

## Corso di Laurea in Chimica

STUDIO DELLA DINAMICA DI MAGNETIZZAZIONE DI UN COMPLESSO  
DITIOLENICO DI VANADIO(IV)

**Candidato:** Andrea Albino

**Relatrice:** Roberta Sessoli ([roberta.sessoli@unifi.it](mailto:roberta.sessoli@unifi.it))

**Correlatore:** Matteo Atzori ([matteo.atzori@unifi.it](mailto:matteo.atzori@unifi.it))

In questo elaborato di tesi sono investigate le proprietà strutturali e magnetiche del composto di coordinazione  $[(\text{Ph})_4\text{P}]_2[\text{V}(\text{dmit})_3]$ , al fine di individuare e di minimizzare i meccanismi di rilassamento dello spin elettronico del complesso. Un tempo di coerenza dello spin relativamente lungo può rendere un complesso di coordinazione adatto all'impiego come quantum bit, che è alla base di un computer quantistico. Il quantum bit, o qubit, è un sistema a due livelli che può accedere non soltanto agli stati  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ , ma può essere inizializzato in una sovrapposizione di questi stati  $\Phi = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ . Un qubit deve essere accoppiato ad altri qubit in stati 'entangled' per poter essere utilizzato in algoritmi quantistici. Una realizzazione molto intuitiva di un qubit è un sistema con spin 1/2, nucleare o elettronico. Sebbene gli spin elettronici abbiano il vantaggio di essere manipolati più efficientemente, presentano, rispetto agli spin nucleari, maggiori problemi legati alla perdita di coerenza. Attraverso una attenta ingegnerizzazione degli spin nucleari di un complesso di vanadio(IV), il gruppo di Freedman, ha mostrato che anche in sistemi molecolari si possono raggiungere tempi di coerenza soddisfacenti, dell'ordine del ms, in soluzione congelata. In questo lavoro di tesi è stato sintetizzato un complesso di vanadio trischelato con leganti privi di spin nucleari in fase cristallina, e, dopo aver risolto, mediante diffrattometria di raggi-X, la struttura del composto ottenuto, con l'ausilio di tecniche magnetometriche e della tecnica spettroscopica EPR, è stata studiata la dinamica di rilassamento di spin al variare del campo e della temperatura. È stato necessario sintetizzare un analogo diamagnetico del complesso per ottenere, tramite cocristallizzazione, una dispersione cristallina con il 5% di complesso magneticamente attivo allo scopo di garantire un maggior isolamento dei centri paramagnetici. In questo modo è stato possibile ottenere spettri EPR ben risolti, dai quali sono stati ricavati i valori principali dei tensori d'anisotropia magnetica. Sono stati individuati diversi andamenti del tempo di rilassamento a seconda della dimensione dei cristalli ottenuti. Nel confronto con un complesso piramidale a base quadrata di vanadile con gli stessi leganti del complesso trischelato qui investigato, sono stati individuati tempi di rilassamento maggiori per il complesso di vanadile, correlabili alla maggior rigidità della sfera di coordinazione, fattore che rende il complesso meno suscettibile alle interazioni con il bagno termico. Questo lavoro di tesi ha contribuito a stabilire le linee guida per la futura strategia di sintesi razionale di nuovi potenziali qubit: l'utilizzo di leganti costituiti da atomi privi di spin nucleare e una struttura elettronica che garantisca un adeguato isolamento dalle interazioni con i fononi reticolari.