

**Laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisations – CRM2 (UMR 7036),
Université de Lorraine**

Proposition de sujet de thèse - septembre 2012

Titre : Modélisation expérimentale des matériaux magnétiques moléculaires à l'échelle subatomique : études combinées par diffraction X, neutrons et diffusion Compton.

Notre laboratoire possède une expertise reconnue dans le domaine des études de densités électroniques obtenues à partir d'expériences de diffraction de rayons X à haute résolution appliquées à divers cristaux (organiques, minéraux, biologiques, complexes moléculaires, ...). L'un de nos axes de recherche porte actuellement sur l'étude des matériaux magnétiques moléculaires pour réaliser des mémoires moléculaires pour lesquelles la taille de l'élément porteur de l'information est l'échelle nanométrique (une molécule).

Dans la continuité d'un précédent projet ANR (CEDA, 2007-2010) nous développons un modèle et le logiciel correspondant permettant de construire un modèle électronique unique reposant sur des expériences de diffraction de différentes natures (diffractions de rayons X (accès à la densité de charge), de neutrons et de neutrons polarisés (accès à la densité de spin). Ce programme (Mollynx) écrit en collaboration avec B. Gillon, CEA Saclay, UMR 12 et J.M Gillet, Ecole Centrale de Paris, UMR 8580) autorise désormais une description fine de la distribution de densité de charge et de spin (élément diagonal de la matrice densité) des composés magnétiques moléculaires (M. Deutsch, Thèse UHP 2009-2012). Notre projet est dans un premier temps d'étendre ce modèle aux matériaux inorganiques puis, dans un second temps, d'apporter des informations sur la dynamique des électrons à partir de la diffusion Compton. Cette dernière permettra la modélisation des électrons les plus délocalisés et donnera accès à un modèle original des interactions responsables des comportements magnétiques à l'échelle atomique (Compton magnétique), étape nécessaire pour concevoir de nouvelles mémoires à base moléculaire moins coûteuses en énergie (synthèse, développement).

Formation: Ce sujet comporte un important volet fondamental et de programmation (logiciel) à mener parallèlement à des campagnes de mesures expérimentales au laboratoire et sur grands équipements scientifiques en France, au Japon et aux USA (centres synchrotrons et de neutrons). C'est une occasion pour approfondir les connaissances en cristallographie, magnétisme, physique et chimie du solide en général tout en découvrant les méthodes de recherche (et de travail) aux USA et au Japon. Le candidat doit posséder une très bonne formation en physique ou chimie physique ; une connaissance du langage FORTRAN sera appréciée.

Title: Experimental modeling of magnetic materials at the molecular subatomic scale: combined studies using X-rays diffraction, neutrons and Compton scattering.

Our laboratory has a recognized expertise in the field of electron densities studies obtained from X-ray diffraction experiments at high resolution applied to various crystals (organic, inorganic, biological, molecular complexes ...). One of our research fields currently focuses on the study of molecular magnetic materials applied to magnetic memories for which the molecular size of the magnetic element is in the nanoscale size (one molecule).

In continuation of a previous ANR (CEDA, 2007-2010) we develop a model and the corresponding software to build an unique electronic model based on diffraction experiments of various kinds: X-rays

diffraction (access to the charge density), neutrons and polarized neutron diffractions (access to the spin density). Our program (Mollynx, written in collaboration with B. Gillon, CEA Saclay, UMR 12 and JM Gillet, Ecole Centrale de Paris, UMR 8580) now allows for a detailed description of the charge and spin distributions (diagonal element of the density matrix) in molecular magnetic compounds (M. Deutsch, PhD UHP 2009-2012). Our project is first to extend this model to inorganic materials and then, to provide information on the dynamics of electrons from the Compton scattering.. This will allow for the modeling of delocalized electrons and provide access to an original model of the interactions that are responsible for the magnetic behavior at atomic scale (magnetic Compton), a necessary step to develop new molecular-based memories less expensive in energy (synthesis, development...).

Training: This subject has strong fundamental and programming (software) components in conjunction with experimental measurements in the laboratory and in large scientific facilities in France, Japan and the United States (synchrotrons and neutrons centers). This is an opportunity to extend knowledge in crystallography, magnetism, physics and chemistry of solids in general while learning about research (and working) methods in the United States and Japan. The candidate must have a very good training in physics or physical chemistry, knowledge of FORTRAN will be appreciated.

Encadrants : Prof. M. Souhassou et Dr. N. Claiser (MCF), CRM2, UMR CNRS 7036.
Université de Lorraine - Campus sciences, entrée 3B.
Mohamed.Souhassou@crm2.uhp-nancy.fr
Tel : 03.83.68.48.72