

**102a Reunión de la  
Asociación Física Argentina**

26 al 29 de septiembre de 2017  
La Plata, Buenos Aires, Argentina



### 201. Estudio entre el tensor anapolo magnético de segundo orden y el tensor asociado al poder rotatorio

Pagola G I<sup>1</sup>, Provasi P F<sup>2</sup>, Ferraro M B<sup>1</sup>, Pelloni S<sup>3</sup>, Lazeretti P<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física de Buenos Aires, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales CONICET- Universidad de Buenos Aires

<sup>2</sup> Dpto. de Física - Facultad de ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura - UNNE & IMIT - CONICET

<sup>3</sup> Dipartimento de Chimica, Universita degli Studi di Modena, Italia

El anapolo de la susceptibilidad magnética, permite caracterizar la respuesta de la nube electrónica de una molécula en presencia de un campo magnético B independiente del tiempo cuyo rotor C es uniforme y no nulo. El tensor anapolo de segundo rango se define a través de las segundas derivadas de la energía de interacción de la molécula respecto de las componentes de B y de C. Como se ha visto en un trabajo previo[1], en el caso de tener un medio ordenado (o bien tener una molécula aislada) las componentes diagonales del tensor anapolo, calculadas en el sistema de coordenadas correspondiente a los ejes principales de la susceptibilidad magnética, son invariantes de medida y tienen diferente signo para los enantiómeros L y D de una molécula quiral (consecuentemente, lo mismo es válido para la traza del tensor). Razón por la cual estas magnitudes, en principio, pueden ser medidas experimentalmente. En este trabajo se hace un estudio comparativo entre el tensor anapolo y el tensor asociado al poder rotatorio. Se puede ver que hay una analogía matemática (en cuando a la invariancia respecto del origen de coordenadas) entre las componentes diagonales del anapolo (expresadas en el sistema de coordenadas que diagonaliza la susceptibilidad) y las componentes diagonales del tensor asociado al poder rotatorio óptico (expresadas en el sistema de coordenadas que diagonaliza el tensor polarizabilidad). Por esta razón, tomando como sistema modelo la molécula O<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, se estudiarán la variación de la traza y de las componentes diagonales de ambos tensores en función del ángulo diedro (H-O-O-H), analizando similitudes y diferencias entre ambos. Estos cálculos se efectúan a tanto a nivel DFT como CC(SD)

[1]. P.F. Provasi, G.I. Pagola, M.B. Ferraro, S. Pelloni, P. Lazeretti, Journal of Physical Chemistry A, (2013), [pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp408969k](https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp408969k)

### 202. Estudio Termodinámico de [Butilamina+Metil-Isobutil-Cetona (MIK), Di-Isopropileter (DIPE), para (288.15 - 308.15) K

Campos V d V<sup>1</sup>, Gómez Marigliano A C<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán

<sup>2</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, CONICET-Universidad Nacional de Tucumán