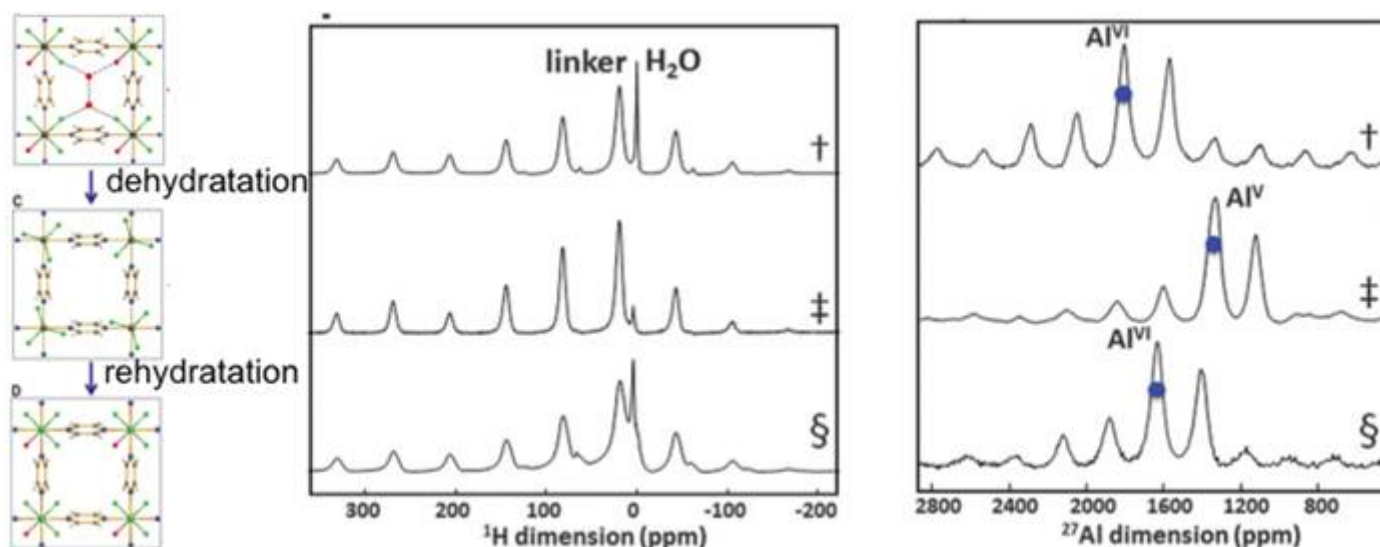


INTÉRACTIONS@MIM

RMN du Solide et calculs DFT

Nous développons des méthodologies de mesure RMN solide, allant de la préparation des échantillons à l'adaptation ou au développement de nouvelles séquences RMN, avec une originalité marquée sur les solides fluorés / protonés. L'application de ces méthodes permet de répondre de façon non ambiguë à des questions structurales pour un certain nombre de composés, comme la localisation de sites d'adsorption dans des MOFs fluorés, la dynamique des ions fluorures dans des fluorures inorganiques, la structure de composés polymériques de type Nafion, ou polyoligosiloxysilanes. Un intérêt particulier est également porté sur la caractérisation de formulations pharmaceutiques, au sein de collaborations académiques ou industrielles.



