



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PROGRAMA DE  
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS  
DENOMINACIÓN DE LA ENTIDADES PARTICIPANTES  
Programa de actividad académica



**Denominación: RESONANCIA PARAMAGNÉTICA ELECTRÓNICA  
(RESONANCIA DE ESPÍN ELECTRÓNICA)**

Clave: No llenar este campo	Semestre: No llenar este campo	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: No llenar este campo
<b>Modalidad:</b> CURSO		<b>Duración del curso:</b> (3 hrs/sem, 6 créditos)	

**Actividad académica con seriación antecedente: Estructura de la Materia**

**Objetivo general:** El alumno debe ser capaz de entender los conceptos básicos de la espectroscopía de epr para poder aplicarlos en la determinación de la estructura y dinámica de sus sistemas paramagnéticos (compuestos con electrones desapareados).

Objetivos específicos: Aprender la teoría del epr, aprender a obtener espectros de epr según las características de las especies involucradas. Aprender el uso de un programa para la simulación de espectros de EPR, Interpretar los espectros de primer orden de radicales orgánicos para obtener los datos del conjunto de parámetros magnéticos (núcleos acoplados, espines acoplados, acoplamientos hiperfinos, entre otros).

Introducir en este programa de simulación los parámetros magnéticos esperados para obtener el espectro simulado. Refinar los parámetros magnéticos y obtener el mejor espectro y compararlo con el espectro experimental para tener una correcta interpretación del espectro.

Interpretar los espectros más complicados con metales de transición. Utilizando el principio antes mencionado.

**Índice temático**

Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Principios	1.5	
2	Desdoblamiento hiperfino nuclear	8.0	
3	Efectos anisotrópicos	14.5	
4	Simulaciones matemáticas de espectros con $S = 1/2$	3.0	
5	Espectros de resonancia paramagnética electrónica de compuestos de metales de transición	15	
6	Seminarios y aplicaciones prácticas		6
<b>Total de horas teóricas:</b>		<b>42</b>	
<b>Total de horas prácticas:</b>		<b>6</b>	
<b>Suma total de horas:</b>		<b>48</b>	

**Contenido Temático**

Unidad	Tema y subtemas
1	Descripción de la espectroscopía de epr. ¿Qué sistemas son susceptibles a ser estudiados por esta técnica.
2	El átomo de hidrógeno Presentación del espectro Desdoblamientos hiperfino en sistemas isotrópicos que involucran más de un núcleo. Contribuciones a la constante de acoplamiento en sistemas isotrópicos. Serie de ejercicios
3	Anisotropía en el valor de g Anisotropía en el acoplamiento hiperfino El EPR de los estados tripletes

	Interacción cuadrupolar nuclear Anchos de línea en el EPR Hamiltoniano de spin. Varias aplicaciones, radicales orgánicos. Serie de ejercicios
4	Simulaciones matemáticas de espectros con $S = 1/2$ Serie de ejercicios
5	Interpretación de los valores de g Acoplamiento hiperfino y desdoblamiento a campo cero (zfs) Constantes de acoplamiento hiperfino con los ligantes Colección de espectros de EPR de compuestos con iones metálicos de la primera serie de transición EPR de cúmulos metálicos Doble resonancia y transformadas de Fourier en EPR EPR cuantitativo. Simulaciones matemáticas para sistemas $S > 1/2$ Serie de ejercicios
6	Seminarios y aplicaciones prácticas

**Bibliografía básica actualizada:** 1) J. A. Weil, J. R. Bolton, *Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications*, 2nd ed. John Wiley & Sons Inc., 2007. 2) R.S. Drago, *Physical Methods for Chemists*, 2nd Ed. Saunders College Publishing, Ft. Worth, 1992, pp. 360-401 and 559-597.

**Bibliografía complementaria:** A. Abraham and B. Bleaney, *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*, Oxford University Press, Oxford, 1970. Varios artículos de aplicaciones del EPR.

<b>Sugerencias didácticas:</b>		<b>Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:</b>	
Exposición oral	(X)	Exámenes parciales	( )
Exposición audiovisual	(X)	Examen final escrito	(X)
Ejercicios dentro de clase	(X)	Trabajos y tareas fuera del aula	(X)
Ejercicios fuera del aula	(X)	Exposición de seminarios por los alumnos	(X)
Seminarios	(X)	Participación en clase	(X)
Lecturas obligatorias	(X)	Asistencia	(X)
Trabajo de investigación	(X)	Seminario	(X)
Prácticas de taller o laboratorio	(X)	Otras:	( )
Prácticas de campo	(X)		
Otras: _____	( )		

## LIBROS SUGERIDOS

- 1.- R.S. Drago, *Physical Methods for Chemists*, 2nd Ed. Saunders College Publishing, Ft. Worth, 1992, pp. 360-401 and 559-597.
- 2.- A. Abraham and B. Bleaney, *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*, Oxford University Press, Oxford, 1970.
- 3.- J.A. Weil, J.R. Bolton, J.E. Wertz, *Electron Paramagnetic Resonance - Elementary Theory and Practical Applications*, Wiley-Interscience, 1994.
- 4.- N.M. Atherton, *Principles of Electron Spin Resonance*, Ellis Horwood, 1993.
- 5.- Arthur Schweiger and Gunnar Jeschke *Principles of Pulse Electron Paramagnetic Resonance*, Oxford University Press., 2001.
- 6.- John A. Weil, J.R.B., *Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications*, 2<sup>nd</sup> ed. John Wiley & Sons Inc., 2007.
- 7.- W.R. Hagen, *Electron Paramagnetic Resonance of Metalloproteins with Emphasis on Components of the Respiratory Chain*. Rodopi, Amsterdam, 1982.
- 8.- Saifutdinov, R. G. *Electron Paramagnetic Resonance in Biochemistry, and Medicine*, Kluwer Academic Press/Plenum, New York, 2001.
- 9.- Artículos de aplicaciones del EPR.