

## Colloque VIA : Composés d'intérêts pharmacologiques

Gabin GBABODE<sup>1</sup>, Philippe Negrier<sup>1</sup>, Denise Mondieig<sup>1</sup>, Evelyn Moreno<sup>2</sup>, Teresa Calvet<sup>2</sup>, Miquel Àngel Cuevas-Diarte<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centre de Physique Moléculaire Optique et Hertzienne, Université Bordeaux I, France

<sup>2</sup>Departament Cristallografia, Mineralogia i Dipòsits Minerals, Universitat de Barcelona, Spain

## Détermination de la structure cristalline de composés organiques par diffraction X de poudre

### Introduction

L'étude du polymorphisme de composés organiques est d'importance cruciale dans l'industrie pharmaceutique. En effet, une molécule donnée, sélectionnée pour ces propriétés thérapeutiques peut posséder à l'état solide plusieurs arrangements structuraux (polymorphes) en fonction des méthodes de préparation employées (dissolution, changement de température...), chacun possédant ses propres propriétés physico-chimiques. La technique la plus appropriée pour la détermination de la structure cristalline de chaque polymorphe est sans nul doute la diffraction des rayons X sur monocristaux. Néanmoins, l'obtention de monocristaux de taille suffisante pour l'analyse, est très compliquée voire irréalisable pour un grand nombre de composés organiques.

Nous présentons ici, la détermination des structures cristallines de phases solides d'acides gras saturés avec un nombre impair d'atomes de carbone à partir de diffractogrammes de poudre. Les acides gras saturés ( $C_nH_{2n}O_2$ ) sont d'un intérêt tout particulier dans le cadre de notre étude, car ils présentent de fortes enthalpies de fusion et ainsi, leurs mélanges sont des candidats prometteurs en tant qu'Alliages Moléculaires comme Matériaux à Changement de Phase [1] (MPCAM en anglais) pour la protection thermique et/ou le stockage d'énergie thermique

### Results

Les acides gras avec un nombre impair d'atomes de carbone présentent en montée de température, une transition solide-solide très proche de la température de fusion. Ainsi, les phases basse (température ambiante) et haute (température comprise entre la transition solide-solide et la fusion) température doivent être distinguées. Le domaine d'existence de la phase haute température diminue avec la longueur de la chaîne aliphatique, ce qui complique notablement la croissance de monocristaux de cette phase. En 2004, les structures cristallines des phases haute température des acides gras avec un nombre impair d'atomes de carbone compris entre  $n = 7$  et  $n = 15$  a été résolue par A. D. Bond à partir de monocristaux [2]. Ce travail a montré que les acides gras entre  $n = 7$  et  $n = 11$  présentent la phase  $C'$  (monoclinique  $P2_1/a$ ) à haute température alors que les acides tridécanoïque ( $n = 13$ ) et pentadécanoïque ( $n = 15$ ) sont en phase  $C''$  (monoclinique  $A2/a$ ) à haute température.

Nous avons déterminé les structures cristallines des phases haute température des acides gras avec un nombre impair d'atomes de carbone compris entre  $n = 13$  et  $n = 23$  à partir de diffractogrammes de poudre [3] en utilisant des méthodes dites "de l'espace direct" [4] (logiciel MS Modeling). Les structures des phases  $C''$  obtenus pour les acides tridécanoïque et pentadécanoïque sont qualitativement et quantitativement comparables avec celles déterminées sur monocristaux. Nous montrons également que les acides gras plus longs ( $n = 17$  à  $n = 23$ ) présentent la phase  $C'$  à haute température comme pour les membres plus courts de la série ( $n = 7$  à  $n = 11$ ) selon le travail de Bond. Enfin, la combinaison des résultats obtenus sur poudre et

sur monocristaux, ont permis de proposer une hypothèse quant à l'existence de la phase  $C''$  seulement pour les acides gras  $n = 13$  et  $n = 15$ .

- [1] Mondieig, D. ; Rajabalee, F. ; Laprie, A. ; Oonk, H. A. J. ; Calvet, T. ; Cuevas-Diarte, M. A. Transfusion and Apheresis Science 28 (2003), 143-148.
- [2] Bond, A. D. New. J. Chem. 28 (2004), 104-114.
- [3] Gbabode, G. ; Negrier, P. ; Mondieig, D. ; Moreno, E. ; Calvet, T. ; Cuevas-Diarte, M. A. Chem. Eur. J. 13 (2007), 3150-3159.
- [4] K. D. M. Harris, M. Tremayne, Chem. Mater. 8 (1996), 2554-2570.