

Molecular crystals



Niveau d'étude
BAC +5



Composante
UFR Sciences
et Techniques

En bref

- > **Langue(s) d'enseignement:** Français
- > **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

Présentation

Description

Specificity of molecular solids

Thermodynamic of organic solids with their specific behaviour due to their chemical nature (hydrogen bonds, large possibility to cocrystallize, ability to polymorphism, interaction with solvent of crystallization).

By a permanent round trip between theory and examples coming from research experiences, students will be able to understand concretely the utility of phase diagrams for the rationalization of crystallization processes of organic solids and for their evolution during ageing or storage.

Polymorphism, salts, solvates, cocrystals, host-guest associations ad hybrids. Dynamic and static disorder. Entropy of fusion. Chiral discrimination in the solid state. Desolvation mechanisms. Order – disorder transitions. Destructive – reconstructive transitions. Displacive transitions. Solid solutions and their consequences on purification by crystallization. Preferential crystallization and preferential enrichment

Characterization of molecular crystals

- *Second harmonic generation spectroscopy. Principle of nonlinear optics, application to solid state characterization (phase diagram, polymorphic transitions, crystallinity, ...)*
- *Granulometry. Impact of particle size on the fabrication process, particle size distribution, experimental methods, application)*
- *Nucleation*
- *Crystal structure resolution of crystalline solids from X-ray diffraction data on polycrystalline or single crystalline samples together with the analysis of the obtained crystal structures. After a recall on the theory of X-ray diffraction by a crystal lattice, the methods*

used to solve crystal structures from single crystal and powder X-ray diffraction data will be described in detail. The methods of analysis of those crystal structures in terms of molecular packing and intermolecular interactions will be described as well.

Research project

Work group on a specific subject extracted from research context. Presence in the laboratory to have access to experimental apparatus. Proposition of an oral presentation at the end.

Pré-requis obligatoires

- Connaissances des diagrammes de phases unaires, binaires et bases sur les ternaires.
 - Connaissances en caractérisation des phases solides (DSC, XRD, microscopie)
 - Connaissances étendues en cristallographie : groupes d'espace et sous-groupe d'espace. Diffraction des rayons X sur monocristal.
 - Avoir des notions sur l'exploitation d'un diagramme de diffraction X (détermination des paramètres de maille et du groupe d'espace)
 - Notions de base de l'optique du 1^{er} cycle
 - *Phase diagrams: unary, binary and basics of ternary systems.*
 - *Solid-state characterization (DSC, XRD, microscopy)*
 - *Extended knowledge in crystallography up to space groups and sub space groups. Single crystal X-ray diffraction.*
 - *Basic notion on XRay diffractogram exploitation : (determination of lattice parameter and space group)*
 - *Basic knowledge in optic (1st cycle)*
-

Contrôle des connaissances

Contrôle continu

Compétences visées

Se servir de façon autonome des outils numériques avancés pour un ou plusieurs métiers ou secteurs de recherche du domaine

Mobiliser des savoirs hautement spécialisés, dont certains sont à l'avant-garde du savoir dans un domaine de travail ou d'études, comme base d'une pensée originale

Développer une conscience critique des savoirs dans un domaine et/ou à l'interface de plusieurs domaines

Résoudre des problèmes pour développer de nouveaux savoirs et de nouvelles procédures et intégrer les savoirs de différents domaines

Apporter des contributions novatrices dans le cadre d'échanges de haut niveau, et dans des contextes internationaux

Identifier, sélectionner et analyser avec esprit critique diverses ressources spécialisées pour documenter un sujet et synthétiser ces données en vue de leur exploitation

Communiquer à des fins de formation ou de transfert de connaissances, par oral et par écrit, en français et dans au moins une langue étrangère

Gérer des contextes professionnels ou d'études complexes, imprévisibles et qui nécessitent des approches stratégiques nouvelles

Conduire un projet (conception, pilotage, coordination d'équipe, mise en oeuvre et gestion, évaluation, diffusion) pouvant mobiliser des compétences pluridisciplinaires dans un cadre collaboratif

Compétences attestées

Concevoir, synthétiser, purifier des molécules, des polymères en vue de l'élaboration de produits ou de matériaux

Maîtriser les principales technologies de la chimie (spectrométrie, RMN, électrophorèse, chromatographie...)

Exploiter et interpréter les données issues de méthodes physico-chimiques et d'analyse mises en oeuvre dans différents secteurs activités (santé, agroalimentaire, environnement,).

Communiquer de façon claire à l'écrit, à l'oral, en français et en anglais en s'adaptant à son public

Identifier, sélectionner et exploiter les ressources spécialisées en français et en anglais pour en extraire les informations liées à son projet

Développer des connaissances techniques et des savoirs expérimentaux dans le cadre d'étude scientifique par "projet"

Savoir restituer à l'oral et à l'écrit les savoirs acquis dans un contexte imposé

Développer sa compréhension et la pratique d'une langue étrangère dans un contexte scientifique et technique spécialisé

Concevoir, synthétiser et caractériser des matériaux à l'échelle du laboratoire et industrielle

- Utiliser les connaissances théoriques vues en cours pour comprendre la résolution de structure cristalline à partir de mesures de diffraction X
- Communiquer par oral ou par écrit en anglais (le cours et les TDs sont en anglais)
- *Understand and rationalize a crystallization process thanks to a phase diagram representation*
- *Use experimental information to propose a relevant phase diagram*
- *Predict the behaviour of an organic solid thanks to thermodynamic considerations by using phase diagrams*
- *Propose complementary experimental investigation to describe thoroughly the thermodynamic systems*
- *Acquire new theoretical and practical skills in the field of characterization of crystallized compounds*
- *Identify, select and critically analyze the various methods available and their application perimeters*

Infos pratiques

Lieu(x)

› Mont-Saint-Aignan

