

Propriétés diélectriques d'un molybdate hybride lamellaire : un étude combinée EELS et DFT

Luc Lajaunie, Florent Boucher, Rémi Dessapt et Philippe Moreau

¹ Institut des Matériaux Jean Rouxel, CNRS UMR6502 – Université de Nantes
2 Rue de la Houssinière, BP 32229, 44322 Nantes, France

Les études sur les matériaux photochromes ont été nombreuses au cours de la dernière décennie en raison de leurs applications technologiques potentielles pour le stockage optique de données à haute densité et pour la commutation optique. En particulier, les matériaux hybrides organiques-inorganiques à base de polyoxométallates présentent des propriétés optiques remarquables et des performances photochromiques exaltées à température ambiante par rapport aux oxydes binaires [1] (fort contraste de coloration, photo-responses rapides, grande réversibilité, stabilité thermique). Cependant, la plupart des études sur ces composés sont basées sur des expériences à l'échelle macroscopique (réflectivité diffuse, spectroscopie d'absorption UV-Vis , ...) et ne permettent donc pas de sonder exclusivement les centres responsables du changement de couleur. Des indications précieuses pourraient en fait être obtenues à partir de spectres EELS dans la région des états de valence (Valence Electron Energy Loss Spectroscopy, VEELS). L'interprétation des spectres VEELS n'étant pas simple, une combinaison d'expériences VEELS et calculs DFT est souvent nécessaire pour déterminer correctement la fonction diélectrique à l'échelle nanométrique [2].

Dans ce travail, nous présentons des expériences VEELS avant photo-irradiation sur le composé (N,N'-H₂DMED)[Mo₅O₁₆] (N, N'-H₂DMED²⁺ = N₂C₄H₁₄²⁺), un matériau cristallisé hybride photochrome constitué de plans $2/\infty$ [Mo₅O₁₆]²⁻ liés entre eux par des chaînes organiques [3]. Par ailleurs, les structures de bandes et les propriétés optiques ont été calculées au niveau de la DFT avec les codes WIEN2k et VASP. Les fonctions diélectriques macroscopiques, incluant notamment les effets de champs locaux au niveau Hartree (Random Phase Approximation) ont été obtenues à partir de l'inversion des matrices diélectriques microscopiques. Les résultats sont comparés à ceux obtenus précédemment sur α -MoO₃ qui présente de fortes similitudes structurales avec le composé inorganique (N,N'-H₂DMED)[Mo₅O₁₆] [4].

Références

- [1] T. He and J. Yao, *Prog. Mat. Sci.* **51** 810-879 (2006)
- [2] V. Mauchamp, G. Hug, M. Bugnet, T. Cabioch and M. Jaouen, *Phys. Rev. B* **81** 035109 (2010)
- [3] R. Dessapt, D. Kervern, M. Bujoli-Doeuff, P. Deniard, M. Evain and S. Jobic, *Inorg. Chem.*, **49**, 11309-11316 (2010)
- [4] L. Lajaunie, F. Boucher, R. Dessapt and P. Moreau, *Phys. Rev. B* **81** 115141 (2013)