

# Magnetic Resonance Field Effect Spins in Living Tissue: a Delusive Points Analysis

Rodolfo Grosso and Franco Simini

*Núcleo de Ingeniería Biomédica de las Facultades de Medicina e Ingeniería, Universidad de la República, Uruguay.  
contact: rgrosso@fing.edu.uy*

**Abstract**— Magnetic Resonance Imaging uses the physical phenomenon of Nuclear Magnetic Resonance applied to hydrogen atoms nuclei in living tissue for imaging. The physical phenomena involved are on a nuclear scale and correspond to a convenient manipulation of the *spin* of the nuclei, as a result of which a net magnetization is obtained on a macroscopic scale. This manipulation begins with the application of a constant magnetic field that has several effects on the *spins*. In much of the literature, Classical Mechanics is apparently convincingly used to explain these effects. After applying the field, the *spins* have a quasi-isotropic distribution of directions, there is no simplification of Classical Mechanics which consists of representing all the *spins* as vectors *ups and downs* (error 1). In a Classical Mechanical environment, the *spins* do not precess on the same cone (error 2), there is a spiral for each one until reaching thermal equilibrium. This movement is affected by random disturbances. Both errors come from wrong interpretations of quantum results: 1) Quantum Ups and Downs are eigen states to which intermediate states collapse and should not be confused with upward or downward vectors. 2) comes from confusing the projection on an axis with an eigenvalue. Furthermore, a third error consists in not considering the variation of the angle of the spin with the direction of the magnetic field. A fourth point is that a detailed explanation of thermal equilibrium and the occurrence of net magnetization is not provided in the literature. A demonstration that uses Statistical Thermodynamics is presented here, where equilibrium is shown as the final part of the evolution of macrostates towards the most probable, while the potential energy of the *spins* decays, which is converted into kinetic energy of the *lattice*.

**Keywords**— Biomedical Engineering, Medical Physics, Magnetic Resonance Imaging.

**Resumen**— La Imagenología por Resonancia Magnética utiliza el fenómeno físico de la Resonancia Magnética Nuclear aplicado a los núcleos de los átomos de hidrógeno del tejido biológico. Los fenómenos físicos involucrados son a escala nuclear y corresponden a una manipulación conveniente del *spin* de los núcleos, a consecuencia de la cual se obtiene una magnetización neta a escala macroscópica. Esta manipulación comienza con la aplicación de un campo magnético constante que tiene varios efectos sobre los *spins*. En gran parte de la literatura se recurre en modo aparentemente convincente a la Mecánica Clásica para explicar estos efectos. Luego de la aplicación del campo, los *spins* tienen una distribución cuasi-isotrópica de direcciones, no existe la simplificación de Mecánica Clásica que consiste en representar todos los *spins* como vectores *ups y downs* (error 1). En un entorno Mecánica Clásica los *spins* no precesan sobre un mismo cono (error 2), existiendo para cada uno una espiral hasta llegar al equilibrio térmico. Este movimiento se encuentra afectado por perturbaciones aleatorias. Ambos errores provienen de equivocadas interpretaciones de resultados cuánticos: 1) los Ups y Downs cuánticos son estados propios a los cuales colapsan los estados intermedios y no deben confundirse con vectores hacia arriba o hacia abajo. 2) proviene de confundir la proyección sobre un eje con un valor propio. Además un tercer error consiste en no considerar la variación del ángulo del spin con la dirección del campo magnético. En un cuarto punto se presenta una versión personalizada de la única demostración que encontramos en la literatura que proporciona una explicación clásica detallada del equilibrio térmico y la aparición de la magnetización neta. Esta recurre a la Termodinámica Estadística y muestra el equilibrio como parte final de la evolución de macroestados hacia el más probable, mientras decae la energía potencial de los *spins* que es convertida en energía cinética del *lattice*.

**Palabras clave**— Ingeniería Biomédica, Física Médica, Imagenología por Resonancia Magnética.

## I. INTRODUCCIÓN

**L**A Imagenología por Resonancia Magnética (MRI por sus siglas en inglés) es una técnica de imagenología médica

que utiliza el fenómeno físico de la resonancia magnética nuclear (NMR) para obtener información anatómica del tejido, que se muestra como imágenes de slices del cuerpo humano. Una variante actual llamada *f-MRI* (funcional MRI) usa

ciertas secuencias de pulsos de radiofrecuencia para obtener imágenes funcionales [1].

El desarrollo de MRI es el resultado de una gran cantidad de avances en el conocimiento que van desde los primeros experimentos de Otto Stern e Isidor Rabí, las demostraciones hechas por Edward Purcell y Felix Bloch, las observaciones de Raymond Damadian y la base actual de la aplicación para Imágenes de Richard Ernst, Paul Lauterbur y Peter Mansfield, muchos de los cuales obtuvieron premios Nobel por su investigación. A ellos se unen referentes actuales como Lars Hanson, Malcolm Levitt y Csaba Szántay, entre otros.

