

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Resonancia Paramagnética (Seminario)

CARRERA: Post-grado - Doctorado

ORIENTACION: Qca. Física
Qca. Orgánica y
Qca. Inorgánica

CARACTER: Optativa

DURACION DE LA MATERIA: 5 semanas

PLAN:.-.

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 20hs. b) Problemas -.-

c) Laboratorio 10hs. d) Seminario -.- e) Total 30hs.

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 de 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 electrónica 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 cuadrupolares.
- 4.- Procesos de relajación y anchos de línea. Susceptibilidades magnéticas de Bloch. Interacciones del spin electrónico con otros spines: 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 sólidos amorfos o policristalinos y en monocristales, separación hiperfina nuclear en solución y en monocristales, concentración efectiva de spines.
- 6.- Aplicaciones. Análisis espectral de algunos compuestos que contienen metales paramagnéticos: porfirinas de cobre y de vanadio. Iones paramagnéticos en solución absorbidos por sólidos. Casos de

resinas intercambiadoras de iones.

- 7.- Sólidos que funcionan como catalizadores. Mecanismo de adsorción química. Espectros ESR de cromo adsorbido en alúmina. Posibilidades en otros tipos de catalizadores. Carbones porosos: efecto de las condiciones del tratamiento térmico en el ancho de línea ESR.

BIBLIOGRAFIA

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

Fecha: Junio 1982.-

Firma del Profesor:

aclaración firma : Dra. H. Pezzano

Firma del Director:

aclaración firma : U. F. POSSIDONI de ALBINATI

DIRECTORA DEL OPTO. DE
QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA - FISICA

Aprobado por Resolución CA 560/82