

# Effet d'un substrat métallique sur les propriétés de la molécule $\text{Fe}(\text{phen})_2(\text{NCS})_2$

Saber Gueddida & Mébarek Alouani

Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS)

Département Magnétisme des Objets NanoStructurés (DMONS)

23 rue du Loess BP 43 67034 STRASBOURG Cedex 2 France

Le phénomène de transition de spin est relativement récent, et peut s'observer lorsque la force du champ de ligands est comparable à l'énergie d'appariement des électrons dans les orbitales  $d$ . Le phénomène de transition de spin a été observé dans les composés de coordination dont l'ion métallique appartient à la première série de métaux de transition avec une configuration électronique  $3d^4$  à  $3d^7$ . Notre travail porte particulièrement sur l'étude de fer (II) qui possède une configuration électronique  $3d^6$ . Le fer (II) offre la possibilité d'un changement d'état sous l'effet d'une perturbation externe telle que la température, la lumière, la pression, le champ magnétique ou électrique.

La transition de spin de l'état haut spin (HS) à l'état bas spin (LS) de la molécule  $\text{Fe}(\text{phen})_2(\text{NCS})_2$  (FePhen) adsorbée sur une surface métallique a été calculée en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité. Pour montrer la transition de spin de LS-à-HS, nous avons utilisé de types de potentiel d'échange-corrélation, à savoir les potentiels GGA et GGA+U. Dans les deux cas, les calculs ont été effectués avec et sans les interactions faibles de van der Waals.

Le calcul montre que la molécule FePhen peut coexister dans les deux états magnétiques sur un substrat de cuivre et que les propriétés magnétiques et électroniques de la molécule dans les deux configurations[1] sont en bon accord avec les études expérimentales[2]. Le calcul a également montré que la couche atomique d'azote sur le cuivre (001) réduit l'énergie d'adsorption molécule-surface et les liaisons chimiques, rendant la transition de la molécule entre leur deux états magnétiques possible sous l'effet d'une perturbation externe, en bon accord avec l'expérience. Le calcul de la molécule adsorbée sur le Co/Cu(111) montre un moment magnétique induit dans l'état LS sur l'atome de fer, dû à l'hybridation entre la molécule et le substrat magnétique. Le calcul de la conductance par le modèle de Jullière montre un très bon accord avec celle mesurée expérimentalement, de même pour le calcul des images STM de l'état HS et LS dans l'approximation de Tersoff et Hamann.

[1] S. Gueddida et M. Alouani, Phys. Rev. B 87, 144413 (2013).

[2] T. Miyamachi, M. Gruber et all, Nature Commun. 3, 938 (2012).