

Manifestación del Fenómeno de Localización en
Experimentos de RMN en Sistemas de Espines
Nucleares Diluidos

María Belén Franzoni

Directora: Dra. Patricia R. Levstein

Palabras clave: RMN; decoherencia; Ecos estimulados; Localización

76.60-k Nuclear Magnetic Resonance and relaxation. 76.60-Lz Spin Echoes
33.25+k Nuclear Resonance and relaxation
82.56 b Nuclear Magnetic Resonance. 82.56.Jn Pulse sequences in NMR

Resumen

El desarrollo de la nanociencia requiere de un riguroso control de la coherencia cuántica y del conocimiento de los procesos que llevan a su pérdida: “la decoherencia”.

En este trabajo se investigó el tiempo de decoherencia espín-espín del ^{13}C en C_{60} policristalino utilizando varias secuencias de pulsos de Resonancia Magnética Nuclear.

Se obtuvieron resultados inesperados en algunas secuencias, tales como decaimientos muy lentos (≈ 1 seg) de la magnetización con respecto al decaimiento del Eco de Hahn ($T_{2EH} \approx 15\text{ms}$). En éstas, se observaron ecos estimulados que según cálculos analíticos no deben formarse. Su presencia en sistemas diluidos puede explicarse por inhomogeneidades del campo de RF no promediadas por la dinámica de flip-flop. Interferencias constructivas de estos ecos con el eco de Hahn explican el origen de los decaimientos lentos, evidenciando el fenómeno de localización o ausencia de difusión de espines.

Agradecimientos

Quiero agradecerles a mi mamá y a mi papá por haber estado siempre conmigo, respetado mis tiempos y haber hecho todo para que hoy logre terminar esta etapa. A mis hermanos (María José y Ale), quienes también estuvieron siempre conmigo, sufrieron mi: *yo tengo que estudiar* y, renegando un poco, me cubrieron. A mi familia *grande* (abuelos, tías, tíos y todos mis primos); a Lucas; a Marta y a Francisco, por estar siempre pendientes y dispuestos.

A Fede por haber compartido conmigo (y haberme sufrido) todo este tiempo, finalmente lo logramos!!

A Patricia por la paciencia y buena onda, por la dedicación que me brindó en todo este tiempo, por estar siempre dispuesta a enseñarme nuevas cosas. A Horacio, mi director de seminario, por transmitirme sus conocimientos.

A todos los profes.

A la gente del Lanais quienes me hicieron sentir muy cómoda durante todo este tiempo de trabajo, siempre dispuestos a dar una mano si hace falta. A Karina que me prestó su oficina y a Omar que me dejó invadírsela.

A las chicas de la biblioteca y a la gente del despacho de alumnos que nos entienden, nos perdonan (algún olvido) y nos ayudan.

A la Yami y a Hernán, mis compañeritos de este último año.

A las *chicas* (Aldi, Mari, Yami) por haber estado desde el principio, siempre dispuestas a que nos tomemos unos mates y charlemos mucho. A todos mis amigos, compañeros de los buenos, compañeros de asados, por compartir conmigo todo este tiempo.

Abreviaturas

CPSAF	<i>Secuencia de Carr-Purcell sin alternar fases.</i>
CPAF2	<i>Secuencia de Carr-Purcell alternando fases, ciclos de dos fases.</i>
CPAF4	<i>Secuencia de Carr-Purcell alternando fases, ciclos de cuatro fases.</i>
FID	<i>free induction decay</i>
MGSAF	<i>Secuencia de Carr-Purcell-Meiboom-Gill sin alternar fases.</i>
MGAF2	<i>Secuencia de Carr-Purcell-Meiboom-Gill alternando fases, ciclos de dos fases.</i>
MGAF4	<i>Secuencia de Carr-Purcell-Meiboom-Gill alternando fases, ciclos de cuatro fases.</i>
rf	<i>radio frecuencia</i>
RMN	<i>Resonancia Magnética Nuclear</i>

