



*1821 Universidad de Buenos Aires*

## **Resolución Consejo Directivo**

**Número:**

**Referencia:** EX-2022-05820566- -UBA-DMESA#FCEN posgrado Fundamentos de Magnetismo Molecular Enfocados a Compuestos de Coordinación sesión 31/10/2022

---

**VISTO:**

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado Fundamentos de Magnetismo Molecular Enfocados a Compuestos de Coordinación,

**CONSIDERANDO:**

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada en el día 31 de octubre de 2022,

en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD**

**DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES**

**RESUELVE:**

**ARTÍCULO 1°:** Aprobar de nuevo curso de posgrado Fundamentos de Magnetismo Molecular Enfocados a Compuestos de Coordinación de 60 horas de duración, que será dictado por el Dr. Pablo Albores.

**ARTÍCULO 2°:** Aprobar el programa del curso de posgrado Aspectos Estructurales y Fisicoquímicos del ADN que como anexo forma parte de la presente Resolución, para su dictado en el primer cuatrimestre de 2023.

**ARTÍCULO 3°:** Aprobar un puntaje máximo de tres (3) punto para la Carrera del Doctorado.

**ARTÍCULO 4°:** Establecer que el presente curso no será arancelado (CATEGORÍA 1).

**ARTÍCULO 5°:** Disponer que de no mediar modificaciones en el programa, la carga horaria y el arancel, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

**ARTÍCULO 6°:** Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Dirección de Movimiento de Fondos, a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido, pase QINORGANICA#FCEN y resérvese.

## ANEXO

### Programa

#### FUNDAMENTOS DE MAGNETISMO MOLECULAR ENFOCADOS A COMPUESTOS DE COORDINACIÓN

##### (a) Magnetismo – Generalidades

Momento magnético y momento angular- Factor g- Intensidad de campo magnético e inducción magnética-Magnetización y susceptibilidad magnética- Unidades en magnetismo.

##### (b) Magnetismo Molecular. El Hamiltoniano de spin (HS)

Formulación. Elementos de matriz y autoestados del HS. El origen físico de los parámetros del HS: funciones de onda de muchos electrones y Hamiltonianos efectivos.

##### (c) Sistemas de spin aislados

Componente paramagnética y diamagnética. Sistemas paramagnéticos simples: centros aislados sin momento angular orbital. Interacción de Zeeman y Ley de Curie. Funciones de Brillouin. Implementación numérica del HS, cálculo de la magnetización y susceptibilidad de muestras orientadas y/o promediadas. Simulaciones y ajustes de datos experimentales.

##### (d) Acoplamiento spin-órbita y ZFS

Acoplamiento spin-órbita y simetría. Desdoblamiento de campo nulo (ZFS), aproximación fenomenológica: componentes axial y rómbica del ZFS. Estructura electrónica de compuestos de coordinación y magnetismo: metales 3d. Relación entre la configuración electrónica y parámetros del HS. Momento angular orbital no quencheado. Lantánidos(4f). Orbitales f. Momento angular total J. Factor g- fórmula de Landé. Simetría esférica y efecto del entorno de ligandos: descenso de simetría.

(e) Interacción entre espines

Interacción de Intercambio. Acoplamiento ferro y antiferromagnético en sistemas binucleares. HDvV (Hamiltoniano de Heisenberg, Dirac y Van Vleck), coeficientes de Clebsch-Gordan y proyección de propiedades de los espines individuales en el sistema acoplado. Interpretación física y orbitalaria del HDvV. Interacción de Intercambio en compuestos de mayor nuclearidad. Aproximación del Hamiltoniano de Spin Gigante.

(f) Breve introducción a técnicas instrumentales de caracterización magnética básica

Magnetómetro de muestra vibrante. SQUID. Susceptibilidad en campos alternantes. Preparación de muestra. Resonancia Paramagnética Electrónica. El espectrómetro de EPR, principios - El espectro de EPR en sistemas de dos niveles. Anisotropía del Factor g y orientación. ZFS, espectros a altas y bajas temperaturas- Espectros en solución y de polvo. Interacción hiperfina. EPR de alta frecuencia.

(g) Magnetos de molécula única (SMM). Dinámica de la magnetización.

Relajación de la magnetización. Procesos térmicamente activados. Modelo de Debye. Mecanismos de relajación (Orbach, Raman, Directo). Tuneleo de la magnetización. Técnicas experimentales para caracterizar SMM. Susceptibilidad AC. Ajuste de datos y obtención de tiempos característicos de relajación.

Bibliografía

- Molecular Magnetism; Olivier Kahn, WileyVCH , 1993.
- The Physical Principles of Magnetism-Allan H. Morrish-Wiley-IEEE Press, 2001.
- Molecular Nanomagnets, Dante Gatteschi, Roberta Sessoli, Jacques Villain, Oxford, 2006.
- Electron Paramagnetic Resonance\_ A Practitioners Toolkit-Marina Brustolon, Elio Giamello – Wiley, 2009.
- Introduction to Molecular Magnetism. From transition metals to lanthanides; Benelli, C.: Gatteschi, D., Wiley VCH, 2015.

