

Mésomérie et Spinmérie : Emergence de Qubits

Pr. Vincent ROBERT

Laboratoire de Chimie Quantique, UMR 7177 Institut de Chimie de Strasbourg/CNRS/Université de Strasbourg

Partant de la construction d'une fonction d'onde, l'intérêt se porte sur des composés impliquant un ion de métal de transition à transition de spin dans le champ de ligands radicalaires.

De cette association émergent des comportements inusuels que nous avons analysés par des calculs *ab initio* et la résolution d'Hamiltoniens modèles. Par analogie avec la mésomérie, l'idée de spinmérie (spinmerism) apparaît dans ce type de complexes de coordination.

La co-existence d'états de spin sur un ion métallique suggère la manipulation de tels objets pour l'encodage d'information.