Índice general

Resumen	II
Agradecimientos	III
Abreviaturas	IV
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Antecedentes	1
1.3. Nuestro Trabajo	2
1.4. Organización del Trabajo	3
2. Técnica de RMN y Sistema a estudiar	4
2.1. Resonancia Magnética Nuclear	4
2.1.1. Elementos básicos	4
2.1.2. Espines no interactuantes en presencia de un campo ex- terno. Visión clásica	6
2.1.3. El uso de la terna rotante	6
2.1.4. El campo de rf	8
2.1.5. Creación de pulsos	8
2.1.6. ¿Cómo determinamos el ángulo de volteo? Experimento de nutación.	9
2.2. Tiempos de relajación	9
2.2.1. Ecuaciones de Bloch	10
2.2.2. Medición de T_1	11
2.2.3. Secuencia del estado estacionario, basada en saturación y recuperación. (Steady state sequence)	12
2.3. Un poco de formalismo	12
2.3.1. El operador densidad	12
2.3.2. El sistema rotante	14
2.3.3. Los Pulsos	15
2.4. El Hamiltoniano Dipolar	15
2.5. El Sistema: C_{60} . (Buckminster fullereno)	17
3. Tiempo de relajación espín-espín T_2	19
3.1. Las secuencias utilizadas	19
3.1.1. La FID, T_2^*	19

3.1.2.	Eco de Hahn	20
3.1.3.	La secuencia de Carr-Purcell	22
3.1.4.	Pulsos Imperfectos	24
3.1.5.	La secuencia de Carr-Purcell-Meiboom-Gill	24
3.2.	Los experimentos	24
3.2.1.	La FID	25
3.2.2.	El eco de Hahn	26
3.2.3.	Secuencia Carr-Purcell	28
3.2.4.	Secuencia de Carr Purcell Meiboom Gill	31
3.2.5.	Comparación entre las secuencias	33
3.2.6.	Comportamientos par-impar	36
3.3.	Comentarios Finales	37
4.	Cálculos de momentos	39
4.1.	Momentos de las líneas de resonancia	39
4.1.1.	La aproximación de Van Vleck	40
4.1.2.	Expresión para el segundo momento	40
4.2.	Cálculos numéricos	41
4.2.1.	Simulación de la red y sus sitios magnéticos	41
4.2.2.	Vecinos magnéticos, Segundo Momento	41
4.3.	Aproximación de espines distintos	44
4.4.	Comentarios Finales	45
5.	Ecoss Estimulados	47
5.1.	El eco estimulado genuino	47
5.1.1.	Cálculo de la función respuesta	50
5.2.	Nuevos Experimentos	54
5.2.1.	Interferencias entre el eco normal y el estimulado	55
5.2.2.	Decaimiento del eco estimulado	56
5.2.3.	¿Comportamiento par-impar?	58
5.2.4.	Amplitud del eco estimulado	59
5.2.5.	Secuencias con pulsos distintos de π	61
5.3.	Comentarios Finales	62
6.	Sitios distintos, pulsos distintos	64
6.1.	Nuestra hipótesis	65
6.2.	La simulación	66
6.3.	Comentarios Finales	70
7.	Conclusiones	71
A.	El formalismo de superoperadores	73
A.1.	El Espacio de Hilbert	73
A.2.	El Espacio de Liouville	73
A.2.1.	Superoperadores de Espín	74
A.2.2.	Superoperadores de Proyección	74
A.2.3.	Los Superpropagadores	75

A.2.4. Superpropagadores para representar pulsos de rf	76
A.2.5. Operadores para representar secuencias de pulsos	76
A.2.6. Función Respuesta:	77
B. Simulaciones numéricas	78
B.1. Simulaciones utilizadas en el capítulo 4	78
B.1.1. Segundos momentos locales C_{60}	78
B.1.2. Aproximación de espines distintos	81
B.2. Simulación utilizada en el capítulo 6	84
C. Programas de medición	90