
Propriétés magnétiques de complexes sandwich de lanthanide

Hélène Bolvin*¹

¹Laboratoire de Chimie et de Physique Quantiques (LCPQ) – CNRS : UMR5626 – 118 route de Narbonne 31062 Toulouse cédex 4, France

Résumé

Calcul à l'aide de la méthode SO-CASSCF et de méthodes CI des données magnétiques d'un dimère de cérium (facteurs g et couplage magnétique J). Analyse du mécanisme. Rationalisation de la nature de l'état fondamental dans une série de monomères à l'aide de la théorie du champ cristallin et la théorie du champ des ligands via les orbitales 5d vacantes.

Le résumé est en pièce attachée

Mots-Clés: magnétisme moléculaire, lanthanides, théorie de la fonction d'onde

*Intervenant