El fenómeno de la NMR se produce a escala nuclear y se explica mediante Mecánica Cuántica y, en principio, no se debería esperar en primera instancia que fuera explicado por Mecánica Clásica. Sin embargo, la explicación física de la NMR presenta la dualidad de que algunos de sus procesos puedan ser explicados a la vez por Mecánica Clásica y por Mecánica Cuántica, como indica Hanson [2]. La literatura científica abarca esta dualidad pero sin embargo, en algunos puntos, se encuentran con frecuencia explicaciones incompletas, ambiguas, erróneas pero aparentemente convincentes. Esto ha sido puesto de manifiesto por Hanson [2], Szántay [3], Levitt [4] y recientemente presentado por Grosso y Simini en [5], [6]. Tal es el caso de los fenómenos que involucra a los spins de átomos de hidrógeno, abundantes en el tejido humano, al ingresar al campo magnético constante de un resonador. Ésta es una parte ampliamente conocida del fenómeno de NMR, llamada relajación longitudinal o relajación *spin-lattice*.

Nuestro trabajo se centra en identificar estas incoherencias teóricas y proponer una explicación correcta siguiendo la lógica deductiva. Se recurre principalmente a la Mecánica Clásica que permite una mayor sencillez teórica utilizando una menor cantidad de conocimientos, dando explicaciones correctas para el mundo de la ingeniería al que está dedicado este trabajo.

Este artículo está organizado de la siguiente forma. En la sección II se introduce de forma original el concepto de *spin*, se da una representación especial para un conjunto de *spins* y se justifica la dualidad del fenómeno de la NMR, dando paso para seguir con Mecánica Clásica. En la sección III se analizan y corrigen explicaciones usuales incorrectas que tratan el movimiento del *spin*. En la sección IV se analiza cómo se llega a un equilibrio térmico y a la aparición de la magnetización neta. Se da una explicación completa más allá de la suposición simplista de un equilibrio entre energía potencial y movimiento Browniano. Finalmente la sección V presenta conclusiones y ajustes conceptuales.

## II. ELEMENTOS BÁSICOS

### A. Spin

Desde su desarrollo en 1925 la ecuación de Schrödinger es una ley perfectamente aplicable a los fenómenos de la Mecánica Cuántica no relativista. Sin embargo, un tiempo después se encontraron incompatibilidades cuando se aplicaba a la espectrografía de metales alcalinos. Para resolver este problema, los físicos Uhlenbeck y Goudsmit postularon la existencia de una nueva propiedad intrínseca de las partículas

que se comportaban como un momento angular que luego Pauli llamó *spin*. El conocido experimento de Stern-Gerlach con electrones fue la primera prueba de su existencia, aunque sus realizadores no lo explicaron así.

El *spin* a veces se dibuja como una esfera que gira sobre sí misma alrededor de un eje, lo que no tiene sentido ya que no hay esfera ni rotación, aunque este dibujo puede ayudar a la mente a identificarlo con algo físico conocido, recordando siempre que solo eso es. El *spin* solo se define correctamente en el ámbito de la Mecánica Cuántica donde se representa por un spinor. No tiene estrictamente un análogo clásico, aunque suele considerarse para ciertos razonamientos como los que haremos como un vector  $\vec{S}$  que puede tener cualquier dirección y que su módulo constante cumple:

$$|\vec{S}|^2 = s(s+1)\hbar^2 \quad (1)$$

Donde se toma de mecánica cuántica el *número cuántico de spin*  $s$  que para el núcleo de un átomo de hidrógeno vale  $s = \frac{1}{2}$ , por lo que:

$$|\vec{S}|^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \quad (2)$$

### B. Momento magnético

Además de la propiedad del spin, las partículas tienen un momento magnético asociado. En 1943, Otto Stern demostró la existencia del momento magnético de un protón, por lo que este se comporta como un pequeño imán. El momento magnético  $\vec{\mu}$  de un protón se relaciona con el *spin* por la conocida igualdad  $\vec{\mu} = \gamma\vec{S}$  que, combinada con la ecuación (2), produce:

$$|\vec{\mu}| = \gamma\hbar\frac{\sqrt{3}}{2} \quad (3)$$

En síntesis, desde el punto de vista clásico, el *spin* y el momento magnético de una partícula son vectores colineales que pueden tomar cualquier dirección pero con módulo constante. La ecuación 3 lleva al abuso de lenguaje de indistintamente referirse a *spin*  $\vec{S}$  o vector de momento magnético  $\vec{\mu}$ .

### C. Spin-globe

Sin la aplicación de un campo magnético, los *spins* pueden tener cualquier dirección. Por lo tanto, es común ver diagramas como el de la Fig. 1.

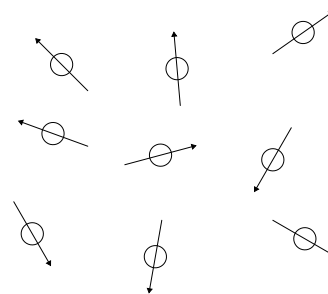


Fig. 1. Esquema habitual de representación de *spins* libres. Los vectores tienen el mismo módulo y cualquier dirección.

Lars Hanson introdujo una forma muy conveniente de representar un conjunto de *spins* o de momentos magnéticos [7] y [2], llamada *spin-ball* o *spin-globe*. Consiste en dibujar todos los vectores con un origen común. Como todos tienen el mismo módulo pero pueden tener cualquier dirección, sus extremos definen la superficie de una esfera. Esto es útil para seguir los pasos de razonamiento del fenómeno de NMR. En la Fig. 2 se muestra el caso de *spins* libres sin campo aplicado.

