



4

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

---

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas  
Doctorado en Ciencias Físicas

CUATRIMESTRE: Primero

AÑO: 2011

CODIGO DE CARRERA: 51, 52

MATERIA: **Magnetismo Molecular - Fundamentos y Aplicaciones**

CODIGO: nuevo

PUNTAJE: 5 (cinco)

PLAN DE ESTUDIO: -----

CARÁCTER DE LA MATERIA: -----

DURACIÓN: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- Teóricas-Prácticas: 8hs.

TOTAL: 8hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 128hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Lic. en Cs. Químicas, Cs. Físicas o carreras afines.

FORMA DE EVALUACIÓN: Examen escrito para evaluación del módulo I. Seminario final para aprobación del módulo II. Promocional con calificación mayor que 7.

PROGRAMA ANALÍTICO:

Módulo I

(a) Magnetismo – Generalidades

Campos magnéticos y fuerzas. Dipolos magnéticos. Unidades habituales utilizadas en electromagnetismo.

(b) Herramientas de la mecánica cuántica.

Nociones de espacios vectoriales. Espacio de estados. Operadores lineales. Operadores

MMFyA - 1/3

Dr. DARIO ESTRIN  
SECRETARIO ACADEMICO  
POSGRADO - DQIAYQF  
FCEN



## FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

---

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

hermíticos y observables. Autoestados y autovalores. Conmutadores. Sistemas de dos niveles. Matrices de Pauli. Algebra del momento angular. Propiedades. Partícula en un potencial central. Sistemas hidrogenoides. Espin electrónico. Adición de momentos angulares. Coeficientes de Clebsch-Gordan. Interacción de una partícula con la radiación electromagnética.

(c) Magnetismo Molecular. Sistemas aislados

Magnetización y susceptibilidad magnética. Componente paramagnética y diamagnética. Ecuación de Van Vleck. Paramagnetismo independiente de la temperatura. Sistemas paramagnéticos simples: centros aislados sin momento angular orbital. Interacción de Zeeman y Ley de Curie. Funciones de Brillouin. Desdoblamiento de campo nulo (ZFS), aproximación fenomenológica: componentes axial y rómbica del ZFS. Centros aislados con estado fundamental degenerado electrónicamente. Casos de estudio: comportamiento magnético de iones complejos octaédricos con configuración  $d^1$  y  $d^7$ . Sistemas del bloque f.

(d) Magnetismo molecular. Interacciones entre dos espines

Interacción de Intercambio. Acoplamiento ferro y antiferromagnético en sistemas binucleares. HS, coeficientes de Clebsch-Gordan y proyección de propiedades de los espines individuales en el sistema acoplado. Presencia de desdoblamiento de campo nulo local y/o interacción anisotrópica y sus proyecciones en el sistema acoplado.

---

### Módulo II

Estructura Electrónica de Iones Complejos

El Hamiltoniano de Campo Cristalino: Términos espectroscópicos, aproximaciones de campo fuerte y débil. Elementos de matriz y diagramas de Tanabe-Sugano para sitios octaédricos. Distorsión axial y rómbica, sistemas de spin intermedio. Acoplamiento spin-órbita. Teoría de Campo-Ligando y covalencia. Relación entre la configuración electrónica de iones complejos y parámetros del HS. Casos de estudio.

El Hamiltoniano de spin

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

Instrumentación I

Métodos de Gouy y Faraday, fundamentos, calibración y fuentes de error. Magnetómetro de muestra vibrante. SQUID. Susceptibilidad en campos alternantes. Preparación de muestra.

MMFyA - 2/3

Dr. DARIO ESTRIN  
SECRETARIO ACADEMICO  
POSGRADO - DQIAYQF  
FCEN



## FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

### Resonancia Paramagnética Electrónica – Introducción

El espectro de EPR en sistemas de dos niveles. Anisotropía del Factor  $g$  y orientación. Espectros en solución y de polvo. Interacción hiperfina. Sistemas de alto spin y ZFS:  $g_{\text{eff}}$  y rombogramas. Técnicas de simulación: intensidad y ancho de línea. Casos de estudio.

