

---

# Modulation redox du couplage magnétique dans des systèmes organo-métalliques

Corentin Boilleau\*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institut des Sciences Chimiques de Rennes (CTI) – Université de Rennes 1, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes, Institut National des Sciences Appliquées de Rennes, CNRS (INC, INSIS) – Institut des Sciences Chimiques de Rennes - UMR6226 263, avenue du Général Leclerc Campus de Beaulieu - Bâtiment 10B 35042 Rennes Cedex, France

## Résumé

Un des grand défi actuel de la science appliquée concerne le développement de nouveaux dispositifs électroniques moléculaires présentant des propriétés adressables et commutables distinctes.

Ce projet vise à ouvrir de nouvelles perspectives dans le domaine des matériaux moléculaires dédiés à la commutation de propriétés magnétiques, et ce, avec une stratégie peu répandue basée sur les propriétés redox. Les systèmes cibles sont potentiellement utilisables dans un très large champ d'applications allant de la spintronique moléculaire à la détection ou encore dans le domaine des biotechnologies (imagerie haute résolution). L'électro-modulation combine plusieurs avantages par rapport aux autres types de modulations : une activation sans contact spécifique et un adressage flexible (énergie, intensité), une haute sensibilité, l'utilisation de signaux orthogonaux (électrons et photons) évitant les interférences menant à une destruction de l'information lors de la lecture. Les composés du ruthénium apparaissent particulièrement adaptés car ils présentent de fortes absorptions dans le domaine visible et favorisent une communication électronique intramoléculaire particulièrement efficace dans différents états redox.

La modulation redox du magnétisme fait l'objet du premier volet de ce projet. Les molécules cibles comportent un centre redox ruthénium coordonné en trans par deux fragments inorganiques porteurs de spins (Cu ou Mn). L'objectif est de déterminer la modification de la force et du mode (polarisation ou délocalisation de spin) de couplage magnétique selon l'état d'oxydation du système.

La corrélation électronique jouant un rôle crucial, une détermination théorique du couplage magnétique nécessite l'utilisation de méthodes très sophistiquées et donc coûteuses en temps de calcul, afin d'atteindre la précision requise et d'être en mesure de guider les expérimentateur dans leur synthèse.

**Mots-Clés:** magnétisme, électro, modulation, redox, DFT, Spin, Flip, corrélation, organo, métallique, moléculaire, théorique

---

\*Intervenant