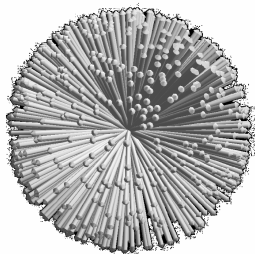


Fig. 2. Representación creada por Lars Hanson llamada *spin-globe* tomada del libro de Szántay [3], que también podríamos llamar  $\mu$ -globe.

#### D. Dualidad

La explicación física de la NMR presenta la singular dualidad de que la mayoría de los fenómenos pueden explicarse a la vez por Mecánica Clásica y por Mecánica Cuántica. Esta dualidad en la NMR se manifestó naturalmente desde un comienzo ya que independientemente y en un período de unas pocas semanas, Felix Bloch y Edward Purcell explicaron el fenómeno de NMR utilizando Mecánica Clásica (Bloch) y Mecánica Cuántica (Purcell). Ambos obtuvieron un Premio Nobel en el mismo año 1952.

Para la explicación de esta dualidad podemos recordar el Principio de Correspondencia: “la descripción mecánico-cuántica de un gran conjunto de entidades atómicas idénticas y no interactivas da el mismo resultado que la descripción clásica de ese conjunto”, Szántay [3], Houtt [8]. Este principio es aplicable al caso de NMR ya que, la cantidad de protones en un microlitro de agua es aproximadamente un mol, y para muchos fenómenos de NMR su interacción es suficientemente débil.

Esta dualidad parece muy generosa, pero vale la pena recordar las palabras de Dante: “No te dejes engañar por lo anchuroso de la puerta”, ya que esta dualidad ha sido el origen de muchas interpretaciones erróneas en NMR. En efecto, han habido interpretaciones erróneas de resultados cuánticos utilizando Mecánica Clásica, provenientes de las llamadas por Szántay “*trampas mentales*” [3]. Varios autores han analizado y propuesto correcciones a estos errores [2], [4] y [3].

### III. MOVIMIENTO DE LOS SPINS EN UN CAMPO MAGNÉTICO

Al aplicar un campo  $\vec{B}_0$  se inicia un movimiento de los *spins* que desde un punto de vista simplificado se puede asociar con un movimiento de precesión con eje colineal con el campo. Las ecuaciones del movimiento son bien conocidas

y se encuentran por ejemplo deducidas por Lauterbur [9]. Es frecuente encontrar en la literatura que todos los *spins* están “hacia arriba o hacia abajo” o que en el movimiento de precesión describen un cono (o su opuesto por el vértice). Esto es incorrecto. Veremos cómo surgen estos errores y qué es lo correcto.

#### A. Vectores “ups and downs”

1) *Planteo del error:* Al aplicar el campo  $\vec{B}_0$  es muy usual encontrar referencias a vectores de momentos magnéticos “ups and downs”, significando que solamente hay vectores hacia arriba (en el sentido del campo) o hacia abajo (en sentido contrario). Veremos el origen de esta expresión y de dónde surge el error de considerar que sólo hay vectores de este tipo.

2) *Origen:* Como sabemos de Mecánica Cuántica, luego de aplicar el campo  $\vec{B}_0$  cada partícula puede ser encontrada en cualquier estado combinación  $a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$  y cuando se realiza la observación ocurre un colapso hacia uno de los estados propios  $|\uparrow\rangle$  o  $|\downarrow\rangle$ , también llamados “Up and Down”. Algunos autores trasladan erróneamente el “Up and Down” al mundo clásico interpretando que solo hay vectores en el sentido del campo o en sentido contrario, no teniendo en cuenta que pueden existir también clásicamente posiciones intermedias<sup>1</sup>. También los llaman paralelos y antiparalelos (lo que no es una buena expresión geométrica). La difusión de este error se debe quizás a su similitud aparente con agujas inmersas en un campo magnético.

3) *Lo correcto:* La distribución de los *spins* es casi isotrópica. Los vectores de momento magnético pueden tener cualquier dirección, incluso ser perpendiculares a la dirección del campo. Al final se llega a un equilibrio térmico. Podemos hacer una división del *spin-globe* en dos hemisferios, uno superior que es el del sentido del campo y otro inferior. Entonces las cantidades de *spins* en ambos hemisferios son casi iguales, habiendo unos pocos más en el hemisferio superior, que es lo que produce la magnetización neta, como se mostrará en detalle más adelante, ver Fig. 10.

#### B. Precesión en un cono

1) *Planteo del error:* Es usual encontrar la afirmación que todos los vectores de momento magnético en su movimiento de precesión describen un cono o su opuesto por el vértice. Veremos el origen de este error y cuál es el movimiento correcto.

2) *Origen:* Dado un vector  $\vec{\mu}$  sea  $\mu_z$  su componente según el eje  $z$  y sea  $\mu_{xy}$  la componente según el plano  $xy$ , como se muestra en la Fig. 3. Es usual encontrar en la literatura el siguiente razonamiento. Dada la expresión:

$$\mu_z = \gamma m_I \hbar \quad (4)$$

donde  $m_I$  es el número cuántico magnético, teniendo en cuenta la ecuación (3) se tiene el triángulo formado:

$$\cos\theta = \frac{\mu_z}{\mu} = \frac{m_I}{\sqrt{3}/2} \quad (5)$$

<sup>1</sup>Esta observación ya figura en por ejemplo [2] y [10]

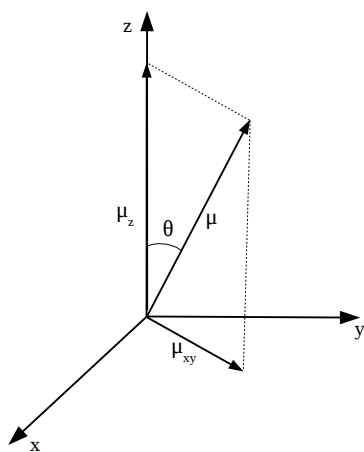


Fig. 3. Vector  $\vec{\mu}$  y sus componentes  $\vec{\mu}_z$  y  $\vec{\mu}_{xy}$ .  $\theta$  es el ángulo entre el eje  $z$  y el vector  $\vec{\mu}$ , orientado en ese sentido, por lo que  $0 \leq \theta \leq 180^\circ$ .

