

Curso de Posgrado: Relajación magnética en sistemas de espines nucleares

Profesor: Ricardo Zamar

Programa

1. Teorías de relajación espín-red en RMN

a) Estados de espín y matriz densidad: Estados puros y mezclas estadísticas. La matriz densidad y sus propiedades básicas. Significado de la matriz densidad. Evolución temporal de una mezcla estadística. La ecuación de Liouville. Conceptos de superposición coherente y superposición incoherente de estados cuánticos. Coherencia cuántica múltiple en RMN.

b) Teoría cuántica de la relajación: Sistemas cuánticos abiertos. El sistema de espines nucleares interactuando con otros grados de libertad no observados. La matriz densidad reducida. Ecuaciones para la matriz densidad de sistemas disipativos. Condiciones de irreversibilidad. Procesos de Markoff. Funciones de correlación temporal. Aproximación secular. Ecuación maestra.

c) Formulación de Abragam de la ecuación maestra markoviana en forma de operadores: Límite de altas temperaturas. Discusión de la hipótesis clásica de reversibilidad microscópica y su relación con las hipótesis de alta temperatura y movimientos rápidos. Teorías de Bloch, Wangsness y Redfield.

d) Teoría de Hebel y Slichter de relajación espín-red, en la hipótesis de temperatura de espín. Generalización para sistemas con más de una temperatura de espín.

2. Aplicaciones de las teorías de relajación espín-red markovianas

a) Relajación Zeeman en líquidos debida a fluctuaciones del acople dipolar de espines iguales y distintos: Funciones de correlación de movimientos moleculares individuales (difusión rotacional y traslacional). Ejemplos de cálculos de densidades espectrales. Interpretación física de la densidad espectral.

b) Relajación Zeeman en cristales líquidos: Descripción elemental de las mesofases y propiedades de cristales líquidos. Modelo de relajación espín-red debida a fluctuaciones de orden en la fase nemática. Dependencia con la temperatura y la frecuencia de Larmor del tiempo de relajación.

c) Relajación del orden dipolar en sólidos y cristales líquidos nemáticos: secuencia de Jeener-Broekaert para la creación de estados de orden dipolar. Definición del tiempo de relajación del orden dipolar T_{1D} .

d) Aplicación al estudio de la relajación por reorientaciones de las moléculas de agua en las sales hidratadas gypsum y POHM. Aplicación a la relajación dipolar en cristales líquidos debida a fluctuaciones del orden nemático y reorientaciones moleculares individuales.

3. Teorías de la forma de la línea.

a) El caso adiabático. Teoría de Anderson-Weiss. Límites de movimientos rápidos y lentos.

b) El caso no adiabático. Ancho de línea y tiempo de relajación transversal. Caso general.

4. Introducción a la espectroscopía bidimensional

a) Principios básicos. Descripción de un experimento bidimensional típico. El experimento de tres pulsos con fases variables. Incremento de fase proporcional al tiempo (TPPI).

b) Espectroscopía de correlación bidimensional homonuclear (COSY) . Experimento de Jeener. Transferencia de coherencia.

c) Espectroscopía de correlación T_1 - T_2 . Aplicación al estudio de los mecanismos de difusión y relajación superficiales en materiales porosos.

Bibliografía:

K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications* (2nd Edition Plenum Press New York 2004).

H.P. Breuer and F. Petruccione *The Theory of Open Quantum Systems*, (Oxford University Press 2002).

A. Abragam *The Principles of NMR* (Oxford U.P. London 1961))

M. Goldman, *Quantum Description of High Resolution NMR in Liquids*, Clarendon, Oxford (1993).

M. H. Levitt, *Spin Dynamics, Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, J. Wiley & Sons, Ltd. (2001).

R.K. Harris, *Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy, a Physicochemical View*, Longman Scientific & Technical (1983).

C.P. Slichter, *Principles of Magnetic Resonance* (Springer-Verlag 1989).

R. Ernst, G. Bodenhausen and A. Wokaun, *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in one and two dimensions* (Clarendon Press, Oxford, 1989).

D. P. Weitekamp, *Advances in Magnetic Resonance* **11**, 111 (1983)

L.C. Hebel, *Solid State Physics*, **15**, 409 (1963)

J. Jeener, *Advances in Magnetic Resonance*, **3**, 205, (1968).

A. G. Redfield, *Advances in Magnetic Resonance*, **1**, 1, 1965.

R. Dong, *Nuclear Magnetic Resonance of liquid crystals* (Springer-Verlag, New York 1997)

Artículos recientes.