

Transport dans les radicaux organiques : spectroscopie *ab initio* et description phénoménologique.

Martin Vérot sous la direction de Vincent Robert

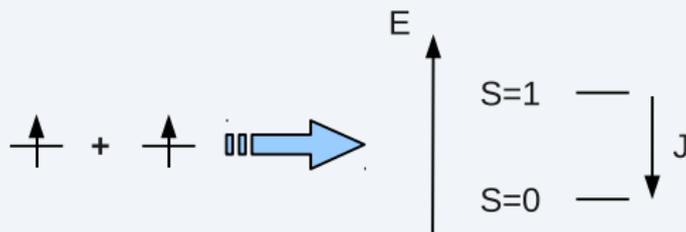
Laboratoire de Chimie - ENS Lyon - 46 Allée d'Italie - 69364 Lyon Cedex 7

17 Décembre 2009



Les radicaux, à quoi ça sert ?

Faire du magnétisme

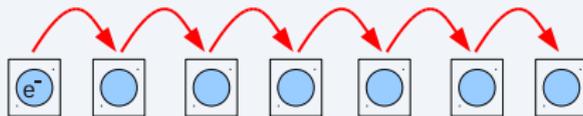


Faire de la conduction

Les radicaux, à quoi ça sert ?

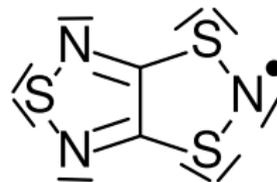
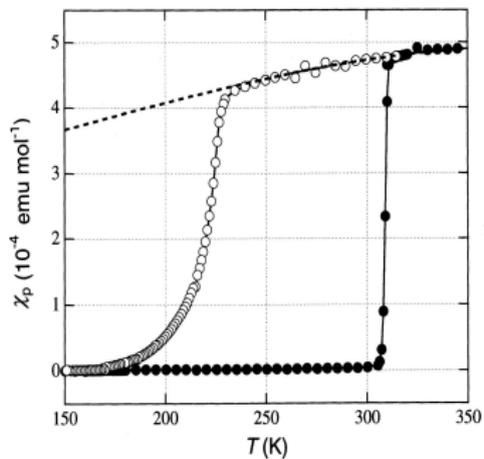
Faire du magnétisme

Faire de la conduction



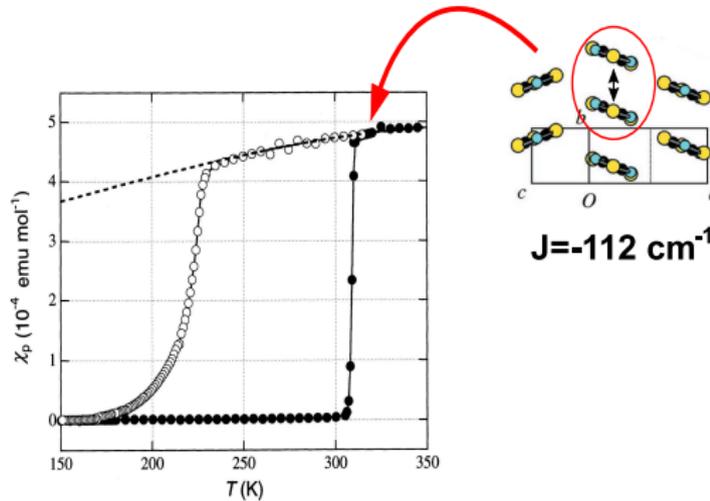
TTTA et son hystérèse

Fujita, W.; Awaga, K. *Science* 1999, 286, 261–262.



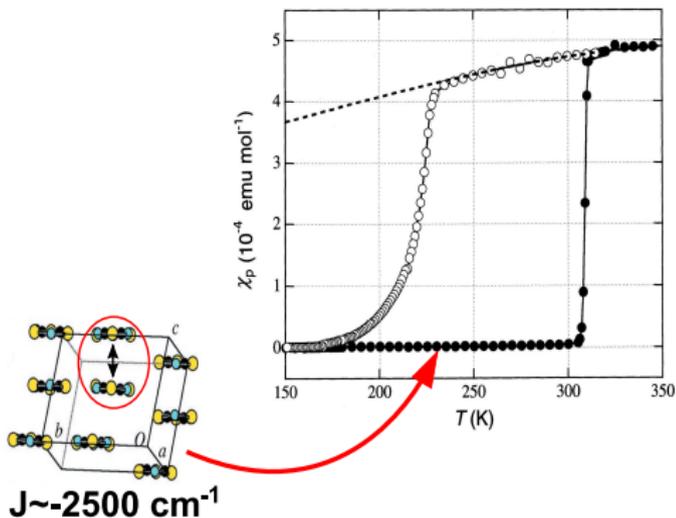
TTTA et son hystérèse

Fujita, W.; Awaga, K. *Science* 1999, 286, 261-262.



