
Calcul de tenseurs RPE dans des complexes de cuivre

Aude Giard^{*1}, Dorothée Berthomieu^{†1}, Ilaria Ciofini^{‡2}, and Bertrand Xerri¹

¹Institut Charles Gerhardt Montpellier, équipe MACS (ICGM) – Université Montpellier I, CNRS : UMR5253, Université Montpellier II - Sciences et techniques, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier – 8 rue de l'École Normale, 34296 Montpellier cedex 05, France

²Laboratoire d'Electrochimie, Chimie des Interfaces et Modélisation pour l'Energie (LECIME - UMR 7575) (LECIME) – Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris – ENSCP 11, rue Pierre et Marie Curie 75005 PARIS, France

Résumé

La résonance paramagnétique électronique (RPE) est un outil expérimental puissant qui permet d'explorer la coordination et la structure électronique des ions métalliques paramagnétiques dans les complexes d'intérêt biologique. Le calcul des tenseurs RPE par des méthodes théoriques permet de mieux interpréter les spectres obtenus et de déterminer la structure électronique des ions.

Parmi les nombreuses méthodes approchées existant pour calculer les propriétés RPE des complexes métalliques, l'une des plus simples consiste à utiliser une charge nucléaire effective² dans l'expression de l'Hamiltonien spin-orbite mono-électronique pour compenser la disparition des contributions bi-électroniques. Nous nous sommes intéressés à cette méthode et plus particulièrement à son utilisation au sein du programme Gaussian09, pour lequel nous avons déterminé la charge effective pour le cuivre.

Nous avons paramétrisé la charge effective du cuivre dans le programme Gaussian grâce à un jeu de 16 complexes du cuivre comprenant chacun deux ligands identiques en position équatoriale, ainsi que des ligands polaires ou apolaires en position axiale afin de simuler l'effet d'un solvant. Les tenseurs g calculés avec cette charge effective montrent que cette méthode de calcul conduit à un bon accord avec les données expérimentales.

A. Van Yperen-De Deyne, E. Pauwels, V. Van Speybroeck and M. Waroquier, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 14, 10690, **2012**

² S. Koseki, M. W. Schmidt and M. S. Gordon, *J. Phys. Chem.*, 96, 10768, **1992**

Mots-Clés: RPE, complexes du cuivre, tenseur g

*Intervenant

†Auteur correspondant: berthom@univ-montp2.fr

‡Auteur correspondant: ilaria-ciofini@chimie-paristech.fr