



PROGRAMA DE CURSO DE POSGRADO

TÍTULO: Relajación magnética nuclear en sistemas fuertemente correlacionados	
AÑO: 2012	CUATRIMESTRE: 1er
CARGA HORARIA: 60	No. DE CRÉDITOS: 3
CARRERA/S: Doctorado en Física	
DOCENTE ENCARGADO: Ricardo C. Zamar	

PROGRAMA

Teorías de relajación espín-red en RMN

Unidad I: 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.

Unidad II: 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 cuánticos abiertos. Decoherencia. Condiciones de irreversibilidad. Procesos de Markoff. Funciones de correlación temporal. Aproximación secular. Ecuación maestra.

Unidad III: 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. Implicancias de la aproximación de altas temperaturas con respecto a la naturaleza cuántica de la relajación, y su equivalencia con descripciones de la relajación de carácter estocástico. Teorías de Bloch, Wangsness y Redfield.

Unidad IV: Relajación bajo la hipótesis de temperatura de espín: Hipótesis de temperatura de espín en sólidos. Experimentos históricos. Descripción del proceso de demagnetización adiabática bajo la hipótesis de semi-equilibrio. Discusión de la validez de la hipótesis de semi-equilibrio. Críticas a la concepción que justifica el semi-equilibrio a través de procesos que ocurren en un sistema cerrado con un número grande de grados de libertad. Breve discusión de la relación del concepto de decoherencia con el semi-equilibrio. Combinación de la ecuación maestra en operadores y la hipótesis de temperatura de espín. Teoría de Hebel y Slichter. Generalización para sistemas con más de una temperatura de espín.



Aplicaciones de las teorías de relajación espín-red markovianas

Unidad V: Relajación Zeeman en líquidos debida a fluctuaciones del acople dipolar de espines iguales: Cálculo de T_1 y T_2 en función de densidades espectrales. Funciones de correlación de movimientos moleculares individuales: difusión rotacional y traslacional. Ejemplos de cálculos de densidades espectrales. Interpretación física de la densidad espectral. Interpretación física de los parámetros T_1 y T_2 , enfatizando la diferencia entre relajación y decoherencia. Contribuciones a T_2 de los procesos adiabáticos de "pure dephasing" y no-adiabáticos o "termalización".

Unidad VI: 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.

Unidad VII: Relajación del orden dipolar en sólidos y cristales líquidos nemáticos: secuencia de Jeener-Broekaert para la creación de estados de orden dipolar. Discusión detallada de todas las etapas del experimento siguiendo la evolución del operador densidad. Definición del tiempo de relajación del orden dipolar T_{1D} .

Unidad VIII: Aplicación de la relajación dipolar: 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. Modelo de pares débilmente interactuantes en sólidos hidratados. Descripción de los quasi-invariantes dipolares intrapar e interpar y singlete.

Unidad IX: Teorías de la forma de la línea: El caso adiabático. Teoría de Anderson-Weiss. Límites de movimientos rápidos y lentos. El caso no adiabático. Ancho de línea y tiempo de relajación transversal. Caso general. Forma de línea del espectro de coherencia simple y doble en sólidos hidratados bajo la aproximación de pares débilmente interactuantes. Cálculo del segundo momento de la FID.

Unidad X: Introducción a la espectroscopía bidimensional: Principios básicos. Descripción de un experimento bidimensional típico. El experimento de tres pulsos con fases variables. Incremento de fase proporcional al tiempo (TPPI). Espectroscopía de correlación bidimensional homonuclear (COSY). Experimento de Jeener. Transferencia de coherencia. Estudio de procesos de intercambio por espectroscopía 2D-NMR.

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 básicos y artículos recientes.

MODALIDAD DE LA EVALUACIÓN

- Entrega de ejercicios y problemas deber durante el curso.
- Coloquio final sobre todos los temas del programa.
- Sujeto a la aprobación del coloquio, el alumno preparará una exposición sobre un trabajo (o conjunto de trabajos) representativo de los contenidos del curso.