

Lundi 17 novembre 2014, 14h

## Etudes des relations magnéto-structurales dans les composés à base moléculaire par diffusion des neutrons : des molécules individuelles aux nanoparticules

Karl RIDIER

Un des enjeux majeurs dans le domaine du magnétisme moléculaire est de mieux comprendre et prévoir, dans les composés à base moléculaire, les corrélations qui existent entre les propriétés structurales (modulables à partir de méthodes de synthèse de type « bottom-up ») et les propriétés magnétiques. En particulier, la compréhension et la maîtrise de l'anisotropie magnétique à l'échelle locale est primordiale, notamment en vue de concevoir des molécules-aimants avec de plus hautes températures de blocage.

Dans ce contexte, ce travail de thèse s'organise autour de deux grands axes. La première partie se concentre sur la détermination et la caractérisation de l'anisotropie magnétique locale dans des complexes moléculaires d'ions de transition de faible nucléarité. La diffraction de neutrons polarisés (PND) nous a permis, pour la première fois, de mettre clairement en évidence le tenseur de susceptibilité magnétique locale dans un complexe moléculaire mononucléaire de  $Fe^{3+}$  Bas-Spin ainsi que dans deux complexes, mononucléaire et dinucléaire, de  $Co^{2+}$  Haut-Spin. Cette approche novatrice mène à l'établissement de relations magnéto-structurales claires et directes, en reliant les directions magnétiques locales propres à l'environnement de coordination des ions métalliques et en particulier aux axes locaux de distorsion. Nous avons également mené l'étude originale d'un complexe à transition de spin thermo-induite de  $Mn^{3+}$  par diffusion inélastique de neutrons (INS) dans les deux phases Haut-Spin (HS) et Bas-Spin (BS). Cette étude nous a conduits à la proposition d'un modèle d'hamiltonien de spin anisotrope dans les deux états HS et BS, en relation avec la structure du complexe.

Dans une seconde partie plus exploratoire de la thèse, nous avons mené une étude complète des propriétés structurales et magnétiques de nanoparticules ferromagnétiques d'analogie du bleu de Prusse  $CsNiCr$ , par diffusion de neutrons aux petits angles (SANS). Les effets de taille, d'organisation et de concentration sur leurs propriétés superparamagnétiques ont ainsi été clairement mis en évidence. En particulier, nous avons mis en exergue, pour les particules de plus petite taille (5 nm de diamètre), une contribution magnétique qui résulte de la manifestation d'un phénomène collectif, tandis que celles de plus grande taille (28 nm de diamètre) apparaissent être dans un état complètement multidomaine.