Para el hidrógeno  $s = 1/2 \Rightarrow 2s + 1 = 2 \Rightarrow \{m_I\} = \{-1/2, 1/2\}$  y reemplazando  $m_I$  se obtiene un valor para  $\theta$ :

$$\theta = \pm 54^\circ \tag{6}$$

Así, el vector de momento magnético puede tomar solo dos posibles orientaciones, como se muestra en la Fig. 4 y precesaría en dos conos con esa apertura.

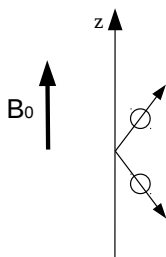


Fig. 4. Representación usual de los spins en el campo  $B_0$ . Sugiere la idea equivocada de que todos los spins forman un mismo ángulo  $\theta$  con el eje  $z$ .

El error en este razonamiento es combinar elementos cuánticos con clásicos. Se considera erróneamente que el momento magnético es un vector clásico, cuando en realidad es un operador (como mencionamos antes) y se lo combina también erróneamente con la ecuación (4) que en realidad corresponde a un estado propio y no a una proyección. Además es de conocimiento en Mecánica Cuántica que las tres coordenadas de  $\mu$  no pueden conocerse de antemano para sustituir en la ecuación (5).

3) *Correcciones:* La ecuación de movimiento del spin en un campo magnético [9], muestra el movimiento de precesión en torno al eje  $z$  a la frecuencia de Larmor  $\omega_L = \gamma B_0$ . Sin embargo hacemos notar las siguientes correcciones:

- (a) Los vectores inician sus movimientos con un ángulo  $\theta_0$  diferente, según demuestra la Mecánica Cuántica [4], en consecuencia cada vector describe un cono diferente de apertura ese ángulo.
- (b) Este movimiento de precesión corresponde a un spin "en el vacío" al cual se le aplica el campo. En la realidad el

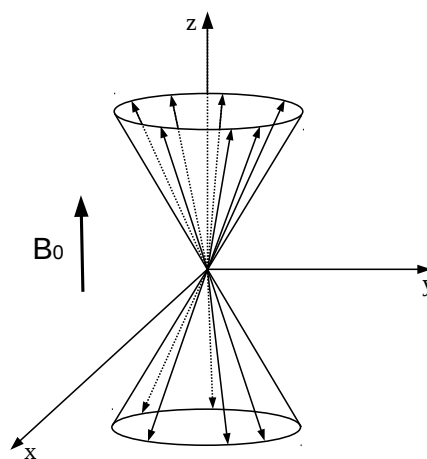


Fig. 5. Vectores con movimiento de precesión en dos conos opuestos. Si bien esta figura es usual en la literatura, es incorrecta ya que el ángulo  $\theta$  (entre el vector y el eje  $z$ ) puede ser cualquiera, por lo tanto no describen todos un mismo cono como sugiere esta representación.

*spin* se encuentra inmerso en el *lattice* y se da la conocida interacción *spin-lattice*, principalmente dada por pérdida de energía potencial para el *spin* y aumento de la energía cinética para el *lattice*. En este movimiento caótico el *spin* tiende a un estado de menor energía. Como su energía potencial es  $E_P = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_0 = -|\vec{\mu}||\vec{B}_0| \cos \theta$ , ésta decrece al disminuir  $\theta$ . En consecuencia el movimiento del *spin* por su propia esencia reduce el ángulo  $\theta$  y por ello termina siendo en espiral. La disminución de  $\theta$  es muy poca.

- (c) Existen perturbaciones aleatorias al movimiento ya que cada *spin*  $i$  se encuentra sometido al campo  $\vec{B}_0$  más la influencia aleatoria de otros que llamamos  $\delta B_i$ , lo que provoca tres efectos: a) cambio en la frecuencia de precesión pasando a ser  $\gamma(B_0 + \delta B_i)$ , b) variaciones mínimas en el eje, por lo que ya no precesa exactamente según  $z$  y c) variaciones en  $\theta$ .
- (d) Al llegar al equilibrio térmico cesa el movimiento en espiral y el ángulo  $\theta$  pasa a tener un valor constante  $\theta_1$  a menos de las perturbaciones mencionadas.

En consecuencia, desde la aplicación del campo cada vector tiene un movimiento resultante de composición del giro y del decrecimiento leve de  $\theta$ , por lo que su extremo recorre una espiral esférica (ya que el módulo es constante (Ec. 1)). Esto sucede hasta cuando se alcanza el equilibrio térmico donde abandona la espiral y pasa a recorrer un paralelo del *spin-globe*.