### Instrumentación II

El espectrómetro de EPR, principios. Técnicas de modulación. Sensibilidad. Cavidades resonantes. Selección de la frecuencia de operación. Espectros a altas y bajas temperaturas.

Magnetismo molecular. Interacción entre espines en sistemas de mayor nuclearidad. Interacción de Intercambio en compuestos trinucleares. Frustración de espín. Extensión a sistemas de mayor nuclearidad. Clusters. EPR de alta frecuencia. Sistemas infinitos 1D y 2D. Magnetos de una sola molécula y de una sola cadena. Casos de estudio.

### Bibliografía

- Earnshaw, A.; Introduction to Magnetochemistry. Academic Press, 1968.
- Olivier Kahn; Molecular Magnetism. VCH Publishers, 1993.
- Carlin, R. L.; Magnetochemistry. Springer-Verlag, 1986.
- Pilbrow, J. R.; Transition Ion Electron Paramagnetic Resonance. Clarendon Press, 1990.
- Gerloch, M; Magnetism and Ligand Field Analysis. Cambridge University Press, 1983.
- Balhausen, C. J.; Introduction to Ligand Field Theory. McGraw-Hill, 1962
- Griffith, J. S.; The Theory of Transition-Metal Ions. Cambridge University Press, 1961.
- Bencini, A.; Gatteschi, D.; Electron Paramagnetic Resonance of Exchange Coupled Systems. Springer-Verlag, 1990.
- Solomon, E. I.; Lever, A. B. P.; Inorganic Electronic Structure and Spectroscopy. J. Wiley & Sons, 1999.
- Que Jr., L.; Physical Methods in Bioinorganic Chemistry. University Science Books, 2000.

MMFyA - 3/3

Dr. DARIO ESTRIN  
SECRETARIO ACADEMICO  
POSGRADO - DQIAyQF  
FCEN



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 499.475/2011

Buenos Aires,

23 MAY 2011

VISTO:

la nota presentada por el Dr. Darío Estrín Secretario Académico del Departamento de QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA mediante la cual eleva la información y el programa del curso de posgrado **MAGNETISMO MOLECULAR – FUNDAMENTOS Y APLICACIONES**, que se dictará en el primer Cuatrimestre del 2011 (a partir del 21/03/2011) en el Departamento de QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA a cargo del Dr. Leonardo Slep (DQIA y QF – INQUIMAE)

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado el 03/05/2011  
lo actuado por la Comisión de Enseñanza, Programas, Planes de Estudio y Posgrado,  
lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,  
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
**RESUELVE:**

Artículo 1°: Autorizar el dictado del curso de posgrado **MAGNETISMO MOLECULAR – FUNDAMENTOS Y APLICACIONES** de 128 hs. de duración.

Artículo 2°: Aprobar el programa del Curso de Posgrado **MAGNETISMO MOLECULAR – FUNDAMENTOS Y APLICACIONES** (obrante a fs 3 - 5) del expediente de la referencia.

Artículo 3°: Aprobar un puntaje máximo de cinco (5) puntos para la Carrera de Doctorado.

Artículo 4°: Aprobar un arancel de 20 Módulos. Disponer que los montos recaudados sean utilizados conforme a lo dispuesto por Resolución CD N° 072/03.

Artículo 5°: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Subsecretaría de Posgrado con fotocopia del programa (fs 3- 5) incluida, Comuníquese a la Dirección de Alumnos (sin fotocopia del Programa). Cumplido, archívese.

- 1113 -

Resolución CD N° \_\_\_\_\_  
SP/med / 03/05/2011

  
Dr. JAVIER LÓPEZ DE CASENAVE  
SECRETARIO ACADEMICO

  
Dr. JORGE ALIAGA  
DECANO