

Etude des propriétés magnétiques d'ions polyoxométallates (POM)

Nicolas Suaud

¹*Affiliation du premier auteur, Ville, Pays*

Les POM forment une classe de composés qui présentent un remarquable degré de versatilité moléculaire et électronique qui ont des conséquences dans de nombreux domaines (catalyse, médecine, science des matériaux). De part leur structure de type cluster, les POM sont particulièrement utiles comme systèmes modèles pour l'étude des interactions électroniques et magnétiques. En effet, beaucoup de ces composés permettent l'inclusion d'ions paramagnétiques dans des systèmes de diverses topologies. De plus, ils permettent l'injection contrôlée d'électrons, donnant des systèmes à valence mixte pour pour lesquels des électrons délocalisés coexistent et interagissent avec des moments magnétiques localisés.

L'étude théorique de ces systèmes que nous avons développée passe par une approche en 2 étapes :

1. détermination par des méthodes d'IC étendues sur des fragments de POM (2-4 métaux) de l'intensité des paramètres microscopiques à l'œuvre dans les POM (transfert électronique, super-échange,...) ;
2. utilisation d'un Hamiltonien Modèle apte à représenter les propriétés d'un POM en entier basé sur les interactions évaluées à la première étape dont les résultats peuvent être comparés aux observations expérimentales.

Je présenterai aussi nos prédictions de l'effet d'un champ électrique sur un POM quant au couplage magnétique entre électrons délocalisés, comportement qui pourrait permettre l'obtention de portes logiques quantiques.