



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

Ciudad Autónoma de Buenos Aires, diciembre 2012

Señor Secretario/a Académico/a
de la Facultad de Ciencias
Exactas y Naturales
S/D

Tengo el agrado de dirigirme al señor Secretario Académico a efectos de comunicarle el desarrollo del curso de post-grado y/o doctorado que se dictará en este Departamento durante el ..1er..... cuatrimestre de 2013.

1- Denominación del Curso: **Magnetismo Molecular – Fundamentos y Aplicaciones**

1a- Carácter del Curso:

(para Doctorado: ampliar conocimientos, actualización, extensión profesional)

2- Fecha de iniciación: 18/03/2013

3- A dictarse en: **Depto. de Qca. Inorgánica, Analítica y Qca. Física**

4- Responsable (s): Dr. Leonardo D. Slep

(si no revistan en la Facultad, adjuntar nota solicitando la autorización pertinente, la que comprenderá el dictado del Curso y la firma de las Actas de Examen pertinentes).

(Además agregar curriculum vitae resumido, debidamente firmado por el Director de Departamento o por el interesado).

5- Cantidad de horas semanales: 128hs totales.

5a- Nro. de horas semanales de clases teórico-prácticas: 8hs

5b- Nro. de horas semanales de clases de problemas: ---

5c- Nro. de horas semanales de seminarios: ---

6- Condiciones de ingreso: Lic. en Cs. Químicas, Cs. Físicas o carreras afines.

7- Nro. de alumnos (mínimo y máximo): 3-20

8- Forma de evaluación: Examen escrito para evaluación del módulo I. Seminario final para aprobación del módulo II. Promocional con calificación mayor que 7.

8a- Certificado de aprobación: ~~SI-NO~~ (tachar lo que no corresponda)

9- Puntaje propuesto de acuerdo con el carácter del curso: 5 (cinco)

10- Nro. de código: 5146

11- Se acompaña despacho de la Sub-Comisión Departamental con Vº. Bº. del Director de Departamento.

12- Se propone un arancel de ...20.....módulos, teniendo en cuenta como base el valor de \$(el que rija en ese momento).

SUBCOMISIÓN DE DOCTORADO

Dr. ERNESTO J. MARCECA
SECRETARIO TÉCNICO
y DE PLANIFICACIÓN
D. Q. I. A. y Q. F.



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

CARRERA: Doctorado / Posgrado

CUATRIMESTRE: Primero

AÑO: 2013

CODIGO DE CARRERA: 51, 52

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

CODIGO: 5146

PUNTAJE: 5 (cinco)

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:

Objetivos:

El campo del magnetismo molecular fundado como tal en los años 80', ha resurgido con mucha fuerza en los últimos 20 años fundamentalmente a partir del descubrimiento de los magnetos de molécula única. Al día de la fecha este campo ha cobrado un gran desarrollo dentro de la nanotecnología, la spintrónica y la computación cuántica. La inclusión de esta asignatura viene a cubrir una vacante notoria dentro de la química moderna y en particular de la química de coordinación.

Al finalizar el curso los alumnos deberán ser capaces de reconocer y resolver problemas de magnetismo molecular de mediana complejidad. En particular, deberán ser capaces de:

- Describir el origen de las propiedades magnéticas en diversos tipos de compuestos.
- Comprender los factores relevantes que modulan dichas propiedades.
- Identificar en base a la composición y naturaleza del sistema cuáles son las características salientes que lo vuelven atractivo desde el punto de vista del magnetismo molecular.
- Describir con precisión el problema a resolver a partir de la descripción estructural del sistema molecular bajo estudio.
- Seleccionar el conjunto de técnicas más apropiado para la resolución del mismo, explicar el principio físico en que se basa c/u, el tipo de información que puede proveer y sus limitaciones.
- Describir las necesidades de cada técnica en cuanto a preparación de la muestra, equipamiento, envergadura. Conocer la accesibilidad a esos equipos.
- Describir el aspecto de los datos experimentales que cada equipo aporta, explicar el procesamiento de los mismos y su interpretación en el marco del modelo apropiado.
- Integrar la información obtenida para responder a la pregunta básica formulada.

MMFyA - 1/3


Dr. ERNESTO J. MARCECA
SECRETARIO TÉCNICO
y DE PLANIFICACIÓN
D: Q. I. A. y Q. F.



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

Módulo I (72 hs., duración 9 semanas)

(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

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 (56 hs., duración 7 semanas)

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.

MMFyA - 2/3

Dr. ERNESTO J. MARCECA
SECRETARÍA TÉCNICA
y DE PLANIFICACIÓN
D. Q. I. A. y Q. F.



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

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.

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_{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.
- Molecular Cluster Magnets, Richard Winpenny, World Scientific, 2011.
- Molecular Nanomagnets, Dante Gatteschi, Roberta Sessoli, Jacques Villain, Oxford, 2006.
- Molecular Magnets: Recent Highlights, W Ed Linert, Springer, 2003
- Theoretical Foundations of Molecular Magnetism, Roman Boca, Elsevier, 1999.

Prof. Leonardo Slep

MMFyA - 3/3


Dr. ERNESTO J. MARCECA
SECRETARÍA TÉCNICA
Y DE PLANIFICACIÓN
D. Q. I. A. y Q. F.



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 499.475/2011

Buenos Aires,

20 MAY 2013

VISTO:

la nota presentada por el Dr. Ernesto J. Marceca Secretario Técnico y de Planificación 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 2013 (a partir del 18/03/2013) en el Departamento de QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA a cargo del Dr. Leonardo Slep

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado el 16/04/2013,
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 15-17) del expediente de la referencia.

Artículo 3°: Ratificar 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 15-17) incluida. Cumplido, archívese.

Resolución CD N° 1028
SPI/med / 24/04/2013


Dra. MARIA ISABEL GASSMANN
SECRETARIA ACADEMICA ADJUNTA


Dr. JORGE ALIAGA
DECANO