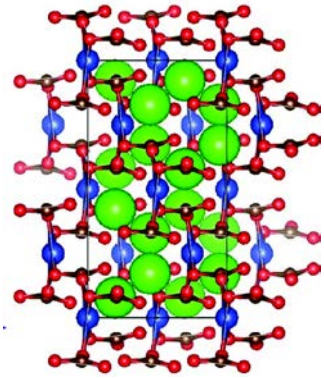
ECOLE DOCTORALE DES SCIENCES CHIMIQUES - ED 040

Proposition de sujets de thèse pour la rentrée 2024 / 2025

Titre de la thèse	A COORDINATION CHEMISTRY APPROACH TO UNDERSTANDING CHIRALITY INDUCED SPIN-SELECTION
Descriptif du sujet (10 lignes maximum)	Molecular electronics deals with making nano-electronic devices in which the charge transport occurs across a single molecule or a single layer of molecules to perform simple or complex electronic functions. In particular, the charge transport through chiral molecules can become spin-dependent, but this effect called chirality induced spin-selection is poorly understood. In this project, we will design rational series of chiral coordination complexes to understand how the molecular properties (chirality, magnetism, electronic structure) affect the occurrence and the magnitude of the CISS effect. This project will combine synthetic chemistry to prepare the complexes, and surface science to prepare and characterize the monolayers including the assessment of their morphology and their spin- and chirality-dependent electronic properties.
Compétences souhaitées (nom du DEA, ou MASTER, etc…)	Master or Engineer in Chemistry/Materials with good synthetic skills
Financement (connu ou espéré)	Mérite, ANR, Several proposals currently under review.
Directeur de la thèse 1	Elizabeth Hillard (HDR)
E.mail du directeur de thèse 1	elizabeth.hillard@icmcb.cnrs.fr
Tél du directeur de thèse 1	05 40 00 25 44
Laboratoire d'accueil 1	ICMCB
Directeur du Laboratoire 1	Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 1	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC
Co-encadrant de la thèse 2	Mathieu Gonidec
E.mail du Co-encadrant de thèse 2	Mathieu.gonidec@icmcb.cnrs.fr
Tél du Co-encadrant de thèse 2	05 40 00 26 82
Laboratoire d'accueil 2	ICMCB
Directeur du Laboratoire 2	Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 2	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC

Titre de la thèse	BEYOND USUAL STRUCTURE-PROPERTIES RELATIONSHIPS IN MOLECULAR CRYSTALS: QUANTIFIYING INTER-ATOMIC INTERACTIONS
Descriptif du sujet (10 lignes maximum)	Structure-properties relationship is a crucial step in condensed matter chemistry. Very recently, some computational tools allowed the very first 3D mapping of intermolecular interactions in switchable molecular crystals, constituting a huge step toward the understanding and control of the macroscopic properties and the design of materials for further integration in devices. The PhD student will carry out the following actions (which will be taught): *crystal growth, experimental crystallography (mainly X-ray diffraction) to determine accurate crystal structures and pioneering computational calculations on the determined structures*. The latter will be done in collaboration with international (UK) and national (Nancy) colleagues. The investigated compounds might be spin-crossover compounds, molecular conductors or hybrid organic-inorganic crystals.
Compétences souhaitées (nom du DEA, ou MASTER, etc…)	Master of chemistry or physics
Financement (connu ou espéré)	Mérite, selon opportunités
Directeur de la thèse 1	Mathieu Marchivie (ADT)
E.mail du directeur de thèse 1	mathieu.marchivie@icmcb.cnrs.fr
Tél du directeur de thèse 1	05 40 00 66 37
Laboratoire d'accueil 1	ICMCB
Directeur du Laboratoire 1	Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 1	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC
Directeur de la thèse 2	Philippe GUIONNEAU (HDR)
E.mail du directeur de thèse 2	Philippe.guionneau@icmcb.cnrs.fr
Tél du directeur de thèse 2	05 40 00 25 79
Laboratoire d'accueil 2	ICMCB
Directeur du Laboratoire 2	Dr. Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 2	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC

