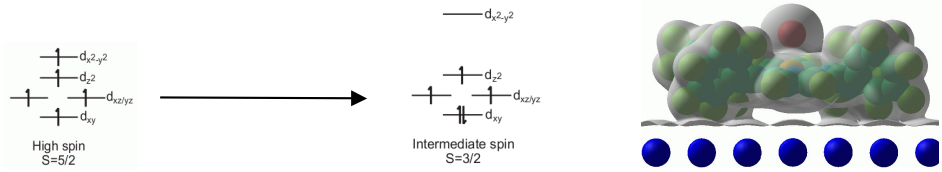
Étude théorique des molécules et nanoparticules magnétiques supportées

Contact : Dr. Hao Tang, CEMES/CNRS, Toulouse, France (http://www.cemes.fr)
(+33-5-62-25-79-84, tang@cemes.fr)



Les propriétés magnétiques des moléculaires sur une surface ont attiré beaucoup d'attention en raison de leurs applications potentielles dans la spintronique moléculaire ou dans les dispositifs de stockage d'information à très haute densité. Ces dernières années, le nombre de laboratoires qui sont équipés de microscope à effet tunnel à spin polarisé (SP-STM) a augmenté de façon importante. Ceci est clairement une des indications des efforts scientifiques mise en jeu dans ce domaine. Beaucoup de molécules magnétiques (métal-porphyrine, métal-phtalocyanine, complexes métal-ligand, métal-TCNQ, métal-TCNE, etc ...) ont été étudiés avec les STM et les Spectromètres photo-électronique *X* (XPS). Les observations expérimentales, associées aux calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ont montré que les propriétés électroniques et magnétiques de ces systèmes sont étroitement liées à la géométrie de ces molécules sur les surfaces. La connaissance de la géométrie précise à l'interface est donc cruciale pour la compréhension du mécanisme de couplage et pour interpréter correctement les mesures expérimentales.

Notre objectif est de simuler les comportements de molécules de grande taille sur surface métallique (magnétique ou non), avec un effort particulier porté sur la compréhension de leurs propriétés magnétiques. Ces *caractérisations numériques* seront basées sur des calculs intensifs en utilisant la méthode DFT (principalement VASP) avec les dernières améliorations telles que la prise en compte des interactions van der Waals, de la méthode DFT+U pour les termes d'Hubbard et les fonctionnelles hybrides (PBE0, HSE06, MA06, etc ...). Une partie de ce projet ("molécules sur surface") mettra l'accent sur l'interprétation des résultats expérimentaux, obtenus dans le cadre de collaboration, par nos partenaires en Allemagne (Christian Albrechts University, Kiel et Chemnitz University of Technology) et en Chine (Institute of Physics/Chinese Academy of Sciences et l'université de Pékin). Une deuxième partie de ce projet mettra l'accent sur l'utilisation des mono-couches moléculaires compacts, auto-assemblées comme supports pour stabiliser certaines facettes de nano-particules magnétiques avec des orientations préférentielles. Ces nano-particules sont/seront synthétisées par nos collègues au LCC (Laboratoire de Chimie de Coordination, Toulouse).

Dans le cadre du stage M2, nous allons nous limiter à une petite molécule, le tetracyanoethylene (TCNE), dont le complexe avec le vanadium *i.e.* $V(TCNE)_x$ est un des premiers aimants moléculaires. Cette étude du couplage TCNE avec une surface ferromagnétique (FM) de Ni(100) nous permettra de mieux comprendre la relation entre le transfert charge et le couplage magnétique à cette interface.

References:

[1] T. G. Gopakumar, H. Tang, J. Morillo, and R. Berndt, *J. Am. Chem. Soc.*, **134**, 11844–11847 (2012).

[2] R. Cuadrado, J.I. Cerdá, Y. Wang, G. Xin, R. Berndt, and H. Tang, *J. Chem. Phys.* **133**, 154701 (2010).

[3] X. Ge, J. Kuntze, R. Berndt, Hao Tang and A. Gourdon, *Chem. Phys. Lett.*, **458**, 161 (2008)