



**Institut des Sciences Chimiques de Rennes
UMR CNRS 6226**

Sujet de stage M2 2019-2020

Etude ab initio de complexes moléculaires magnétiques à base de lanthanide

Responsable : Boris LE GUENNIC

Adresse : Université de Rennes 1, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes, France

Email : boris.leguennic@univ-rennes1.fr

Tél : 02-23-23-35-21

Mots-clés : Magnétisme moléculaire, couplage spin-orbite, champ cristallin, moment magnétique, lanthanide, calculs ab initio, CASSCF, CASPT2.

Dans le domaine du magnétisme moléculaire, les molécules-aimants de type *Single Molecule Magnet* (SMM) ou *Single Chain Magnet* (SCM)^[1] font l'objet d'une attention particulière du fait des potentielles applications dans le stockage de l'information ou la spintronique moléculaire. Ces molécules sont caractérisées par une anisotropie magnétique fortement axiale, une barrière importante pour le renversement du spin effectif de la molécule et une hystérèse magnétique, i.e. une relaxation lente du moment magnétique porté par le centre magnétique. Dans ce contexte, l'utilisation d'ions lanthanide, dont le spectre énergétique est déterminé par l'interaction entre le champ cristallin créé par les ligands de ces molécules et le couplage spin-orbite intrinsèque aux ions lanthanide, a permis d'exacerber ces propriétés et d'insuffler un nouveau souffle au domaine.

A l'heure actuelle, la chimie quantique, et plus particulièrement les méthodes basées sur la fonction d'onde (CASSCF/CASPT2), représente l'une des approches les plus prometteuses.^[2] L'utilisation de telles méthodes pour le calcul des propriétés magnétiques et optiques de complexes à base de lanthanide ouvre la voie vers l'interprétation de la relation qui peut exister entre la structure géométrique, la structure électronique et les propriétés d'un composé. L'approche computationnelle permet également de proposer des stratégies raisonnées pour la synthèse de ces molécules-aimants en clarifiant et en quantifiant les contributions inhérentes à la terre rare et à son environnement.^[3]

Lors de ce stage, l'étudiant devra se familiariser avec les méthodes ab initio de type CASSCF/CASPT2, ainsi qu'avec le code de chimie quantique MOLCAS afin d'étudier le magnétisme de complexes à base de lanthanide.

Références :

[1] Gatteschi, D. et al. *Molecular Nanomagnets* Oxford University Press: Oxford, **2006**.

[2] a) Luzon, J. et al. *Phys. Rev. Let.* **2008**, *100*, 247205. b) Chibotaru, L. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 4126.

[3] Da Cunha, T. T. et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **2013**, *135*, 16332. b) Wu, J. et al. *Chem. Sci.*, **2016**, *7*, 3632. c) Norel, L. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 1933. d) Fernandez Garcia, G. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 17089. e) Briganti, M. et al. *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 7233.