

Propriétés magnétiques de complexes sandwich de lanthanide

Hélène Bolvin

Laboratoire de Chimie et de Physique Quantiques, IRSAMC, Toulouse

E-mail : bolvin@irsamc.ups-tlse.fr

Les complexes de lanthanide suscitent un intérêt croissant en magnétisme moléculaire pour leurs propriétés de molécules aimants ; due à la forte contribution orbitaire, ils possèdent un fort moment magnétique et une forte anisotropie. Afin d'augmenter la performance de ces propriétés, une meilleure connaissance des mécanismes microscopiques est nécessaire. Les points pour lesquels nos outils théoriques peuvent apporter des informations importantes sont les suivants : (i) pour un seul centre métallique, quels sont les facteurs qui favorisent un état fondamental avec une anisotropie axiale, (ii) comment optimiser le couplage entre sites métalliques afin de permettre la construction d'édifices polynucléaires fortement magnétiques. En effet, le magnétisme des lanthanides est porté par les orbitales 4f de caractère semi-interne ; leur interaction avec l'environnement est extrêmement faible. La méthode SO-CASSCF est une méthode multidéterminante qui permet une description précise des molécules à couche ouverte avec un atome lourd. Nous présenterons deux aspects de notre travail :

un dimère de cerium présentant un couplage antiferromagnétique relativement important ($J = -8 \text{ cm}^{-1}$) (fig. 1) : nous avons déterminé toutes les caractéristiques magnétiques de ce dimère : les facteurs g du dimère selon les premiers principes (première détermination théorique de paramètres RPE d'un dimère avec un nombre pair d'électrons), couplage magnétique entre les deux métaux avec une méthode CI. L'analyse des résultats nous permet d'analyser le mécanisme du couplage : couplage direct entre orbitales 4f, transfert à travers les 5d vacantes, superéchange avec le ligand pontant.



Figure 1: Ce_2COT_3

une série de monomères sandwich. Selon l'atome central, le ligand et la distance, l'état fondamental peut présenter une anisotropie axiale ou dans le plan. Nous rationalisons tous ces résultats en proposant un mécanisme combinant la théorie du champ cristallin et la théorie du champ des ligands avec les orbitales 5d vacantes du lanthanide.