

## Resonancia Magnética Nuclear

### > Experimentos de RMN y modelado computacional de propiedades de transporte e interacciones líquido/superficie en medios porosos

Los sistemas porosos se encuentran ampliamente difundidos en la naturaleza y en aplicaciones tecnológicas por lo que resultan de gran interés científico y tecnológico. Entre los múltiples ejemplos podemos mencionar el hormigón, las piedras porosas, la madera, los suelos y tejidos biológicos, también en la industria alimenticia encontramos muchos ejemplos de interés. Un aspecto destacable de los materiales porosos es su gran área superficial, por lo que las aplicaciones tecnológicas tradicionales implican intercambio iónico, adsorción y catálisis. Por otro lado, los avances en las metodologías de síntesis que permiten tener un control sobre la arquitectura de los poros, posibilita la aplicación en nuevas y diversas áreas. Las aplicaciones mencionadas requieren, entre otras cosas, del conocimiento del transporte molecular dentro de las estructuras porosas, siendo la difusión una de las propiedades más relevantes y la RMN una técnica no invasiva y apropiada para determinarla. El confinamiento de líquidos dentro de materiales modifica el transporte molecular y en consecuencia la auto-difusión del solvente. En trabajos anteriores ya hemos avanzado en el estudio de alcanos confinados en sílica. Se realizaron cálculos ab initio que mostraron que para el caso de mesoporos de sílica la interacción entre alcanos, ya sean cíclicos o lineales, con la pared no es despreciable observándose una clara dependencia de la energía de adsorción tanto con la longitud como con la forma molecular. Estos resultados del cálculo sirven para la interpretación y diseño de nuevos experimentos de RMN. En este trabajo se propone avanzar con el estudio de distintos fluidos, confinados en distintos materiales mesoporosos combinando experimentos de RMN con cálculos numéricos.

>>> **Docente:** María Belén Franzoni – Correo: [belen.franzoni@unc.edu.ar](mailto:belen.franzoni@unc.edu.ar)

**Más información:**

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1387181121004418?via%3Dihub>

### > Coherencia cuántica y su medición por Resonancia Magnética Nuclear

La Resonancia Magnética Nuclear, RMN brinda una forma simple y elegante de controlar y medir nuevas interacciones en la cuántica. Por medio de experimentos y la teoría de Hamiltoniano promedio podemos crear nuevas interacciones, a partir de la interacción natural entre espines nucleares. Trabajaremos con experimentos de RMN y teoría para estudiar sistemas de no equilibrio cuánticos, y la propagación de interacciones en un conjunto de espines. El sistema a estudiar son los protones  $^1\text{H}$  de un sólido o semi sólido modelo (cristales líquido). Durante el trabajo final brindaremos las herramientas para que el alumno se familiarice con los experimentos de RMN que estudian dinámica cuántica, y también con la teoría de perturbaciones que se aplica en estos casos. El sistema y la interacción que proponemos no han sido estudiados hasta ahora por lo que los resultados serán novedosos. El problema también es factible de ser simulado numéricamente. Las especialidades que deberían cursar en estos casos serían: 1) Introducción a la Resonancia, 2) Teoría de Relaxaciones, o alguna otra que dicte el grupo de Resonancias. Publicaciones recientes, 1. Perturbation Independent Decay

of the Loschmidt Echo in a Many-Body System, C. M. Sánchez, A. K. Chattah, K. X. Wei, L. Buljubasich, P. Cappellaro, and H. M. Pastawski, *Physical Review Letters*, 124, 030601 (2020).  
2. Emergent decoherence induced by quantum chaos in a many-body system: A Loschmidt echo observation through NMR, C. M. Sánchez, A. K. Chattah, and H. M. Pastawski *Phys. Rev. A*, aceptado Marzo de 2022.

>>> **Docente:** Ana Karina Chattah – **Correo:** [karina.chattah@unc.edu.ar](mailto:karina.chattah@unc.edu.ar)  
**Más información:** <http://www.lanais.famaf.unc.edu.ar/publications/>

## > **Correlación cuántica en clusters de espines con interacción dipolar: Cristales Líquidos y Sólidos**

La RMN tanto desde la teoría como del experimento, brinda una vía directa para estudiar la dinámica de estados cuánticos de espines nucleares interactuantes. Además del potencial interés tecnológico, estos sistemas permiten también estudiar fenómenos físicos fundamentales tal como el surgimiento del comportamiento termodinámico irreversible a partir de la dinámica cuántica. En la literatura reciente, se vienen investigando propiedades cuánticas de sistemas de dos qubits en presencia de distintos tipos de ambientes, buscando caracterizar la correlación cuántica mediante distintas medidas como entrelazamiento, discord cuántico, coherencias, etc. El desafío actual es abordar sistemas de muchas partículas interactuantes. La inclusión de interacciones entre qubits es muy importante en las aplicaciones para aproximar casos reales. Recientemente se ha calculado la función de decoherencia de un arreglo de pares interactuantes tratados como sistema cuántico abierto a un baño de fonones. Los resultados teóricos obtenidos muestran coincidencia con los experimentos de RMN, ponen en evidencia que el comportamiento irreversible observado tiene su origen en el acople sistema-ambiente, y que el carácter cuántico y correlacionado de tal interacción es crucial para describir la dinámica del sistema observado. Se propone el cálculo de correlaciones cuánticas en sistemas de 8 espines que representan moléculas de cristales líquidos. En esta tarea se necesitará iniciarse en el estudio de algunas medidas de correlación cuántica, utilizar conceptos de matriz densidad y de reducción a diferentes subespacios, incluir algo de cálculo numérico y analítico. Partiremos de resultados obtenidos en el Trabajo Especial de Licenciatura de J.A. Taboada donde se estudió la dinámica del discord en pares de espines. Nos interesa caracterizar estados llamados de "cuasi-equilibrio" accesibles a los métodos de la RMN. Éstos pueden representarse por operadores densidad diagonales en bloques (en la base del Hamiltoniano de interacción spin-ambiente) y resultan de la evolución bajo decoherencia partiendo de diferentes estados iniciales de fuera del equilibrio. Los estados así formados tienen la particularidad de permanecer cuasi-estáticos durante tiempos largos (para las escalas de tiempo típicas de la RMN). Esta característica los hace interesantes tanto desde el punto de vista teórico, ya que constituyen cuasi constantes de movimiento, como de las potenciales aplicaciones.

>>> **Docente:** Ricardo C. Zamar – **Correo:** [ricardo.zamar@unc.edu.ar](mailto:ricardo.zamar@unc.edu.ar)