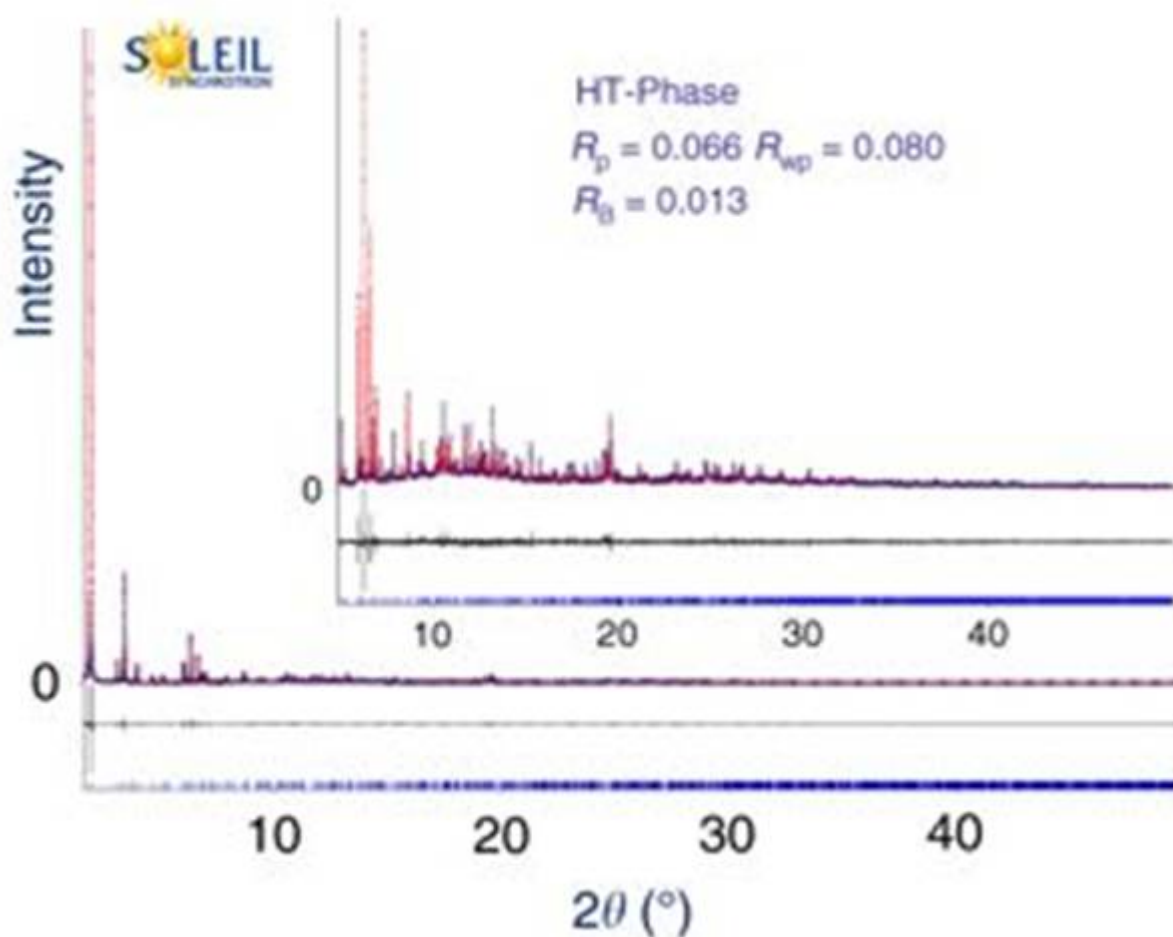
Publications récentes

Science, 2017, 356 731 ([link](#))

Nat. Commun. 2018, 1660 ([link](#))

Diffraction des Rayons X

Les solides étudiés dans le pôle Matériaux@MIM, particulièrement les MOFs, sont généralement obtenus à l'état pulvérulent. La connaissance des relations structure/propriétés étant un prérequis à leur utilisation rationnelle, la résolution structurale *ab initio* à partir de la diffraction des rayons X par la poudre s'avère donc indispensable. Les données issues des sources conventionnelles mais également de synchrotrons (SOLEIL et ESRF) sont aussi utilisées en fonction de la complexité des structures étudiées. Enfin, une recherche systématique de données expérimentales complémentaires, telles que la fonction de distribution de paires (PDF), peut être combinée aux méthodes de « charge flipping » et/ou de recuit simulé couplées à l'utilisation de groupes rigides afin d'élargir l'investigation aux matériaux mal cristallisés.



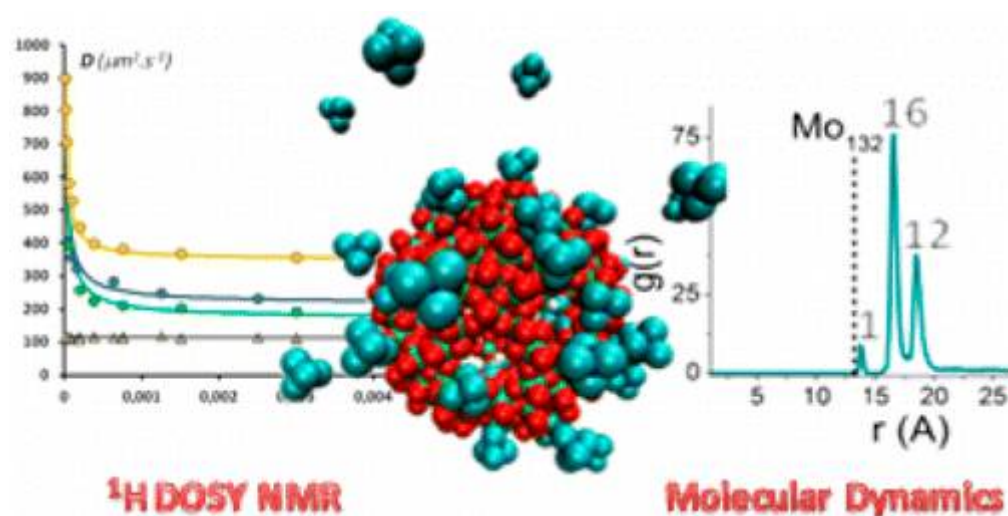
Publications récentes

Chem. Commun. 2016, 52, 9063 (link)

Nat. Commun. 2018, 1660 (link)

RMN liquide et physico-chimie des solutions

Pour les activités liées à la RMN du liquide, nous cherchons à mettre au point et appliquer des méthodologies RMN pour l'étude de la cristallogenèse des matériaux poreux et de la chimie des polyoxométallates en solution. Dans ces thématiques, nous nous intéressons à la chimie des oxydes en solution et des systèmes hybrides organique-inorganiques basés sur des interactions supramoléculaires. Une attention particulière est donnée à l'approche multinucléaire et aux techniques multidimensionnelles comme la DOSY (Diffusion Ordered Spectroscopy). Cette dernière est utilisée non seulement pour déterminer la taille des agrégats et leurs propriétés dynamiques mais aussi pour étudier les comportements physico-chimiques en solution à travers des interactions faibles attractives ou répulsives par effet hydrophobe/chaotrope.



Publications récentes

J. Am. Chem. Soc. 2015, 137, 5845 (link)