

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

El control de la coherencia cuántica resulta relevante tanto para el desarrollo de la nanotecnología como para el procesamiento de información cuántica.

En la vida real, el sistema cuántico que deseamos controlar se encuentra inexorablemente expuesto a un ambiente con el que interactúa. Este ambiente degrada las coherencias del sistema en lo que llamaremos, un proceso de decoherencia.

El grupo con el que realicé este trabajo estudia experimental y teóricamente la decoherencia en sistemas de espines nucleares. Éstos son particularmente aptos debido a que su dinámica es relativamente lenta (interacciones del orden de pocos Hz o, a lo sumo, de los KHz), y la técnica de Resonancia Magnética Nuclear nos permite controlar en detalle las interacciones (reversiones temporales, Hamiltonianos Promedios, etc.) entre espines y de éstos con su ambiente.

En este trabajo vamos a estar interesados en el estudio de tiempos de decoherencia en sistemas magnéticos. De acuerdo a lo antes mencionado, el conocimiento de estos tiempos es una manera de extraer información de las dinámicas de espines que ocurren dentro de los sistemas que estamos estudiando. Nos llevan por lo tanto a la comprensión de mecanismos microscópicos que tienen, por ejemplo, como consecuencia la relajación de la muestra.

1.2. Antecedentes

En el año 2003 un grupo de investigadores en la universidad de Yale publicó un trabajo que llamó nuestra atención [1]. En dicho trabajo se buscaba entender en detalle la dinámica de espines en materiales semiconductores en aras de implementar la computación cuántica en sólidos.

El sistema particular que caracterizaron fue silicio, por lo tanto uno de los parámetros que debían conocer era el tiempo de decoherencia espín-espín, T_2 , del ^{29}Si .

Para esto realizaron una serie de mediciones de RMN. Aplicaron a la muestra las secuencias de pulsos usuales para conocer T_2 , la secuencia del eco de Hahn,

la secuencia de Carr-Purcell (CP) y la secuencia de Carr-Purcell-Meiboom-Gill (CPMG). Sus resultados mostraron hechos no esperados en el decaimiento de ecos de espín, aparentemente nuevos en NMR.

En dichas muestras observaron que los ecos de espín propios de la secuencia de Carr-Purcell-Meiboom-Gill, persisten más allá del decaimiento predicho por la secuencia de Eco de Hahn, utilizada en RMN para refocalizar inhomogeneidades de campo y observar tiempos de decoherencia intrínseca.

Las largas colas en los experimentos de CPMG, observadas generalmente en muestras líquidas que presentan difusión molecular, son extrañas para una muestra sólida en donde la interacción predominante es el acoplamiento dipolar entre los espines nucleares. En este caso, la secuencia de CPMG no es capaz de revertir la interacción dipolar homonuclear y no explica en forma directa la persistencia de la señal de RMN de ese experimento.

Un dato importante es que el silicio es un sistema magnéticamente diluido, su isótopo magnético, ^{29}Si , tiene una abundancia natural del 4,67 %.

1.3. Nuestro Trabajo

Pensando en la dilución magnética del silicio como uno de los orígenes de estos comportamientos inesperados, decidimos realizar el mismo tipo de experimentos en otros sistemas magnéticamente diluidos, ver si se repiten estos comportamientos extraños y si se pueden asociar con esta característica de la muestra.

Estos hechos nunca fueron observados en sistemas magnéticamente concentrados (ej en ^1H en muestras de sólidos orgánicos) en nuestro laboratorio ni en otros.

El sistema que elegimos para realizar las mediciones de resonancia magnética nuclear en nuestro laboratorio es una muestra policristalina de C_{60} , con el fin de observar el comportamiento de la señal de ^{13}C (abundancia natural del 1,1 %).

Es interesante destacar que se han presentado varias propuestas [2, 3] en las cuales se busca usar a la molécula de C_{60} para hacer computación cuántica. En estos trabajos se utiliza a la molécula para atrapar átomos que tengan espín nuclear o electrónico. Las moléculas de C_{60} se utilizan como contenedores para poder construir un arreglo de estos espines, de los cuales se quiere obtener la información.

En nuestro trabajo repetimos los mismos experimentos que se habían hecho en silicio, y obtuvimos comportamientos similares (anómalos). Luego, para poder seguir adelante con nuestra investigación y entender la causa de estos comportamientos, hicimos otros experimentos modificando lógicamente las secuencias de pulsos de RMN. Obtuvimos nuevas sorpresas que nos brindaron elementos importantes para la comprensión de lo que está ocurriendo, en estos sistemas diluidos.

Como dijo P.W.Anderson refiriéndose a los sistemas aleatorios [4, 5], es importante tener en cuenta que ningún átomo real es un promedio, ni ningún experimento es realizado en un ensamble de muestras. Lo que realmente necesitamos conocer es la distribución de probabilidad (en nuestro caso de energías

Zeeman y acoplamientos dipolares) y *no* su promedio.

Como se verá en las conclusiones, los comportamientos anómalos observados, luego de una serie de experimentos ad hoc, pueden entenderse en base a esta idea.

1.4. Organización del Trabajo

En el primer capítulo presentamos las motivaciones y los antecedentes.

En el segundo capítulo haremos una revisión de los conceptos necesarios para comprender y utilizar la técnica de RMN. Veremos una serie de mediciones simples que son imprescindibles para la realización de los experimentos de nuestro interés: experimentos de nutación, medición del tiempo de relajación espín red, etc.

En el tercer capítulo, se explican las secuencias que se utilizan para medir el tiempo de relajación espín-espín. Se detallan los experimentos realizados con el fin de medir T_2 , y los resultados obtenidos con las secuencias de Hahn, Carr Purcell y Carr-Purcell-Meiboom-Gill.

En el cuarto capítulo se realizan simulaciones de segundo momento dipolar como primer intento de explicar los comportamientos que se obtienen en los experimentos. En estas simulaciones se introduce como parte del cálculo la dilución que nos lleva a una distribución no homogénea de acoplamientos dipolares.

En el quinto capítulo se muestra otro tipo de experimentos destinados a caracterizar los ecos estimulados que subyacían en las secuencias de CP y CPMG. Utilizando la teoría del formalismo de super operadores, obtuvimos algunos resultados teóricos sobre los ecos estimulados.

En el sexto capítulo se detalla una nueva simulación numérica que realizamos basados en información que se encuentra disponible, aunque no directamente, en los datos experimentales. Esta simulación nos da resultados muy interesantes para nuestro objetivo de explicar los comportamientos extraños observados.

En el séptimo capítulo se dan las conclusiones a las que llegamos luego de haber estudiado experimental y teóricamente los tiempos de relajación espín-espín en C_{60} .

Finalmente se agregaron un apéndice donde se introduce formalmente la teoría de superoperadores en el espacio de Liouville, y dos apéndices mas en los que se muestran las simulaciones numéricas y los programas que desarrollamos para realizar las mediciones en el espectrómetro.