Así introducimos por primera vez que el lugar geométrico del extremo de cada vector de momento magnético es una porción de espiral esférica diferente para cada vector. Esta espiral es de eje  $z$  y su comienzo tiene un ángulo de apertura:

$$\theta_0 = \theta|_{t=t_0}$$

siendo  $t_0$  el instante de aplicación del campo y  $\theta$  el ángulo definido en la Figura 3. Esto sucede hasta lograr el equilibrio térmico, durante el cual describe la circunferencia del paralelo. Este movimiento se encuentra contaminado por las perturbaciones indicadas en (c).

Para facilitar la comprensión del fenómeno, se puede considerar que el extremo del vector recorre en espiral la “calota polar” hasta que toma un paralelo determinado debido a la obtención del equilibrio térmico, interrumpiendo la espiral.

No hemos encontrado en la literatura ninguna explicación de este tenor para describir en forma intuitiva y correcta el fenómeno del movimiento del vector. Los conos habitualmente considerados como muestra la Fig. 5 no incluyen el fenómeno de la variación de  $\theta$  y por lo tanto sugieren equivocadamente un movimiento circular que es el que adquiere en realidad el vector recién cuando llega al equilibrio térmico.

Observemos finalmente que  $\theta_1$  es menor que  $\theta_0$ , por una diferencia mínima, por lo que la espiral recorre una corona circular esférica muy apretada. Además si bien ejemplificamos con una “calota polar”, el vector puede responder a cualquier valor de ángulo  $\theta_0$ , sea  $30^\circ$ ,  $80^\circ$  o  $150^\circ$  (en este último caso está apuntando hacia abajo, pero el efecto de reducción de ángulo es el mismo).

#### IV. EQUILIBRIO TÉRMICO Y MAGNETIZACIÓN NETA

Al final del proceso de relajación *spin-lattice* el conjunto formado por los *spins* y el *lattice* alcanza un estado de equilibrio térmico con una magnetización neta con módulo no nulo y dirección y sentido según el campo  $\vec{B}_0$ . En la literatura se presenta superficialmente el mecanismo microscópico para alcanzar el equilibrio sin ir más allá de mencionar un supuesto balance entre la energía potencial y el movimiento browniano de las moléculas. La única demostración que hemos encontrado utilizando Mecánica Clásica para explicar el surgimiento de la magnetización neta y cómo se llega al equilibrio térmico es debida a Csaba Szántay [3]. En ella se aplican conceptos de Termodinámica Estadística cuya demostración adaptamos al enfoque de este artículo.

##### A. Lattice

Se puede estudiar el sistema molecular como siendo formado por dos subsistemas: el conjunto de los *spins* y el *lattice*. Pero, ¿qué es el *lattice*? Las moléculas del tejido tienen una temperatura mayor que el cero absoluto, por lo que tienen un movimiento Browniano y por lo tanto una energía cinética considerablemente mayor que la que se da a esa temperatura límite. Teniendo esto en mente, una buena definición de *lattice* es la de Paul Trofts en [11], muy cercana a la del propio Szántay en [3]: “The lattice is regarded as a large thermal reservoir and may be considered to be made up of energy states associated with atomic and molecular vibrations and rotations”.

##### B. Desde el comienzo

Partimos de la suposición que inicialmente, es decir en ausencia del campo  $\vec{B}_0$ , la energía potencial  $E_p$  del sistema es nula. En  $t = 0$  se aplica el campo  $\vec{B}_0$ , con lo que el sistema gana energía potencial  $E_p(0)$ . Para  $t > 0$   $E_p$  depende del tiempo, o sea  $E_p = E_p(t)$ . Asumiendo que el sistema es cerrado se tiene:

$$E_k(t) + E_p(t) = E \quad (7)$$

donde  $E_k$  es la energía cinética y  $E$  es constante. La energía potencial obtenida por los *spins* es transferida al *lattice* incrementando su energía cinética, con lo que aumenta levemente su temperatura. En consecuencia  $E_p(t)$  resulta decreciente.

##### C. Herramientas de la demostración

1) *Conceptos de macroestados y microestados*: En este contexto, dado un sistema con  $N$  partículas donde se definen  $M$  celdas determinadas por parámetros de las partículas vinculados con su energía, llamamos macroestados a las posibles configuraciones de partículas en las celdas, considerando a las partículas como indistinguibles. Para cada macroestado hay en general una cantidad muy grande de microestados que lo pueden originar, considerando a las partículas como distinguibles [12].

2) *Una simulación de la realidad*: Consideramos un ejemplo muy sencillo que simula un conjunto de *spins* y un *lattice*. Primero analizaremos el sub-conjunto de *spins*, luego el *lattice* y luego el sistema total. Iremos desarrollando el ejemplo a medida que introducimos conceptos.

Sea el sub-conjunto de *spins* que representamos con el *spin-globe* simplificado con  $N = 16$  partículas y  $M = 8$  celdas. La Fig. 6 muestra los macroestados y la Fig. 7 muestra dos microestados de un macroestado.

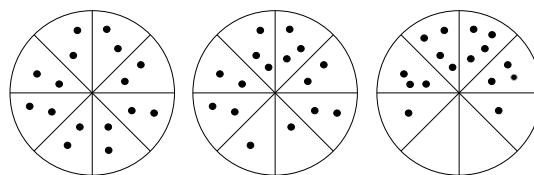


Fig. 6. Ejemplo de escritorio de un conjunto de *spins* con 8 celdas. Se muestran 3 macroestados llamados de izquierda a derecha 1, 2 y 3. El paso de un macroestado a otro puede ser pensado como una migración en la dirección del campo  $\vec{B}_0$  asociada al decrecimiento de la energía potencial  $E_p$ . En cada macroestado los spins son indistinguibles.

