
Comportement de spin croisé dans un complexe tridimensionnel de fer(II) basé sur un ligand Tris(4,4-bis-1,2,4-triazole)

Xiaochun Li^{*1} and Yann Garcia^{†1}

¹Université Catholique de Louvain = Catholic University of Louvain (UCL) – Place de l'Université 1 - 1348 Louvain-La-Neuve, Belgique

Résumé

Les composés à spin croisé (SCO) ont été largement étudiés au cours des dernières décennies pour des applications potentielles dans les dispositifs de stockage d'informations à haute densité, les ordinateurs quantiques et la spintronique (1,2). Dans ce travail, un nouveau complexe tridimensionnel de Fe(II) basé sur le tris(4,4-bis-1,2,4-triazole), ci-après abrégé en btr, a été synthétisé avec la formule $(\text{Fe}(\text{btr})_3)(\text{NTf}_2)_2$ par évaporation lente à température ambiante. Les spectres Mössbauer du ^{57}Fe , enregistrés en mode transmission, ont permis d'étudier la population des états de spin. Ils ont été ajustés à l'aide du logiciel d'analyse Mössbauer Recoil 1.05 et les valeurs de déplacement des isomères (δ) sont données par rapport à l' α -Fe à température ambiante. Le spectre de $(\text{Fe}(\text{btr})_3)(\text{NTf}_2)_2$ montre un doublet quadripolaire avec un décalage isomérique $\delta = 1,06 \text{ mm s}^{-1}$ et une division quadripolaire $\Delta E_Q = 1,63 \text{ mm s}^{-1}$, indiquant que le complexe de fer(II) est dans une configuration électronique de haut spin (HS) à température ambiante. Le thermochromisme montre que les cristaux sont blancs à température ambiante et deviennent violets dans l'azote liquide. Les variations d'enthalpie et d'entropie calculées à partir des mesures calorimétriques à balayage différentiel (DSC) sont respectivement de $6,87 \text{ kJ mol}^{-1}$ et de $36,79 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, ce qui confirme l'existence d'une conversion de spin (3). Des travaux préliminaires sur la synthèse d'un complexe similaire $(\text{Fe}(\text{btr})_3)(\text{OTf})_2$ seront également présentés afin d'explorer l'effet des anions sur les états de spin.

Références

- (1) P. Gülich, A. B. Gaspar, Y. Garcia. *Beilstein J. Org. Chem.* **2013**, *9*, 342–391.
- (2) Y. Garcia, O. Kahn, L Rabardel *et al.* *Inorg. Chem.* **1999**, *38*, 4663–4670.
- (3) P. Gülich, Y. Garcia, H A, Goodwin. *Chem. Soc. Rev.* **2000**, *29*, 419–427.

Mots-Clés: Croisement de spin, ^{57}Fe Spectres Mössbauer, Complexe de fer(II)

*Intervenant

†Auteur correspondant: yann.garcia@uclouvain.be