

Proposition de stage pour le M1

Titre : Détermination et analyse d'une structure cristalline par diffraction des rayons X sur monocristal d'un composé de la famille des benzamides - analyse des interactions intermoléculaires

Lieu du stage : Laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisations, UMR CNRS 7036 Faculté des Sciences et Techniques.

Entrée 3B, 3^{ème} étage.

Encadrants : Aubert Emmanuel - emmanuel.aubert@univ-lorraine.fr

Espinosa Enrique - enrique.espinosa@univ-lorraine.fr

Le sujet de stage proposé est une initiation au monde de la recherche à travers la détermination et l'analyse d'une structure cristalline par diffraction des rayons X sur monocristal. Cette technique expérimentale permet de déterminer l'agencement spatial des atomes et molécules qui composent la matière cristalline (inorganique, organique, macromoléculaire) et donc révèle les interactions interatomiques et intermoléculaires en lien avec des propriétés du matériau.

Le composé étudié sera un dérivé de benzamides, molécules à la base d'ingrédients pharmaceutiques.

Le déroulement du stage comprendra les parties suivantes :

- Recherche bibliographique sur le composé étudié via l'utilisation de bases de données informatisées : l'accent sera mis sur l'importance de placer l'étude dans le contexte scientifique général (état d'avancement des recherches dans d'autres groupes, croisement de résultats provenant d'études de natures diverses, ...).
- Réalisation d'une mesure de diffraction X monocristal sur le composé choisi : importance des différents paramètres expérimentaux (taille du cristal, température, longueur d'onde...), optimisation des conditions de collecte.
- Traitement statistique des données de diffraction : extraction des intensités diffractées mesurées à l'aide d'un détecteur bidimensionnel (capteur CCD), analyse statistique des intensités.
- Résolution et affinement de la structure cristalline : définition d'un modèle atomique pour le cristal et procédure d'affinement par moindres carrés des paramètres du modèle grâce aux données (Intensités diffractées) expérimentales.
- Analyse de la structure (utilisation de bases de données cristallographiques) : liens entre distance de coordination et nombre de premiers voisins, interactions entre atomes, nature des liaisons chimiques.
- Vers la modélisation des propriétés électrostatiques : observation de la redistribution des électrons de valence entre deux atomes (ou molécules) qui interagissent dans le cristal.

Les différentes parties de ce stage permettront l'initiation des étudiants accueillis à la vie en laboratoire et à la recherche. Elles donneront également aux stagiaires l'occasion de mettre en œuvre les connaissances académiques acquises tout au long de leur scolarité, et de les compléter, en particulier dans les domaines de la diffraction, de l'informatique et de l'analyse statistique de données.