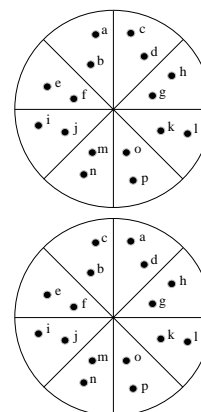


Fig. 7. Dos posibles microestados del macroestado 1 de la Fig. 6. Difieren en la permutación de un *spin*. En los microestados los spins son distinguibles.

Calculamos la cantidad de microestados para los macroestados 1, 2 y 3 de la Fig. 6:

$$\Omega_{s1} = \binom{16}{2} \binom{14}{2} \binom{12}{2} \binom{10}{2} \binom{8}{2} \binom{6}{2} \binom{4}{2} \binom{2}{2}$$

Tabla I  
EVOLUCIÓN DE LA CANTIDAD DE MICROESTADOS POR MACROESTADO DEL SISTEMA MOLECULAR AL DECRECER LA ENERGÍA POTENCIAL

		tiempo → (E <sub>p</sub> decrece)		
		Cantidad de microestados del macroestado 1 de los spins: 8.1 x10 <sup>10</sup>	Cantidad de microestados del macroestado 2 de los spins: 3.6 x10 <sup>10</sup>	Cantidad de microestados del macroestado 3 de los spins: 1 x10 <sup>9</sup>
tiempo → (E <sub>k</sub> crece)	Cantidad de microestados del macroestado 1 del lattice: 1.1 x10 <sup>13</sup>	8.9 x10 <sup>23</sup>		
	Cantidad de microestados del macroestado 2 del lattice: 4 x10 <sup>15</sup>		1.4 x10 <sup>26</sup>	
	Cantidad de microestados del macroestado 3 del lattice: 1.2 x10 <sup>14</sup>			1.2x10 <sup>23</sup>

$$\Omega_{s1} \approx 8.1 \times 10^{10}$$

Análogamente:

$$\Omega_{s2} \approx 3.6 \times 10^{10}$$

$$\Omega_{s3} \approx 1 \times 10^9$$

Aunque es un ejemplo muy simple, las cantidades de microestados por macroestado son muy grandes. La cantidad de microestados de cada macroestado decrece cuanto más desbalanceada es la cantidad de *spins* por celda. Con estos valores comenzamos así a completar la Tabla I en la fila que muestra la evolución de la cantidad de microestados de los diferentes macroestados del sub-sistema de los spins al decrecer  $E_p$ .

En el subsistema del *lattice* consideramos 3 macroestados correspondientes a los de los spins. Esto significa que corresponden al mismo tiempo o a la misma energía potencial. Suponemos a manera de ejemplo que la cantidad de sus microestados sea la indicada en la correspondiente columna de la Tabla I. Los valores están elegidos de forma que reflejen la realidad presentando un máximo para un cierto macroestado.

Si simbolizamos como  $\Omega_s$  la cantidad de microestados de un determinado macroestado del sub-conjunto de *spins* y  $\Omega_l$  la cantidad de microestados de un macroestado determinado del *lattice*, la cantidad de microestados de los macroestados del sistema es producto de las cantidades de cada uno.

$$\Omega = \Omega_s \times \Omega_l \quad (8)$$

Completamos la Tabla I con los valores de esos productos.

3) *Resultados termodinámicos*: Los siguientes resultados se utilizarán para la demostración:

- En un sistema aislado en equilibrio térmico, todos los microestados son igualmente probables [13].
- Un sistema encuentra su estado de equilibrio que corresponde al macroestado más probable, es decir, el que tiene la mayor cantidad de microestados posibles.

Entonces, para analizar el equilibrio, calcularemos esas probabilidades, lo que equivale a encontrar la cantidad de microestados de cada macroestado.

La Tabla I muestra que el macroestado con el mayor número de microestados corresponde a la combinación de macroestado

2 de *spins* y macroestado 2 del *lattice*. Este macroestado será el del equilibrio térmico. El sistema molecular va evolucionando entonces al decrecer la energía potencial hasta este estado.

#### D. Macroestados en el conjunto de spins

Definimos en el *spin-globe* un conjunto de celdas determinadas por las posiciones de los extremos de los *spins* en la superficie, como muestra la Fig. 8. Por pertenecer a la superficie de esta esfera queda determinado cada uno por los ángulos de elevación y acimut. En consecuencia siendo  $N_s$  la cantidad de spins el conjunto tiene  $f = 2N_s$  grados de libertad.

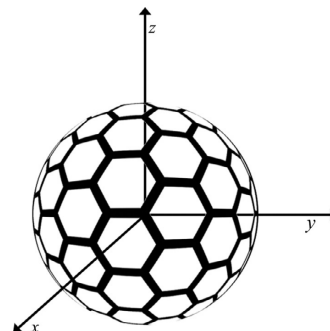


Fig. 8. Superficie del *spin-globe* dividida en celdas, cuyo tamaño obviamente se encuentra exagerado. Figura tomada del libro de Szántay [3]

Como adelantamos en el ejemplo, según disminuye  $E_p$  los *spins* van cambiando de macroestado. En consecuencia, la cantidad de microestados de cada macroestado depende de  $E_p$ , es decir  $\Omega_s = \Omega_s(E_p)$ , que decrece rápidamente, consecuencia de la gran cantidad de grados de libertad.

