

---

# Etude ab initio de molécules-aimants à base de dysprosium. Quid de l'influence de l'architecture supramoléculaire ?

Julie Jung<sup>\*†1</sup>, Kevin Bernot<sup>1</sup>, Fabrice Pointillart<sup>1</sup>, Olivier Cador<sup>1</sup>, and Boris Le Guennic<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR) – Université de Rennes 1 – Campus de Beaulieu -  
Bât. 10 Avenue du Général Leclerc 35042 Rennes Cedex, France

## Résumé

Depuis une dizaine d'années, les éléments 4f sont employés avec succès [1] pour la synthèse de molécules-aimants de type Single Molecule Magnet (SMM) ou Single Ion Magnet (SIM). Ces dernières sont caractérisées par une anisotropie magnétique fortement axiale, une barrière pour le renversement du moment magnétique allant d'une dizaine à une centaine de cm-1et une relaxation lente du moment magnétique. Ces propriétés sont liées à la coexistence du couplage spin-orbite et du champ de ligands [2]. Pour traiter efficacement ces effets, des approches de type CASSCF/PT2/RASSI-SO, basées sur la fonction d'onde, sont requises et ont même déjà fait leurs preuves [3].

Dans cette communication, nous présenterons deux systèmes de dysprosium [4] pour lesquels ces approches ont permis de clarifier l'origine du comportement magnétique en mettant en évidence l'effet de l'architecture supramoléculaire, et plus particulièrement le rôle joué par les hydrogènes 'mobiles' présents dans l'environnement plus ou moins proche du dysprosium (Figure). Cette corrélation a notamment pu être établie en mettant en regard les résultats théoriques et expérimentaux concernant les propriétés magnétiques (susceptibilité magnétique, aimantation), le spectre énergétique ainsi que l'orientation de l'axe d'anisotropie magnétique de ces complexes.

N. Ishikawa et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2003, 125, 8694-8695 ; R. Sessoli et al. *Coord. Chem. Rev.* 2009, 253, 2328-2341 ; D. N. Woodruff et al. *Chem. Rev.* 2013, 113, 5110-5148

J. D. Rinehart et al. *Chem. Sci.* 2011, 2, 2078-2085

L. F. Chibotaru et al. *J. Chem. Phys.* 2012, 137, 064112 ; T. T. da Cunha et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135, 16332-16335 ; J. Jung et al. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2014 en presse

G. Cosquer et al. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2014, 69-82 ; X. Yi et al. *Dalton Trans.* 2013, 42, 6728-6731

---

\*Intervenant

†Auteur correspondant: julie.jung@univ-rennes1.fr

**Mots-Clés:** magnétisme moléculaire, ab initio, CASSCF, lanthanide, dysprosium