

STUDIO E CARATTERIZZAZIONE DI MAGNETI MOLECOLARI

Il progetto riguarda lo studio delle interazioni tra centri metallici in complessi molecolari polinucleari. I complessi polinucleari sono, in generale, materiali multi-funzionali e tra questi i complessi contenenti rame sono particolarmente interessanti per via delle loro molteplici proprietà. Infatti, essi possono mimare i siti attivi di biomolecole naturali, possono interagire con il DNA, legandosi ad esso o distruggendolo, oppure possono essere usati come materiali innovativi in chimica e nelle nanotecnologie per via delle loro caratteristiche elettroniche, magnetiche e redox.

OBIETTIVI

L'obiettivo principale è quello di intraprendere uno studio sistematico delle proprietà magnetiche di complessi di rame o di nichel bi- e tri-nucleari. L'interesse per questo tipo di sistemi deriva dal fatto che in essi atomi di ossigeno appartenenti a specifici leganti funzionano da ponte tra gli atomi di rame. Poiché vi è una stretta relazione tra la geometria molecolare (in particolare la coordinazione dei centri metallici e la struttura dei 'ponti') e la natura e l'intensità delle interazioni magnetiche tra gli elettroni spaiati presenti sui centri metallici dei complessi, scelte mirate dei leganti organici possono permettere la modulazione delle proprietà magnetiche.

STRUMENTAZIONE E METODI

- Sviluppo di strategie sintetiche per la preparazione dei complessi polinucleari;
- Caratterizzazione strutturale con tecniche di diffrazione di Raggi X da monocristallo;
- Studio sperimentale delle proprietà magnetiche tramite SQUID (Superconducting Quantum Interference Devices);
- Spettroscopia EPR;
- Applicazione di strategie teoriche e computazionali per la descrizione della struttura elettronica e delle proprietà magnetiche dei complessi in esame.

DISCIPLINE COINVOLTE

Chimica fisica, Chimica inorganica, Spettroscopia, Chimica teorica

GRUPPO DI LAVORO

Valeria Ferretti
Celestino Angeli

COLLABORAZIONI

- Prof. F. Spizzo (Dipartimento di Fisica e Scienze della Terra, UniFe)
- Prof. C. J. Calzado (Departamento de Química Física, Universidad de Sevilla, Spagna)
- Prof. R. P. Sharma (Department of Chemistry, Punjab University, Chandigarh, India)
- Prof. A. Ozarowski (National High Magnetic Field Laboratory, Florida State University, USA)