TTTA et son hystérèse

Fujita, W.; Awaga, K. *Science* 1999, 286, 261–262.



La corrélation et son traitement

$$\hat{H} = \sum_i \hat{h}_i + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} + \hat{V}_{NN}$$

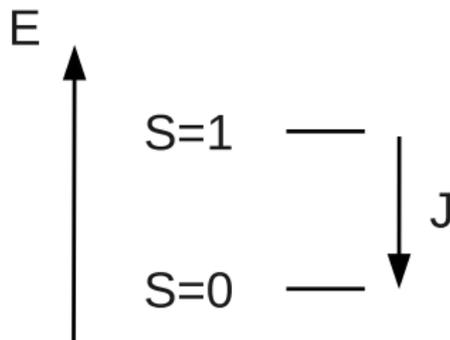
$$E_{\text{réelle}} = c_0^2 E_{HF} + E_{\text{corr}}$$

$$\underbrace{|\Psi\rangle}_{\text{exacte}} = c_0 \underbrace{|\psi_0\rangle}_{HF} + \underbrace{\sum_a \sum_r c_{a,r} |\psi_a^r\rangle}_{\text{mono-excitations}} + \underbrace{\sum_{a,b} \sum_{r,s} c_{ab}^{rs} |\psi_{ab}^{rs}\rangle}_{\text{di-excitations}} + \dots$$

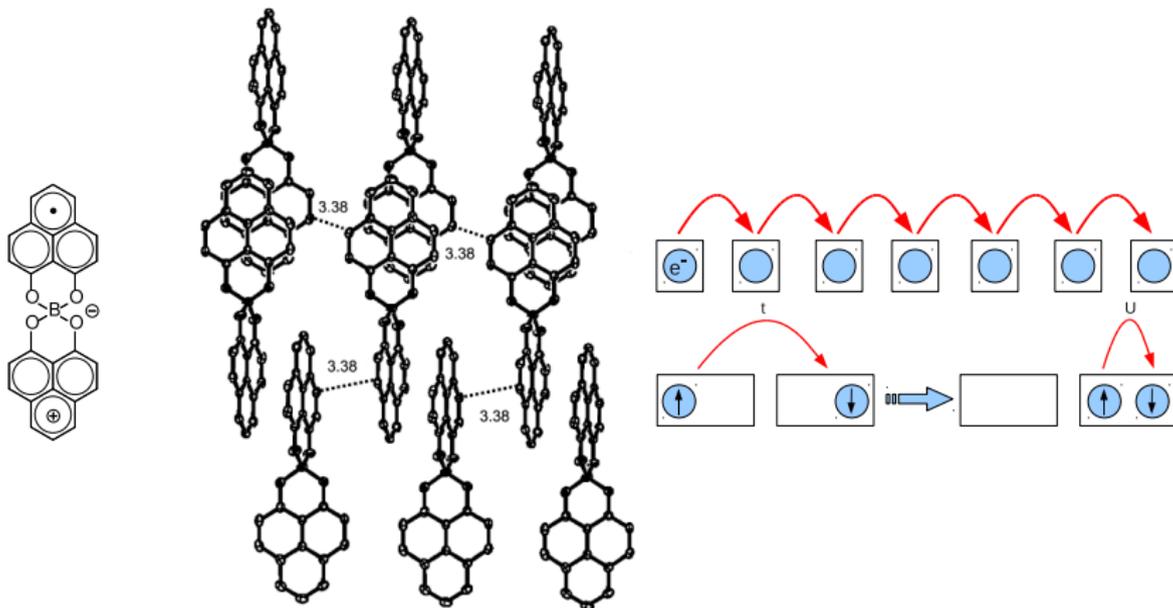
Et le magnétisme dans tout ça ?