#### E. Macroestados del lattice

Sea  $\vec{v}$  la velocidad de una molécula. Como todo vector en el espacio tiene tres grados de libertad que por conveniencia tomamos como su módulo  $v$  y su dirección (dos ángulos,  $\theta$  y  $\phi$ ). Por lo tanto si tenemos  $N_l$  moléculas, la cantidad de grados de libertad es  $f = 3N_l$ .

Como se muestra en la Fig. 9, una celda del *lattice* queda definida por:

$$(\theta + \delta\theta, \phi + \delta\phi, v + \delta v)$$

Los macroestados evolucionan al decrecer  $E_p$ . Su cantidad de microestados  $\Omega_l$  crece muy súbitamente como consecuencia de la gran cantidad de grados de libertad y luego decrece.

#### F. En suma

Una vez aplicado el campo  $\vec{B}_0$ , al transcurrir el tiempo decrece la energía potencial  $E_p$  de los spins y con ella  $\Omega_s(E_p)$  decrece y  $\Omega_l(E_p)$  crece rápidamente. El producto  $\Omega = \Omega_s(E_p) \times \Omega_l(E_p)$  tiene un máximo que corresponde según los resultados termodinámicos mencionados al macroestado del equilibrio térmico.

Durante este proceso hay una migración de *spins* del hemisferio inferior al superior del *spin-globe*, por la leve reducción del ángulo  $\theta$  mencionada. En consecuencia, en el

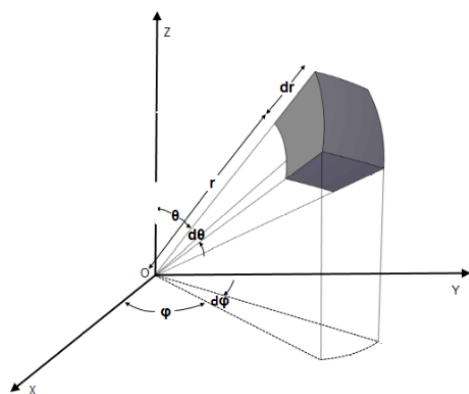


Fig. 9. Celda en el *lattice* en una dirección  $d_i = (\theta, \phi)$ . La velocidad se encuentra entre  $v_0$  y  $v_0 + \delta v$ . Figura extraída de la página de medium.com, heat-conduction-equation-in-spherical-coordinates.

macroestado de equilibrio hay una diferencia, muy menor, de *spins* a favor del hemisferio superior que es la que origina la magnetización neta, como se muestra en Fig. 10. Esta es la verdadera explicación de cómo se obtiene una magnetización neta originada por los *spins* al aplicar el campo.

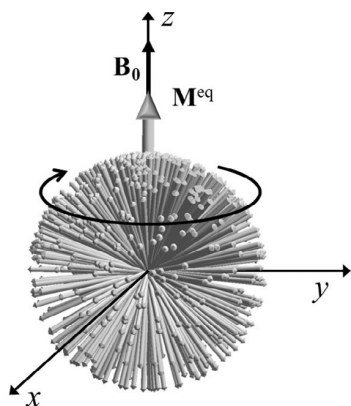


Fig. 10. *Spin-globe* en un campo  $B_0$  en equilibrio térmico. Se observa una magnetización neta según el eje  $z$ . Extraída del libro de Szántay [3].

Si bien el valor de esta diferencia que aparece en la literatura es de 3 *spins* en  $10^6$  con un campo de 1,5 Tesla, debe cuidarse que es un resultado probabilístico, por lo que debe tomarse con cuidado. Esta diferencia es muy pequeña en términos relativos, pero no absolutos, ya que hay una cantidad enorme de *spins*. A pesar de ello, la señal producida por la magnetización neta como sabemos es extremadamente débil.

Como consecuencia de lo anterior debe tenerse en cuenta que (en esta explicación utilizando Mecánica Clásica) la migración no corresponde a un *spin* que viene desde extremos muy bajos del *spin-globe* a muy altos. La migración es muy pequeña y se asemeja al cambio que produce una suave brisa sobre una cipsela.

Observemos que el estado al que se llega es de equilibrio pero no es estático.

## V. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

En gran parte de la literatura sobre RMN encontramos una escasez teórica manifiesta y algunas explicaciones incorrectas.

Esto se debe a la naturaleza compleja de los fenómenos involucrados y también a la superposición parcial entre la Mecánica Cuántica y la Mecánica Clásica.

¿Podría ser que esto tuviera un efecto indirecto en los diagnósticos? Decididamente no. Más aún, las consecuencias quizás no sean relevantes para una comprensión superficial de la RMN, pero su desconocimiento es un obstáculo para el aprendizaje.

Nuestro trabajo es una contribución original a la literatura de RMN, que por utilizar Mecánica Clásica puede ser abordada y entendida en el mundo de la ingeniería. Deseamos por lo tanto que sea de ayuda a docentes, ingenieros e investigadores en un nivel de aprendizaje intermedio sobre el tema.

