

soit intrinsèque au système $S = 1$ (ZFS), soit due à la présence d'un couplage entre les centres Fe^{IV} qui créerait des interactions anti-ferromagnétiques à basse température et donc qui diminuerait la valeur de $\chi_{\text{M}}T$ à basse température, soit aux deux effets combinés.

Une simulation a été réalisée par le Dr. Eric Rivière au laboratoire. Le produit $\chi_{\text{M}}T$ en fonction de T peut être décrit à partir de la relation suivante :

$$\chi = \frac{\chi_z + 2\chi_x}{3}$$

où χ_z est la composante parallèle au champ H et χ_x est la composante perpendiculaire au champ H avec :

$$\chi_z = \frac{2Ng_z^2\beta^2}{kT} \frac{\exp(-D/kT)}{1 + 2\exp(-D/kT)}$$

$$\chi_x = \frac{2Ng_x^2\beta^2}{D} \frac{1 - \exp(-D/kT)}{1 + 2\exp(-D/kT)}$$

avec k la constante de Boltzmann, N le nombre d'Avogadro, T la température. Les résultats obtenus sont présentés Figure II-12.

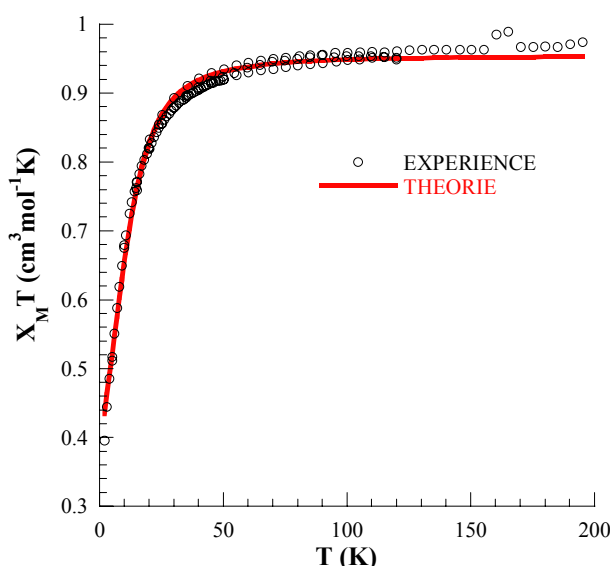


Figure II-12. Comparaison de (°) l'évolution du produit $\chi_{\text{M}}T$ expérimental en fonction de la température pour le complexe $[(\text{TPEN})\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})](\text{PF}_6)_2$ sous forme de poudre de 2 à 200 K et (—) de la simulation obtenue.