

## **Magnetismo Molecular-Fundamentos y Aplicaciones**

### *Carga Horaria*

128 hs totales, organizada en un módulo I de 72 hs (9 semanas) y un módulo II de 56 hs (7 semanas)

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.

### Contenidos

#### Módulo I-Fundamentos

##### *(a) Magnetismo – Generalidades*

Momento magnético y momento angular- Factor g- Intensidad de campo magnético e inducción magnética-Magnetización y susceptibilidad magnética- Unidades en magnetismo.

##### *(b) Magnetismo Molecular. Sistemas de spin aislados*

Componente paramagnética y diamagnética. Ecuación de Van Vleck. Paramagnetismo independiente de la temperatura (TIP). Sistemas paramagnéticos simples: centros aislados sin momento angular orbital. Interacción de Zeeman y Ley de Curie. Funciones de Brillouin. Aproximación de campo medio para interacciones muy débiles entre los centros de spin, temperatura de Weiss.

##### *(c) Técnicas instrumentales*

Magnetómetro de muestra vibrante. SQUID. Susceptibilidad en campos alternantes. Preparación de muestra. Resonancia Paramagnética Electrónica. El espectrómetro de EPR, principios - El espectro de EPR en sistemas de dos niveles. Anisotropía del Factor g y orientación. ZFS, espectros a altas y bajas temperaturas- Espectros en solución y de polvo. Interacción hiperfina. EPR de alta frecuencia.

*(d) El Hamiltoniano de spin (HS)*

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. Acoplamiento spin-órbita y simetría. Desdoblamiento de campo nulo (ZFS), aproximación fenomenológica: componentes axial y rómbica del ZFS. Implementación numérica del HS, cálculo de la magnetización y susceptibilidad de muestras orientadas y/o promediadas. Simulaciones y ajustes de datos experimentales.

*(e) Magnetismo molecular. Interacción entre espines*

Interacción de Intercambio. Acoplamiento ferro y antiferromagnético en sistemas binucleares. HDvV (Hamiltoniano de Heisenberg, Dirac y Van Vleck), coeficientes de Clebsch-Gordan y proyección de propiedades de los espines individuales en el sistema acoplado. Interpretación física y orbitalaria del HDvV. Presencia de desdoblamiento de campo nulo local y/o interacción anisotrópica y sus proyecciones en el sistema acoplado. Interacción de Intercambio en compuestos trinucleares. Frustración de spin. Simulaciones y ajustes de datos experimentales.

---

## Módulo II-Aplicaciones

*Estructura Electrónica de Compuestos de Coordinación y Magnetismo. Metales 3d*

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, descenso de simetría. Relación entre la configuración electrónica y parámetros del HS. Momento angular orbital no quencheado- Co(II).

*Estructura Electrónica de Compuestos de Coordinación y Magnetismo. Lantánidos(4f)*

Orbitales f. Momento angular total J. Factor g- fórmula de Landé. Simetría esférica y efecto del entorno de ligandos.

*Sistemas de elevada nuclearidad*

Polímeros de coordinación 1D. Compuestos polinucleares. Aproximación de estado fundamental de spin gigante.

*Magnetos de molécula única (SMM).*

Relajación de la magnetización. Origen de la barrera térmica. Mecanismos de relajación. Técnicas experimentales para caracterizar SMM. Fenómenos cuánticos, tunelaje de la magnetización. Ejemplos de SMM. Otras derivaciones: refrigerantes moleculares, efecto magnetocalórico, spin qubits, spintrónica.

## Bibliografia

- Magnetochemistry; Carlin, R. L., Springer-Verlag, 1986.
- Molecular Magnetism; Olivier Kahn, Wiley VCH , 1993.
- Introduction to Molecular Magnetism. From transition metals to lanthanides; Benelli, C.; Gatteschi, D., Wiley VCH, 2015.
- Molecular Magnetic Materials, Edited by B. Sieklucka and D. Pinkowicz, Wiley VCH, 2017.
- Introduction to Ligand Field Theory; Balhausen, C. J., McGraw-Hill, 1962
- Magnetism and Ligand Field Analysis; Gerloch, M, Cambridge University Press, 1983.
- Electron Paramagnetic Resonance of Exchange Coupled Systems; Bencini, A.; Gatteschi, D., Springer-Verlag, 1990.
- Molecular Nanomagnets, Dante Gatteschi, Roberta Sessoli, Jacques Villain, Oxford, 2006.