

## **Effet de pression et irradiation sur les propriétés de composés photoisomérisables à transition de spin**

Directeur de thèse : SCHANIEL Dominik

Co-directeur de thèse : DEUTSCH Maxime

Contact : [dominik.schaniel@univ-lorraine.fr](mailto:dominik.schaniel@univ-lorraine.fr)

Contact : [maxime.deutsch@univ-lorraine.fr](mailto:maxime.deutsch@univ-lorraine.fr)

### **Contexte scientifique**

La détermination et l'analyse de l'organisation structurale d'un matériau est un prérequis à toute compréhension de ses propriétés physiques ou chimiques, l'étude des relations structure-propriétés est ainsi une étape importante en science des matériaux afin d'améliorer les propriétés ou d'en faire émerger de nouvelles. La diffraction des rayons X (DRX) est la technique incontournable dans cette démarche. Au-delà de l'analyse structurale de matériaux à l'état fondamental, il est maintenant possible d'étudier les changements structuraux de matériaux soumis à une irradiation lumineuse par photocristallographie (diffraction des rayons X sous irradiation lumineuse in situ). Cette approche permet en particulier de déterminer des changements de liaisons intra/inter-moléculaires comme par exemple l'isomérisation de ligands ou des transitions de phase photo-induites. L'application de pression sur un cristal représente un autre stimulus externe qui permet de changer les propriétés d'un matériau en modifiant de manière « propre » sa structure, c'est à dire en altérant les distances inter-atomiques et les angles de liaison sans changer la nature chimique des atomes la composant, cette application de pression peut induire des transitions de phase, magnétique et/ou électrique. La DRX in situ permet de remonter aux origines structurales de tels transitions induites par l'application d'une pression. Au CRM2 nous disposons d'un dispositif qui permet de mesurer la DRX sous pression et la DRX sous irradiation lumineuse.

### **Objectif de la thèse**

L'objectif de cette thèse est de combiner les deux contraintes (pression/irradiation) pour étudier des matériaux répondant aux deux stimuli et ainsi établir les relations structure – propriétés en fonction de la pression et de l'irradiation. Pour atteindre cet objectif nous prévoyons deux volets :

- un premier méthodologique et instrumental pour mettre en place des dispositifs permettant des mesures de DRX et de spectroscopie infrarouge (IR) in situ simultanément sous application de pression et irradiation lumineuse.
- Le deuxième volet vise l'application de cette méthodologie sur des matériaux qui présentent une réponse double, sous pression et irradiation.

Nous nous focalisons sur des matériaux de type Fer Nitroprussiate à piliers organiques dont le choix permet une grande souplesse et une grande diversité structurale

Cette famille de composés présente des propriétés intéressantes, notamment un comportement cinétique atypique lors de la transition de spin (SCO) induite par la température : on observe un élargissement de l'hystérèse quand on diminue la vitesse de refroidissement/chauffage [1]. Nous proposons une étude combinée DRX et IR combinant pression et irradiation afin d'éclairer les mécanismes structuraux en jeu. Ainsi, en explorant le diagramme pression – irradiation – température on pourra donc établir les relations structure – propriétés en identifiant les différents mécanismes à l'œuvre.

### **Travail de la personne recrutée :**

- Développement instrumental
- Synthèse des cristaux et sélection de ceux présentant les meilleures réponses.
- Etude par diffraction X et spectroscopie infrarouge sous pression/ irradiation lumineuse des composés choisis.
- Traitement des données et restitution des résultats sous forme oral et écrite.

### **Références :**

[1] Y. Plasencia et al., J. Phys. Chem. Sol. 150, 109843 (2021). Y. Avila et al., Eur. J. Inorg. Chem. 24, e202200252 (2022).



UNIVERSITÉ  
DE LORRAINE



C2MP



## Bourse de thèse (3 ans)

Financé par Université de Lorraine (>2100 € brut/mois)

Application ouverte de : Février 21 – Avril 14

Pré-sélection et entretiens : Avril – Mai 2024

Début de la thèse : Octobre 2024

### Profil du candidat :

- M2 en physique, chimie ou sciences de matériaux
- Compétences en cristallographie, diffraction de rayons X et spectroscopies
- Curiosité scientifique, autonomie, gout pour l'expérimentation et le développement instrumental, bonne communication et gout pour le travail en équipe.

### Application : Envoyez-nous

- CV et lettre de motivation,
- Relevés des notes M2, M1, L3
- Deux lettres de recommandation (responsable du Master, encadrants stages, ...) ou le contact de deux personnes pouvant servir de références.

### Processus de sélection :

Etape 1 : pré-sélection sur dossier

Etape 2 : audition par un jury (encadrants de thèse + experts externes) sous forme d'entretien