

P 66

Efectos relativistas que convierten el para (-) en diamagnetismo (+). Su estudio sobre los parámetros espectroscópicos de la RMN

Maldonado A¹, Aucar G²^{1 2} IMIT CONICET-UNNE

El dia y paramagnetismo son fenómenos que se refieren a corrientes electrónicas opuestas cuyo origen es diferente. En el caso de las propiedades magnéticas, éstas usualmente se escriben como suma de ambas. En el caso de apantallamiento nuclear magnético de los átomos de gases nobles éste es puramente diamagnético. Al menos al nivel no relativista. Esto se modifica al nivel puramente relativista. Lo mismo ocurre o puede ocurrir con los apantallamientos de átomos pesados con vecinos también pesados.

Cuando dichos sistemas contienen átomos pertenecientes a la quinta fila y hacia abajo en la Tabla Periódica es imprescindible incorporar los efectos relativistas a las propiedades bajo estudio para poder reproducir de manera adecuada las mismas. En este trabajo se presenta un estudio de los parámetros de la RMN en sistemas pesados y muy pesados que contienen átomos de Sn y Pb (5ta y 6ta fila de la TP), utilizando el método de los propagadores de polarización completamente relativista. Los sistemas bajo estudio son SnX_4 ; $PbXH_3$ y PbX_4 ($X = H, F, Cl, Br, I$); éstos últimos son estudiados por primera vez con métodos de cuatro componentes.

Para sistemas con átomos pesados, como los de la 5ta y 6ta fila de la TP se producen efectos relativistas que modifican en menor o mayor medida los fenómenos conocidos en el magnetismo. En nuestros estudios demostramos que la componente paramagnética del apantallamiento sobre el Sn cambia su signo, es decir, se hace positiva cuando en los átomos sustituyentes se reemplaza Br por I. Para el caso del Pb, la componente paramagnética es siempre positiva. Por otro lado, la componente diamagnética varía su valor en menor proporción, $\sim 15\%$ al pasar de SnH_4 a SnI_4 y $\sim 9\%$ al pasar de PbH_4 a PbI_4 . En esta comunicación se discuten los orígenes electrónicos de estas conductas.

Por otro lado, el acoplamiento indirecto entre espines nucleares de los núcleos $Pb - X$ en los sistemas PbX_4 presenta una gran disminución de su valor a medida que los átomos sustituyentes se hacen más pesado, produciendo incluso un cambio de signo en dicha propiedad. En esta comunicación se discute también acerca de los efectos relativistas sobre la componente paramagnética responsables de dicha variación.