

Exploiter la base de données CSD : vers l'utilisation du "machine learning" pour optimiser les propriétés de complexes à conversion de spin.

Dr Mathieu MARCHIVIE (ICMCB, UMR 5026 CNRS, Univ. Bordeaux, Bordeaux INP, Pessac)

Philippe GUIONNEAU (ICMCB, UMR 5026 CNRS, Univ. Bordeaux, Bordeaux INP, Pessac)

Guillaume CHASTANET (ICMCB, UMR 5026 CNRS, Univ. Bordeaux, Bordeaux INP, Pessac)

Rangsiman KETKAEW (Department of Chemistry, University of Zurich, Zurich, Switzerland)

Yuthana TANTIRUNGROTECHAI (Computational Chemistry Research Unit, Fac. of Science and Tech., Thammasat Univ., Pathum Thani, 12120 Thailand)

Phimphaka HARDING (Department of Chemistry, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima, Thailand)

David HARDING (Department of Chemistry, Institute of Science, Suranaree University of Technology, Nakhon Ratchasima, Thailand)

Abstract

Les composés à Conversion de Spin (CS), principalement basées sur des complexes de métaux de transition en géométrie octaédrique, peuvent basculer entre deux états électroniques différents (Bas Spin, BS) ou (Haut spin, HS) sous l'effet d'un stimulus externe tel que la température, la pression, ou encore l'irradiation lumineuse... Depuis des décennies ces composé à CS suscitent l'enthousiasme de la communauté scientifique en raison de leurs potentielles applications (capteurs, actionneurs, mémoires, pigments intelligents, et bien d'autres...). L'un des points clés, néanmoins, est de synthétiser les complexes appropriés ayant des propriétés optimales et contrôlées. De ce point de vue, la grande versatilité des matériaux moléculaires est un avantage évident mais peu devenir un inconvénient pour identifier correctement les paramètres structuraux pertinents guidant les chimistes vers la conception du matériau aux propriétés attendues.

Depuis plusieurs décennies la communauté scientifique a exploré les relations structure-propriétés de plusieurs familles de complexes à CS et certaines tendances sont maintenant bien établies. Le rôle de la distorsion trigonale de la sphère de coordination, par exemple, a été identifié comme un paramètre clé pour expliquer l'allongement des durées vie des états photo-induits métastables. Afin d'uniformiser le calcul du paramètre de distorsion trigonale ? et de le rendre accessible à une large échelle d'exploration, nous avons récemment proposé un nouveau programme appelé OctaDist permettant d'automatiser ce calcul sur un grand nombre de composés. Dans l'exemple présenté ici nous avons utilisé ce programme pour explorer plus de 6000 complexes de fer issus de la base de données CSD et extraire une signification chimique claire liée au paramètre de distorsion.

Cette nouvelle approche ouvre clairement la voie à l'utilisation des méthodes de "machine learning" conduisant potentiellement à de nouvelles corrélations élargies bien au delà des quelques familles généralement utilisés et combinant plusieurs paramètres ou même de nouveaux descripteurs totalement non envisagés auparavant.