las constantes (19, 20 y 21), el valor de la energía base (16) y el valor de la constante de estructura fina (22), en las dos expresiones para la energía (17 y 18) según sus j y m_j (14), se obtienen los valores mostrados en la tabla 1.

Tabla 1. Correcciones de energía, dependientes de j

$m_{j=3/2}$	$E_d (\times 10^{-5} \text{ eV})$	$m_{j=5/2}$	$E_d (\times 10^{-5} \text{ eV})$
		-5/2	-17.761
-3/2	-7.685	-3/2	-10.746
-1/2	-3.008	-1/2	-3.731
+1/2	+1.667	+1/2	+3.284
+3/2	+6.344	+3/2	+10.299
		+5/2	+17.314

Debido a la estructura de las ecuaciones obtenidas para las correcciones de energía, dos valores adyacentes difieren únicamente por 1/2 veces el término de corrección (el segundo término en cada ecuación), con el primer término constante para todos los valores posibles. Así, la diferencia de energía, según la j , será la misma entre dos estados adyacentes, como se muestra en la tabla 2, que además incluye la diferencia de frecuencias, donde se emplea que $E = h\nu$, con h dada como en (23).

Tabla 2. Diferencias de energía y frecuencia entre estados adyacentes

J	$\Delta E (\times 10^{-5} \text{ eV})$	$\Delta \nu$ (GHz)
3/2	4.676	11.308
5/2	7.015	16.962

Entonces se puede establecer que la frecuencia (y análogamente para la energía) de transición entre cualesquiera dos estados de una misma j está dado por la siguiente relación:

$$\nu' = n\Delta\nu. \quad (24)$$

Los valores de frecuencia mostrados en la tabla 2 concuerdan con el orden de magnitud para la resonancia de electrones (GHz). En las tablas 3, 4 y 5 se muestran las energías de las transiciones permitidas entre estados de $j = 3/2$, de $j = 5/2$ y de entre ambas j , respectivamente, donde m representa al estado inicial y m' representa al estado final.

Tabla 3. Diferencias de energía para transiciones en $j=3/2$

$m_{j=3/2}$	$m'_{j=3/2}$	$\Delta E (\times 10^{-5} \text{ eV})$
-3/2	-1/2	4.676
-3/2	+1/2	9.353
-3/2	+3/2	14.030
-1/2	+1/2	4.676
-1/2	+3/2	9.353
+1/2	3/2	4.676

Tabla 4. Diferencias de energía para transiciones en $j=5/2$

$m_{j=5/2}$	$m'_{j=5/2}$	$\Delta E (\times 10^{-5} \text{ eV})$	$m_{j=5/2}$	$m'_{j=5/2}$	$\Delta E (\times 10^{-5} \text{ eV})$
-5/2	-3/2	7.015	-1/2	+1/2	7.015
-5/2	-1/2	14.030	-1/2	+3/2	14.030
-5/2	+1/2	21.045	-1/2	+5/2	21.045
-5/2	+3/2	28.060	+1/2	+3/2	7.015
-5/2	+5/2	35.075	+1/2	+5/2	14.030
-3/2	-1/2	7.015	+3/2	+5/2	7.015
-3/2	+1/2	14.030			
-3/2	+3/2	21.045			
-3/2	+5/2	28.060			

Tabla 5. Diferencias de energía para transiciones entre $j=3/2$ y $j=5/2$

$m_{j=3/2}$	$m'_{j=5/2}$	$\Delta E (\times 10^{-5} \text{ eV})$	$m_{j=5/2}$	$m'_{j=3/2}$	$\Delta E (\times 10^{-5} \text{ eV})$
-3/2	-1/2	3.954	-5/2	-3/2	10.075
-3/2	+1/2	10.969	-5/2	-1/2	14.752
-3/2	+3/2	17.984	-5/2	+1/2	19.428
-3/2	+5/2	24.999	-5/2	+3/2	24.105
-1/2	+1/2	6.292	-3/2	-3/2	3.060
-1/2	+3/2	13.307	-3/2	-1/2	7.737
-1/2	+5/2	20.323	-3/2	+1/2	12.413
+1/2	+1/2	1.616	-3/2	+3/2	17.090
+1/2	+3/2	8.631	-1/2	-1/2	0.722
+1/2	+5/2	15.646	-1/2	+1/2	5.398
+3/2	+3/2	3.954	-1/2	+3/2	10.075
+3/2	+5/2	10.969	+1/2	+3/2	3.060

Estos valores obtenidos corresponden a un campo total de 1.01T. Como se mencionó, existen diversos valores de campo magnético, en el caso de espectroscopía hay mayor diversidad en comparación a MRI. Para establecer una comparativa, si se reemplaza un valor de campo de 5T, las frecuencias para $j = 3/2$ y $j = 5/2$ son de aproximadamente 56 y 84 GHz y para un campo de 10T son de 112 y 168 GHz, respectivamente. Se podría entonces plantear un rango de valores que cambian en función del campo magnético total, en donde al menos para algunos rangos es posible realizar resonancia de espín de electrones (ESR, por sus siglas en inglés), por ejemplo, en las bandas X (7-11 GHz), K (18-27 GHz), W (75-110 GHz) y mm (110-300 GHz).

6. CONCLUSIONES

Se propuso este modelo para los electrones de valencia del átomo de hierro y se obtuvieron los niveles de energía posibles y sus respectivas frecuencias para uno de los cuatro electrones de valencia sin emparejar, al resolver sus degeneraciones. Así, debería ser posible excitarlos de forma específica al inducirles una o más de esas frecuencias y entonces generar una mayor reacción del medio. Como se mencionó en la introducción, en la literatura no se ha encontrado una perspectiva que permita comparar esta forma de abordar el problema bajo estas condiciones de campo magnético y, por tanto, estos resultados teóricos (solo resta una posible simulación y futura comparación experimental), sin embargo se espera lograr el efecto antes mencionado, que éste induzca una mayor señal en los detectores del aparato de MRI y por tanto un mejor contraste en la imagen, o sea, que ayude en la visualización del hierro en el cuerpo humano. Se prevé que estos efectos sean detectables porque las diferencias de energía que se obtuvieron son mayores a las que se emplean típicamente para el agua (como se explicó en la sección anterior) y están en el orden de frecuencias empleadas comúnmente para resonancia de electrones.

7. REFERENCIAS

- [1] Barrie, N. y Webb, A., [Introduction to Medical Imaging Physics, Engineering and Clinical Applications], Cambridge University Press (2011).
- [2] Nouredine, Z., [Quantum Mechanics Concepts and Applications], Second Edition, John Wiley & Sons, Ltd (2009).
- [3] Soto, J. and Sosa, M., “Quantum-mechanical aspects of magnetic resonance imaging”. *Rev. Mex. Fís. E* 63, 48-55 (2017).
- [4] Epel, B., Halpern, H. J., “Imaging”. *eMagRes* 6, 149–160 (2017).
- [5] Twig, Y., Dikarov, E., and Blank, A., “Ultra miniature resonators for electron spin resonance: Sensitivity analysis, design and construction methods, and potential applications”. *Molecular Physics* 111, 2674–2682 (2013).
- [6] Cho, F. H., Stepanov, V., Abeywardana, C., Takahashi, S., “Chapter Five - 230/115GHz Electron Paramagnetic Resonance/Double Electron–Electron Resonance Spectroscopy”. *Methods in Enzymology* 563, 95-118 (2015).