

Energie de cohésion dans des systèmes moléculaires cristallins

Encadrant : Dr. Emmanuel Aubert.

emmanuel.aubert@crm2.uhp-nancy.fr

Encadrant (HdR) : Pr. Enrique Espinosa

enrique.espinosa@crm2.uhp-nancy.fr

Laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisation (CRM2)

Institut Jean Barriol, Nancy-Université

www.crm2.uhp-nancy.fr

Dans ce projet nous proposons l'étude de l'énergie de cohésion dans des systèmes moléculaires à l'état cristallin qui présentent notamment des interactions halogènes, motivée par l'importance de cette propriété par exemple dans des problématiques liées à la pharmacologie (*e.g.* dissolution efficace de principes actifs) ou à l'adsorption sélective dans des matériaux poreux. Cette énergie de cohésion résulte de l'ensemble des interactions s'exerçant entre les entités (molécules/ions); il s'agira alors de rationaliser cette propriété au regard des caractéristiques des interactions intermoléculaires présentes dans le matériau.

Les principales méthodes d'investigation seront la diffraction sur monocristal (et poudre) et les calculs de chimie quantique qui permettront de caractériser les interactions (topologie de la densité électronique et du potentiel électrostatique). Les matériaux étudiés présenteront en particulier des propriétés d'isostructure et/ou de polymorphisme, comme par exemple ceux formés par des nouvelles bipyridines halogénées (Fig. 1) récemment obtenues, facilitant ainsi l'analyse comparative entre matériaux.

Ce projet ouvre également la voie vers la création de nouveaux matériaux poreux dans le cadre de réseaux supramoléculaires métal-organique, puisque l'interaction halogène-métal peut influencer la coordination métal-azote dans ce genre de composés.

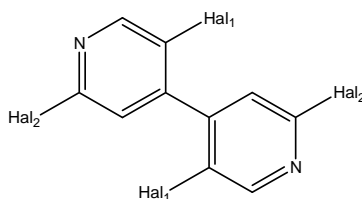


Fig. 1 : Exemples de bipyridines [4,4'] isostructurales

(Hal1, Hal2) = (Br, Cl), (I, Br), (Br, Br)

Les modulations des structures des bipyridines seront effectuées en collaboration avec Dr. V. Mamane (équipe SOR, SRSMC, IJB) et les études cristallographiques et théoriques bénéficieront des plates-formes de l'Institut Jean Barriol.