

<u>Titre de la thèse</u>	BEYOND USUAL STRUCTURE-PROPERTIES RELATIONSHIPS IN MOLECULAR CRYSTALS: QUANTIFYING 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): <i>crystal growth, experimental crystallography (mainly X-ray diffraction) to determine accurate crystal structures and pioneering computational calculations on the determined structures.</i> 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