

23/1  
1981

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analíticas y Química Física.

ASIGNATURA: Seminario de Resonancia Paramagnética (aplicada al estudio de catalizadores).

CARRERA: Post-Grado

ORIENTACION: Química Física, Química Orgánica e Inorgánica.

PLAN:

DURACION DE LA MATERIA: Cuarenta y cinco (45) días.

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 4 hs. b) Problemas 2 hs. c) Laboratorio-hs. (semanales) d) Seminarios ---hs. e) Totales 6 horas.-

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química Física (II).-

### PROGRAMA

- 1.- Propiedades magnéticas del electrón. Resonancia del spin electrónico en un campo magnético externo. Absorción de energía de un campo de microondas. El factor espectroscópico  $g$ ; su interpretación. Efecto del campo cristalino sobre los niveles de energía del electrón. Distorsión de Jahn-Teller. Iones paramagnéticos en campos cristalinos de distinta magnitud y simetría. Caso general de radicales libres.-
- 2.- El Hamiltoniano de spin para el campo cristalino. Estructura fina del espectro RSE. La separación de los niveles de energía electrónicos en ausencia y presencia de campo magnético externo: ejemplos. El Hamiltoniano de spin de la interacción hiperfina isotrópica; aproximaciones en campo magnético alto. Interpretación de las constantes de acoplamiento hiperfino isotrópico.-
- 3.- El Hamiltoniano de spin de la interacción hiperfina anisotrópica. Interpretación de las constantes de acoplamiento hiperfino anisotrópico. Efectos de segundo orden. Variación de las intensidades relativas y separación hiperfina de las líneas de resonancia con la magnitud y la orientación del campo magnético externo. Casos de diversos iones paramagnéticos. Interacciones nucleares cuadri polares.-
- 4.- Procesos de relajación y anchos de línea. Susceptibilidades magnéticas de Bloch. Interacciones del spin electrónico con otros spins: efectos sobre el ancho de línea. Interacciones de intercambio. Relajación spin-red: sus mecanismos. El ancho de línea en líquidos: tiempos de correlación. Efectos de la modulación de movimiento. Modelo microcristalino para iones en solución. Saturación de los niveles de energía.-
- 5.- Características básicas de los espectrómetros RSE. Componentes de microondas. Cavidad de resonancia. Esquema general de un espectrómetro RSE. Mediciones de diversos parámetros espectrales: frecuencia, campo magnético, potencia de microondas, factor  $g$  en só

lidos amorfos o policristalinos y en monocrystallos, separación hiperfina nuclear en solución y en monocrystallos, concentración efectiva de spines.-

VI.- Aplicaciones. Análisis espectral de algunos compuestos que contienen metales paramagnéticos: porfirinas de cobre y de vanadilo. Iones paramagnéticos en solución adsorbidos por sólidos.- Casos de resinas intercambiadoras de iones.-

VII.- Sólidos que funcionan como catalizadores. Mecanismo de adcción química. Espectros ESR de cromo adsorbido en alúmina. Posibilidades en otros tipos de catalizadores. Carbonos portadores: efecto de las condiciones del tratamiento térmico en el ancho de líneas ESR.-

#### BIBLIOGRAFIA

- 1.- "Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions", A. Abragam and B. Bleaney, Oxford University Press, 1969.-
- 2.- "Electron Paramagnetic Resonance and Introduction to Transition Group Ions in Crystals", J. W. Orton, London Iliffe Books, 1968.-
- 3.- "Electron Spin Resonance in Transition Metal Ions", R. Rubina, (Hilger Monographs on ESR), Adam Hilger, London 1969.-
- 4.- "Electron Spin Resonance in Chemistry", P. B .Ayscough, Methuen, London 1967.-

Fecha: 10/MAR/1981.-

Firma del Profesor:

Firma del Director:

Aclaración de firma: Hilda PEZZANO Aclaración de firma: ALBINATI

ROSSIDONI de ALBINATI  
DIRECTORA DEL DPTO. DE  
QUÍMICA INORGÁNICA ANALÍTICA  
Y QUÍMICA - FÍSICA

Aprobado por Resolución CA 488/81