



## PROGRAMA DE ASIGNATURA

<b>ASIGNATURA: Relajación magnética en sistemas de espines nucleares (Especialidad III de RMN)</b>	<b>AÑO: 2008</b>
<b>CARÁCTER:</b> Especialidad	
<b>DOCENTE ENCARGADO:</b> Zamar, Ricardo César	

### CONTENIDO

#### **Unidad I: Teorías de relajación espín-red en RMN**

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

b) Formulación de Abragam de la ecuación maestra markoviana en forma de operadores, en el límite de altas temperaturas. Discusión de la hipótesis clásica de reversibilidad microscópica y su relación con las hipótesis de alta temperatura y movimientos rápidos. Relación con las teorías de Bloch, Wangness y Redfield.

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

#### **Unidad II: 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 y densidades espectrales de movimientos moleculares individuales (rotaciones y traslaciones aleatorias).

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 cristales líquidos nemáticos: Dependencia con la temperatura de los tiempos de relajación de los órdenes *intra e inter*.

#### **Unidad III: Teorías de la forma de la línea en el caso de movimiento de los espines**

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.



#### **Unidad IV: Introducción a la decoherencia cuántica**

- a) La función decoherencia. Un modelo sistema-reservorio soluble exactamente. Sub-espacios coherentes y dependencia con el tamaño del sistema.
- b) Límite de la decoherencia cuántica adiabática.
- c) Selección dinámica de una base específica debido a la decoherencia inducida por el ambiente. Relajación de la coherencia y medición cuántica.

#### **Unidad V : Quasi-invariantes dipolares**

- a) Definición. Estados de semi-equilibrio en sistemas de espines nucleares. Quasi-invariantes en sólidos comunes y cristales hidratados (gypsum). Visión histórica basada en termodinámica de equilibrio de sistemas macroscópicos.
- b) Quasi-invariantes en cristales líquidos termotrópicos. Fenomenología. Discusión del concepto en sistemas de pocos grados de libertad. El rol de la decoherencia en el establecimiento del semi-equilibrio.
- c) Bases de operadores que generan el sub-espacio diagonal del Hamiltoniano de espín.
- d) Quasi-bases generadas a partir de las constantes de movimiento de energía.
- e) Comportamiento de los quasi-invariantes con el número N de espines del sistema.

#### **BIBLIOGRAFÍA**

- K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications* (2<sup>nd</sup> Edition Plenum Press New York 2004).
- A. Abragam *The Principles of NMR* (Oxford U.P. London 1961))
- H.P. Breuer and F. Petruccione *The theory of open quantum systems*, Oxford University Press (2002).
- 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).
- 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 varios.



## **EVALUACIÓN**

### **FORMAS DE EVALUACIÓN**

- Resolución de serie de problemas avanzados.
- Discusión y exposición de un conjunto de trabajos de la literatura contemporánea