

Area: CE - Cs. Exactas y Naturales

Título del Trabajo: **ANÁLISIS DEL ORIGEN ELECTRÓNICO DE CONDUCTAS NOVEDOSAS DE PROPIEDADES MAGNÉTICAS DENTRO DEL RÉGIMEN RELATIVISTA**

Autores: LIBUTTI, TOMÁS, GIMENEZ, CARLOS Y AUCAR, GUSTAVO

E-mail de Contacto: tomas.libutti@gmail.com **Teléfono:**

Tipo de Beca: UNNE Pregrado **Resolución Nº:** 974/13 CS **Período:** 01/03/2014 - 01/03/2015

Proyecto Acreditado: PICT2012 1214, **Origen y efectos del entrelazamiento cuántico, los enlaces de hidrógeno, la relatividad, la QED y la quiralidad en propiedades magnética moleculares**, FONCYT, 01/2014-01/2017.

Lugar de Trabajo: Facultad de Cs. Exactas y Naturales y Agrimensura e Instituto IMIT

Palabras Claves: Parámetros de RMN, Propagador de polarización, paramagnetismo

Resumen:

Algunas propiedades magnéticas atómicas o moleculares son fuertemente afectadas por efectos debidos a la introducción de la relatividad en su descripción. Entre la propiedades más sensibles se encuentran las relacionadas con los parámetros de la resonancia magnética nuclear, RMN. Tanto es así que los apantallamientos magnéticos de átomos pesados pueden cambiar su naturaleza magnética al ser descritos dentro de dos regímenes diferente, es decir, dentro del marco relativista o no relativista. Estas conductas no han sido aún explicadas pues no se conoce su origen.

Como se cuenta con conocimientos relativos al formalismo completamente relativista de propagadores de polarización implementado en el código DIRAC, y una versión local del mismo que permite el análisis de las contribuciones de cada uno de los factores que intervienen en el cálculo de propiedades magnéticas, se ha realizado un estudio de estos factores y sus conductas cuando se varía la velocidad de la luz. Este escalamiento permite conocer las conductas de dichos factores en sus dos extremos, es decir, los regímenes relativista y no relativista (para el cual la velocidad de la luz se escala a infinito).

Entre los objetivos planteados se encuentra el determinar si alguno o varios de dichos factores son responsables del cambio de naturaleza magnética de los apantallamientos magnéticos, y si estas conductas pueden ser generalizadas. Se estudiaron las contribuciones a los elementos matriciales de los "perturbadores" originados en el campo externo y en el campo magnético debido a los espines nucleares. Se determinaron las contribuciones de las excitaciones originadas en los orbitales atómicos o moleculares del core y los de valencia.

La metodología utilizada fue la teoría de perturbaciones a segundo orden y la teoría de propagadores de polarización al nivel RPA de aproximación. Se utilizaron los códigos DIRAC y una versión local del mismo. Se estudiaron compuestos atómicos como los gases nobles Xe y Rn, y moleculares como los hidruros HX (X = Br, I, At). Se establecieron los mecanismos electrónicos responsables de conductas semejantes en elementos pertenecientes a la misma fila de la Tabla Periódica. Se observa que el origen del paramagnetismo, en el apantallamiento de los gases nobles, se debe a excitaciones provenientes de los orbitales del core en una combinación de los efectos debidos a los campos externo y del momento magnético dipolar, simultáneamente. El primero actúa como selector de mecanismos electrónicos posibles, entre muchos originados en la presencia del campo del dipolo magnético nuclear.