Si bien es necesario recurrir a la Mecánica Cuántica para describir algunos fenómenos de la RMN como los tiempos medios T1 y T2, otros como el efecto del campo en el movimiento de los *spins* bien pueden ser descriptos con Mecánica Clásica, de la forma que se hace en este trabajo. Con estas puntualizaciones esperamos haber contribuido a una mejor explicación formal de los fundamentos de la RMN para quienes conciben nuevas implementaciones y procesamientos de las señales adquiridas.

Los próximos pasos de nuestra investigación se referirán a un tratamiento más algebraico de la demostración de la llegada al equilibrio térmico y del fenómeno desencadenado al aplicar el pulso de RF.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores expresan su gratitud al Dr. Lars G. Hanson perteneciente al Danish Research Centre for Magnetic Resonance (DRCMR) por su disposición y sus importantes contribuciones, sin las cuales algunas partes de este trabajo no estarían. Muy especial agradecimiento y reconocimiento al Dr. Csaba Szántay de la Technical University of Budapest y el Spectroscopic Research Division Gedeon Richter de Hungría por revisar y corregir nuestro trabajo, haciendo valiosas sugerencias y aportes. Finalmente los autores agradecen al Dr. Malcolm Levitt de la Universidad de Southampton en el Reino Unido, por sus rápidas y valiosas respuestas.

## REFERENCIAS

- [1] Patrick Stroman, *Essentials of Functional MRI*, 1st ed. CRC Press, June 2011, ISBN 978-1-4398-1878-7, pp xv+311.
- [2] Lars G. Hanson, "Is Quantum Mechanics necessary for understanding Magnetic Resonance?" <http://www.drcmr.dk/Docs/IsQuantumMechanicsNecessaryForUnderstandingMagneticResonance.pdf>, pp. 1–31, September 2008, Danish Research Centre for Magnetic Resonance (DRCMR).
- [3] Csaba Szántay Jr., *Anthropic Awareness: The Human Aspects of Scientific Thinking in NMR Spectroscopy and Mass Spectrometry*, 1st ed. Elsevier, June 2015, ISBN 978-0-12-419963-7, pp xxi+442.
- [4] Malcolm H. Levitt, *Spin dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, 2nd ed. John Wiley and Sons Ltd, March 2001, ISBN 978-0-470-51118-3, pp xxvi+724.
- [5] Rodolfo Grosso - Franco Simini, "Hot Points en Resonancia Magnética," September 2019, II Congreso Nacional de Biociencias.
- [6] —, "Magnetic Resonance Field Effect Spins in Living Tissue: a Delusive Points Analysis," Mars 2020, Congreso SABI 2020.
- [7] Lars G. Hanson, "Introduction to Magnetic Resonance Imaging Techniques," [http://eprints.drcmr.dk/37/1/MRI\\_English\\_a4.pdf](http://eprints.drcmr.dk/37/1/MRI_English_a4.pdf), pp. 1–48, August 2009, Danish Research Centre for Magnetic Resonance (DRCMR).

- [8] D. I. Hoult, "The Magnetic Resonance Myth of Radio Waves," *Concepts in Magnetic Resonance*, vol. 1, pp. 1–5, March 1989, Biomedical Engineering and Instrumentation Branch - National Institutes of Health, Bethesda.
- [9] Liang, Z.P. and Lauterbur, P.C., *Principles of Magnetic Resonance Imaging*, 1st ed. Wiley-IEEE Press, November 1999, ISBN 978-0-780-34723-6, pp +416.
- [10] Csaba. Szántay Jr., *Anthropic Awareness: The Human Aspects of Scientific Thinking in NMR Spectroscopy and Mass Spectrometry*, 1st ed. The address of the publisher: Elsevier, June 2015, ch. 3, pp. 141–172, ISBN 978-0-12-419963-7.
- [11] Paul Trofts, *Quantitative MRI of the brain: measuring changes caused by disease*, 1st ed. John Wiley and Sons Ltd., 2003, ISBN 0-470-84721-2, pp xvi+633.
- [12] Utah State University - Physics Department, "Microstates and Macrostates. Multiplicities. The Second Law." [http://www.physics.usu.edu/torre/3700\\_Spring\\_2015/Lectures/03.pdf](http://www.physics.usu.edu/torre/3700_Spring_2015/Lectures/03.pdf).
- [13] Frederick Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, revised ed. Waveland Press, 2009, ISBN 1-57766-612-7, 978-1-57766-612-7.



**Rodolfo Grosso** es Ingeniero Electricista egresado de la Universidad de la República (UR) de Uruguay. Ha sido docente de la carrera Ingeniería Eléctrica de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Católica del Uruguay y actualmente es docente en la carrera de Ingeniería Eléctrica de la Facultad de Ingeniería de la UR e integra el Núcleo de Ingeniería Biomédica de las Facultades de Ingeniería y Medicina.



**Franco Simini** es profesor de Ingeniería Biomédica e Informática Médica en la Universidad de la República (UR) de Uruguay, donde fundó en 1985 el "Núcleo de Ingeniería Biomédica", proyecto conjunto de Facultades de Medicina e Ingeniería. Activo en la transferencia de tecnología, Simini ha dirigido sobre 130 proyectos o tesis, ha creado 9 cursos de posgrado, escribió más de 200 publicaciones, 3 libros e inscribió 2 patentes. Fue fundador y miembro (2008-2013) del "Espacio Interdisciplinario" para fomentar la investigación interdisciplinaria en UR.

Simini es IEEE Senior Member y organizó el congreso de Ingeniería Biomédica SABI2020.