$$\hat{H} = -J\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

$$J = 2K_{ab} - \frac{4t_{ab}^2}{U}$$

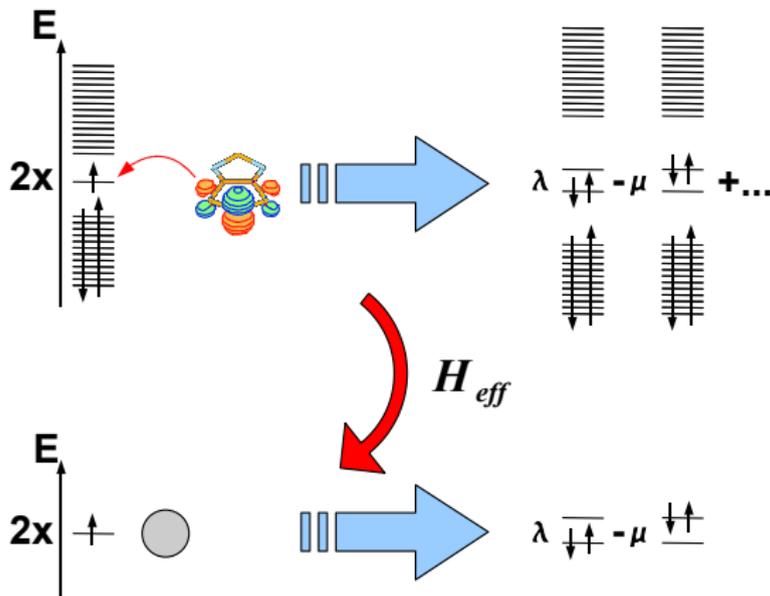


Une mise en pratique pas si facile

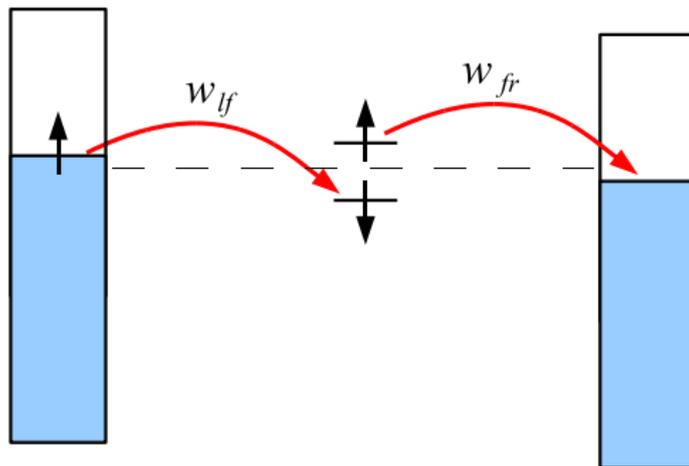


Mandal, S. K. et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2006, **128**, 1982–1994.

Les hamiltoniens effectifs : aller à l'essentiel



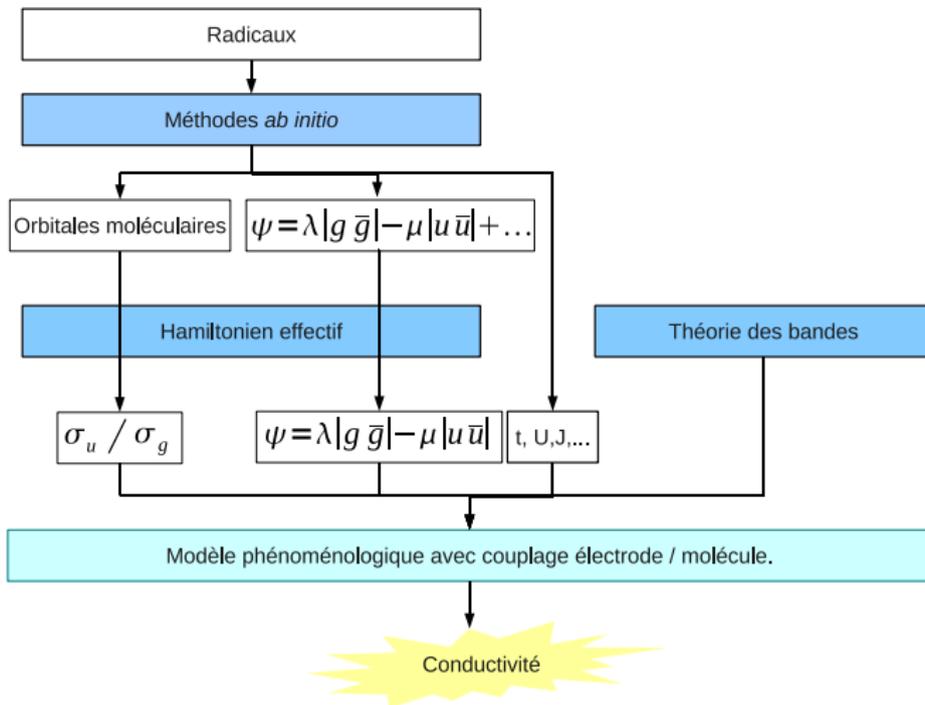
Modèle phénoménologique



$$w_{lf} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k,f} \left| \langle \psi_k | \hat{H} | \psi_f \rangle \right|^2 \rho_k (1 - n_f)$$

Borshch, S.; Chibotaru, L.; Rousseau-Violet, J. *Chem. Phys.* 1998, 229, 223–232.

Démarche envisagée



Merci pour votre attention.

