

un éclatement quadrupolaire ΔE_Q de 0.87(1) mm/s. Ces paramètres sont caractéristiques d'un complexe Fe^{IV} . Ils sont de plus très proches des paramètres obtenus pour d'autres complexes $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ connus (Tableau III-3).^[9,12,13,16,17] Le déplacement isomérique δ est proche de 0 et l'éclatement quadrupolaire ΔE_Q est proche de 1. Ces données confirment donc l'attribution du complexe à une espèce $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ bas spin ($S = 1$).

Les paramètres obtenus sont identiques à ceux déterminés pour $[(\text{Bn-tpen})\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$ où le ligand Bn-tpen est pentadente.^[12] Cependant, l'éclatement quadrupolaire ΔE_Q obtenu est très différent de celui obtenu pour un autre complexe $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ préparé avec un autre ligand pentadente, $[(\text{L}_5^3)\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$.

Complexes	δ (mm/s)	ΔE_Q (mm/s)	D (cm^{-1})	E/D	A/gN β_N (T)	Réfs.
$[(\text{Bn-tpen})\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$	0.01	0.87	-	-	-	[12]
$[(\text{N4Py})\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$	-0.04	0.93	-	-	-	[12]
$[(\text{TPA})\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$	0.01	0.92	28	0	-23.5, -23.5, -5	[16]
$[(\text{TMC})(\text{CH}_3\text{CN})\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$	0.17	1.24	29	0	-22.5, -18, -3	[9]
$[(\text{L}_5^3)\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$	0.03	1.21	22.5	0.01	-18, -20.6, -0.4	[13,25]
$[(\text{TPEN})\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}]^{2+}$	0.01	0.87	-	-	-	[18]

Tableau II-3. Paramètres Mössbauer déterminés pour quelques complexes $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ non-hémiques.

La simulation des spectres obtenus avec un champ de 3 et 7 T est en cours, en collaboration avec les Dr. Geneviève Blondin et Jean-Louis Oddou. Les paramètres hyperfins n'ont donc pas été déterminés, et notamment la valeur de **D**.

Cependant, le paramètre **D** obtenu pour d'autres complexes $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ connus dans la littérature (Tableau II-3) est à comparer à celui utilisé pour la simulation de l'évolution de $\chi_M T$ en fonction de T pour le complexe $[(\text{TPEN})\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})](\text{PF}_6)_2$. Dans ce cas, le paramètre **D** (+ 28 cm^{-1}) est positif et du même ordre de grandeur que ceux obtenus par Mössbauer pour les complexes $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ non-hémiques.

Les études par Mössbauer et magnétisme semblent donc tendre vers la même conclusion, à savoir que le complexe $[(\text{TPEN})\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})](\text{PF}_6)_2$ peut être décrit comme une espèce $\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}$ bas spin ($S = 1$).