

CURSO DE RESONANCIA MAGNETICA = AÑO 1972 .-

1er. cuatrimestre

- 1.- Condición de resonancia de los spines electrónico y nuclear. Experimentos r.s.e. y r.m.n. Equilibrio térmico de los sistemas de spin. Relajación de los spines electrónico y nuclear. Mecanismos de relajación. Forma de la línea de resonancia. Hamiltoniano magnético. Energía Zeeman. Funciones básicas de spin. Energías de orden cero.
- 2.- Interacciones magnéticas. Acoplamiento hiperfino isotrópico. Interacción dipolar. Aplicación de la teoría de las perturbaciones. Energías hiperfinas de primero y de segundo orden. Espectros de resonancia del spin electrónico de primero y de segundo orden. Transiciones prohibidas. Niveles de energía de los átomos de hidrógeno y de helio. Efecto de pantalla química.
- 3.- Resonancia nuclear en sólidos. Tensor de acoplamiento dipolar. Espectro de resonancia nuclear de dos protones acoplados. Segundo momento de líneas de absorción de resonancia nuclear. Estudio estructural por el método de los momentos. Resonancia cuadrupolar nuclear.
- 4.- Resonancia nuclear en líquidos. Acoplamiento spin-spin. Análisis de espectros. Separación de la línea de absorción por núcleos magnéticamente equivalentes. Origen del corrimiento químico. Corrimiento químico del protón y de otros núcleos. Acoplamientos spin-spin nucleares. Caso del acoplamiento spin-spin de protones.
- 5.- Espectro de resonancia del spin electrónico en solución. Radicales libres. Separaciones hiperfinas. Casos de conjuntos de protones equivalentes. Separaciones hiperfinas por otros núcleos. Densidad de spin no apareado. Acoplamiento indirecto. Hiperconjugación. Distribución de spin en radicales libres iónicos. Densidad de spin negativa. Aplicaciones a estudios químicos en solución.
- 6.- Radicales orgánicos atrapados en sólidos. Espectro r.s.e. de primer orden. Efectos de segundo orden. Determinación del tensor hiperfino del protón y de otros núcleos. Moléculas en estado triplete. Interacción spin-spin electrónica. Niveles de energía del triplete. Transiciones con $m = 2$. Estructura hiperfina. Ejemplos.

11..

7.- Anisotropía del factor espectroscópico g . Determinación del tensor g en cristales. Spin hamiltoniano efectivo. Tensor g en moléculas. Ejemplos en radicales inorgánicos. Cálculo teórico de los valores principales del tensor g para conjuntos de moléculas fijas y orientadas al azar. Casos de aplicación de diferentes funciones de líneas.

8.- Resonancia del spin electrónico en metales de transición. Niveles de energía de los electrones de un ión libre. Separación de niveles por el campo ligante. Teorema de Kramers. Tensor g en iones con $s = 1/2$. Complejos regulares y distorsionados de metales de transición. Origen de la separación de niveles a campo cero. Medición de D por r.s.e. Iones con s mayor que uno. Separación hiperfina por el núcleo del metal. S.h.p. por núcleos de los ligandos. Iones de las tierras raras.

9.- Relajación de spin. Ecuaciones de Bloch. Origen de la relajación magnética. Forma de línea de Lorentz. Relajación de spin nuclear en la molécula de agua. Efecto de campos locales. Cálculo de T_1 y T_2 . Tiempos de correlación. Corrimiento químico anisotrópico. Acoplamiento rotacional de spin nuclear. Acoplamiento de cuadrupolo eléctrico. Efecto de spines electrónicos no apareados. Relajación de spin de radicales en solución. Intercambio de spines electrónicos.

10.- Efectos de intercambio químico en espectros r.m.n. Rotación interna impedida. Spin acoplado a un núcleo de relajación rápida. Reacciones de intercambio de protones. Efectos de intercambio químico en espectros r.s.e. Modulación del acoplamiento hiperfino. Par iónico en solución. Reacciones de transferencia electrónica.

11.- Resonancia nuclear en sistemas paramagnéticos. Corrimiento de Knight. Distribución del electrón no apareado por r.m.n. Relajación por iones paramagnéticos. Doble resonancia electrónica nuclear. Efecto Overhauser. Efecto de estado sólido. Experimento ENDOR. Desacoplamiento de spines.

12.- Efecto Mössbauer. Fundamentos de la espectroscopia Mössbauer. Requerimientos experimentales. Ancho y forma de las líneas. Corrimiento Doppler y corrimiento químico. Interacciones magnética y cuadrupolar eléctrica. Probabilidades de transición. Estados típicos de iones del átomo de hierro: iones ferrosos y férricos de alto y bajo spin. Aplicaciones.