Titre de la thèse	MOLECULAR (MULTI)FERROICS BASED ON COPPER CARBONATES
Descriptif du sujet **(10 lignes maximum)**  *The structure of KCCO viewed along the b crystal axis.*	Magneto-electric multiferroics, possessing both a spontaneous polarization and magnetization are extremely rich materials[1]. Potassium cupricarbonate (KCCO) is a serious candidate to belong to his family [2] and preliminary results from our team show that replacing the K^+ by an organic cation significantly improve the magnetic properties. Since, such organic cations often contribute to ferroelectric behavior due to their intrinsic polarity and disorder-order transitions, the project targets the elaboration of new cupricarbonates with organic cations such as guanidinium, formamidinium, imidizolium or alkyl or aryl ammonium to compare with an in-depth study of the ferroic behavior of KCCO. These materials will be synthesized using bench chemistry and sintered using Cool-Spark Plasma Sintering [2]. The ceramics will be characterized by powder X-ray diffraction and scanning electron microscopy, magnetic and magneto-electric measurements. 1. Spaldin, N.A. Multiferroics beyond Electric-Field Control of Magnetism. *Proc. Roy. Soc. A:* **2020**, *476*, 20190542, doi:10.1098/rspa.2019.0542. 2. Beauvoir, T.H. de; Sangregorio, A.; Cornu, I.; Josse, M. Synthesis, Sintering by Cool-SPS and Characterization of $A_2Cu(CO_3)_2$ (A = K, Na): Evidence for Multiferroic and Magnetoelectric Cupricarbonates. *Dalton Trans.* **2020**, *49*, 7820–7828, doi:10.1039/D0DT00814A.
Compétences souhaitées **(nom du DEA, ou MASTER, etc…)**	Master or Engineer in Physical Chemistry or Materials Good level (at least B2) of French or English
Financement **(connu ou espéré)**	Mérite, selon opportunités
Directeur de la thèse 1	Dr. Elizabeth HILLARD (HDR)
E.mail du directeur de thèse 1	elizabeth.hillard@icmcb.cnrs.fr
Tél du directeur de thèse 1	05 40 00 25 44
Laboratoire d'accueil 1	ICMCB
Directeur du Laboratoire 1	Dr. Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 1	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC
Directeur de la thèse 2	Michaël JOSSE (HDR)
E.mail du directeur de thèse 2	michael.josse@icmcb.cnrs.fr
Tél du directeur de thèse 2	05 40 002697
Laboratoire d'accueil 2	ICMCB
Directeur du Laboratoire 2	Dr. Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 2	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC

Titre de la thèse	IMPLEMENTATION OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE IN THE DEVELOPMENT OF THE NEXT GENERATION OF PHOTOSWITCHES
Descriptif du sujet (10 lignes maximum)	Switching of electronic properties is of tremendous importance for future applications in molecular electronic. Spin crossover (SCO) coordination complexes are envisioned for such applications but there is a strong need to understand and control the switching temperatures, the photoswitching efficiency, the life-time of photo-induced state... Some structural parameters are proposed to be preponderant on such properties. However, a clear investigation of the huge database relating experimental switching data and structural information is needed. We propose to apply some active learning tools to such investigation with the target to drive the further chemical synthesis are high performance materials.
Compétences souhaitées (nom du DEA, ou MASTER, etc…)	Master or Engineer in Chemistry/Materials/Physics
Financement (connu ou espéré)	Mérite, selon opportunités
Directeur de la thèse 1	Guillaume Chastanet (HDR)
E.mail du directeur de thèse 1	Guillaume.chastanet@icmcb.cnrs.fr
Tél du directeur de thèse 1	05 40 00 83 23
Laboratoire d'accueil 1	ICMCB
Directeur du Laboratoire 1	Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 1	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC
Directeur de la thèse 2	Cédric Desplanches (HDR)
E.mail du directeur de thèse 2	Cedric.desplanches@icmcb.cnrs.fr
Tél du directeur de thèse 2	
Laboratoire d'accueil 2	ICMCB
Directeur du Laboratoire 2	Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 2	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC

Titre de la thèse	MOLECULAR CRYSTALS UNDER HIGH PRESSURE
Descriptif du sujet (10 lignes maximum)	The project aim to reveal and understand the structure-properties relationships of molecular compounds under pressure with a focus, not exclusive, on the spin-crossover (SCO) systems of interest for applications in barocaloric refrigeration. The crucial determination of reliable phase diagram under pressure is an experimental challenge, often requiring synchrotron beam and pioneer investigations. Getting accurate data leading to bulk moduli and anisotropic volume variations but also microstructural information such as mechanical resilience appears presently a hot topic. The PhD project aims to address the above challenges through a wide exploration of the High-Pressure crystallography of molecular crystals. Ref.: Elodie Tailleur, Mathieu Marchivie, Jean-Paul Itié, Patrick Rosa, Nathalie Daro and **Philippe Guionneau***. *Chem. Eur. J.* (2018), 24, 14495 – 14499. "Pressure-Induced Spin-Crossover Features at Variable Temperature Revealed by In Situ Synchrotron Powder X-ray Diffraction"
Compétences souhaitées (nom du DEA, ou MASTER, etc…)	MASTER of Physical Chemistry
Financement (connu ou espéré)	Mérite, ANR under review
Directeur de la thèse 1	Mathieu Marchivie (ADT)
E.mail du directeur de thèse 1	mathieu.marchivie@icmcb.cnrs.fr
Tél du directeur de thèse 1	05 40 00 66 37
Laboratoire d'accueil 1	ICMCB
Directeur du Laboratoire 1	Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 1	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC
Directeur de la thèse 2	Philippe GUIONNEAU (HDR)
E.mail du directeur de thèse 2	Philippe.guionneau@icmcb.cnrs.fr
Tél du directeur de thèse 2	05 40 00 25 79
Laboratoire d'accueil 2	ICMCB
Directeur du Laboratoire 2	Dr. Cyril Aymonier
Adresse du Laboratoire 2	87 av du Dr. A. Schweitzer, 33600 PESSAC