

ENCADREMENT

J'ai encadré ou co-encadré **1 étudiante de L2, 1 étudiant le L3 Parcours Spéciaux (projet), 4 étudiant(e)s de M1 chimie, 2 étudiant(e)s de M1 physique, 12 étudiant(e)s de M2 chimie, 3 étudiants de M2 physique et 2 étudiants en thèse**. J'ai aussi suivi de près les activités de recherche de **2 autres étudiants en thèse** du groupe SEM.

Si on exclu les étudiant(e)s encadrés récemment dont les travaux n'ont pas encore donné lieu à des publications, tous les étudiant(e)s -hormis l'étudiante en L2 pour laquelle seul un travail de bibliographie sur les POM était possible et une étudiante de M1- ont cosigné au moins un article à l'issue de leur travail avec moi.

Concernant les POM, **Annaël Brunet** a effectué un stage de L2 de 4 semaines. C'est en partie grâce à elle que je me suis rendu compte de l'étendue des domaines d'utilisation des POM; **Ondrej Svoboda** et **Yoan Masaro** ont travaillé sur le V_{14} ; **Thomas Dupleix** et **Maxime Arnal** ont travaillé sur le V_{15} ; les résultats obtenus sont intéressants mais ce travail demande à être poursuivi. Enfin, une longue collaboration avec **Alejandro Gaita-Ariño** a commencé durant sa thèse, s'est poursuivie lors de son post-doctorat de 5 mois à Toulouse et dure encore.

Marie-Laure Bonnet et **Florence Turpin** ont effectué leur stage sur l'étude de composés à effet LIESST.

Tim Krahl a travaillé sur un composé à transition de spin.

Thibault Térencio a travaillé sur la mise en évidence de l'importance des mécanismes de polarisation de spin dans le couplage à longue distance au travers de chaînes organiques.

Lionel Lacombe et **Bartélémy Pradines** ont cherché à élucider la structure électronique du composé NiGa_2S_4 .

Luis Escalera, étudiant du Master 2 de chimie TCCM de l'Université de Valencia, est venu effectuer un stage de 3 mois avec moi pour apprendre les techniques d'extraction des paramètres d'anisotropie magnétique. Nous nous sommes plus particulièrement intéressés au couplage entre les phonons et l'anisotropie magnétique dans des complexes du Mn^{2+} et du Cu^{2+} . Le but de ce travail est de quantifier l'une des sources de décohérence affectant les systèmes proposés comme « calculateurs quantiques ».

La stage de **Lalita Uribe-Ordoñez** a porté sur une tentative d'étendre aux systèmes magnétiques inorganiques de travail d'amélioration de la qualité des OM magnétiques que nous avons développé sur des systèmes organiques. Ces recherches demandent encore pas mal de travail.

J'ai aussi encadré les travaux de stage de **Rémi Maurice**, **Florian Koprowiak**, **Benjamin Cahier**, **Julie Baumard Mohammed-Amine Bouammali** et **Rana Hamze** sur l'origine microscopique de l'anisotropie magnétique et aidé à la thèse de **Roland Bastardis**.

Ma collaboration avec **Léo Dontot** est assez différente dans la mesure où nous avons étudié les mêmes molécules (monocation de $(\text{bz})_2$ ou $(\text{pyr})_2$) avec par des approches différentes (DFTB-CI / CASPT2).

Enfin, **Corentin Boilleau** et **Vijay Gopal Chilkuri** ont effectué leur thèse sous ma co-direction. La plus grosse partie du travail de Corentin a porté sur l'origine des mécanismes à l'origine du phénomène LIESST. Nous avons consacré à ce travail énormément d'énergie, de temps humain et machine, avons beaucoup investi, beaucoup compris mais au final peu publié. Une source de réconfort est que ce travail a été apprécié et largement cité. Corentin Boilleau s'est aussi impliqué dans des travaux complètement différents, à savoir la possibilité d'extraire à partir de calculs DFT, et donc mono-déterminantaux, l'intensité de mécanismes subtils dans des composés de spins $S=1$ ou à double échange. Vijay a développé deux approches complémentaires pour mieux comprendre le mécanisme de double échange. Il a montré par des calculs DFT la possibilité que des molécules purement organiques de type graphénique présentent un état fondamental de spin non minimal quand elles sont ionisées (je n'ai pas encadré ce travail). Il a aussi développé une approche basée uniquement

sur un hamiltonien modèle de double échange et perfectionné un code qu'il a abondamment exploité. Il a mis ainsi en évidence l'importance de la topologie de systèmes 0D dans l'expression du double échange. Il a de plus fourni d'importantes informations sur le comportement de systèmes linéaires quand ils sont soumis à un champ magnétique et en particulier sur leur propriété de transport électrique.

Liste des étudiants

Stage de L2 (4 semaines) :

2008 : Annaël Brunet (100%).

Projet de L3 Parcours Spéciaux (un semestre, à distance) :

2015 : Maxime Arnal (100%).

Projet de M1 Chimie (un semestre) :

2016 : Mohammed-Amine Bouammali (33%, 1 article).

Stage de M1 Chimie (2 mois) :

2009 : Ondrej Svoboda (50%, 2 articles) ;

2016 : Mohammed-Amine Bouammali (33%, 1 article) ;

2017 : Léa Brooke (33%), Sérigne Sarr (50%).

Stage de M1 Physique (8 semaines) :

2013 : Thomas Duplex (100%) ;

2015 : Julie Baumard (50%, 1 article).

Stage de M2R Chimie (5 mois) :

2006 : Marie-Laure Bonnet (50%, 1 article), Benoît Corretja (50%, 1 article) ;

2007 : Florence Turpin (50%) ;

2008 : Rémi Maurice (50%, 1 article) ;

2010 : Thibaut Terencio (33%, 1 article) ;

2011 : Tim Krah (50%, 1 article) ;

2014 : Florian Koprowiak (50%, 1 article), Benjamin Cahier (50%, 1 article) ;

2016 : Rana Hamze (33%) ;

2017 : Mohammed-Amine Bouammali (33%, 1 article).

Stage de M2R Physique (4 mois) :

2007 : Yoan Masaro (50%, 1 article) ;

2013 : Lionel Lacombe (50%) ;

2014 : Bartélémy Pradines (50%, 1 article).

Stage de M2R Erasmus-Mundus (3-4 mois) :

2013 : Lalita Uribe-Ordonez (50%) ;

2015 : Luis Escalera-Moreno (100%).

Co-direction de thèse :

2007-2011 : Corentin Boilleau (50%, 4 articles) ;

2012-2015 : Vijay Gopal Chilkuri (50%, 3 articles, 2 en préparation) ;

2017-2020 : Mohamed-Amine Bouammali

ATER (1 an)

2008 : Pierre Labèguerie (2 articles) ;

Thèse puis post-doctorant (6 mois) :

2001-2002, 2005 : Alejandro Gaita-Ariño (7 articles).