

3 crédits	22.5 h + 7.5 h	Q1
-----------	----------------	----

Enseignants	Filinchuk Yaroslav ;
Langue d'enseignement	Anglais
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables	Reussite dans un course "Eléments de cristallographie et spectroscopie moléculaire", première partie: "Cristallographie" [CHM1251B] ou la connaissance de la cristallographie de base obtenue dans la recherche expérimentale quotidienne
Thèmes abordés	<ol style="list-style-type: none"> 1. Introduction. L'actualisation de la connaissance de base de la cristallographie: symétrie et principes de diffraction. Problème de phase 2. Diffraction sur un monocristal: les géométries, diffractomètres et les détecteurs. La résolution structurale 3. Expérience de diffraction de poudre. Les géométries expérimentales, les instruments. La résolution angulaire. La complémentarité des techniques. Poudre vs diffraction sur un monocristal. Les Possibilités et limites des techniques de diffraction. 4. Les absences systématiques, la détermination du groupe d'espace. Reconstruction de sections de l'espace réciproque de données de monocristal. Indexation - un défi pour la diffraction de poudre. 5. Méthodes modernes de résolution de la structure: "charge flipping" et les méthodes dans l'espace direct. 6. Les méthodes classiques de résolution de structure: les méthodes de Patterson et les méthodes direct, le remplacement moléculaire, le remplacement isomorphe, l'utilisation de la dispersion anormale. 7. Finalisation de la structure: les cartes différentielles de Fourier, affinement de la structure, des contraintes et des restraints. 8. Dernière touche: structure absolue, la validation des résultats. Problèmes: les défauts, les jumelages, le désordre. La diffusion diffuse 9. Qualité des données, l'interprétation des résultats. La publication des résultats d'une thèse ou d'une publication. Bases de données, Pearson symbole, séquence Wyckoff, type de structure. 10. Description d'une structure, la structure chimique. Identification de type de liaison. 11. Au-delà d'une structure. Évolution structurale et réactivité dans des conditions non ambiantes: avec le temps, la température, la pression hydrostatique ou de gaz. Les grandes installations, la rédaction d'une proposition (projet)
Acquis d'apprentissage	<ul style="list-style-type: none"> - Des méthodes théoriques et expérimentales de diffraction de rayons X et des neutrons 1 - Détermination de la structure cristalline de données de monocristaux et de poudres - La capacité à interpréter l'information structurale en termes de liaison et de la chimie structurale <p>-----</p> <p><i>La contribution de cette UE au développement et à la maîtrise des compétences et acquis du (des) programme(s) est accessible à la fin de cette fiche, dans la partie « Programmes/formations proposant cette unité d'enseignement (UE) ».</i></p>
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	Examen impliquant une question théorique, un exercice sur l'ordinateur et une évaluation d'un rapport de la structure cristalline.
Méthodes d'enseignement	Le cours est donné en utilisant des diapositives PowerPoint avec une utilisation intensive d'applications disponibles sur le Web, des logiciels, les bases de données cristallographique etc. Un nombre de problèmes est résolu sur un ordinateur pendant les cours et dans le cadre d'exercices.
Contenu	<ol style="list-style-type: none"> 1. Introduction. L'actualisation de la connaissance de base de la cristallographie: symétrie et principes de diffraction. Problème de phase 2. Diffraction sur un monocristal: les géométries, diffractomètres et les détecteurs. La résolution structurale 3. Expérience de diffraction de poudre. Les géométries expérimentales, les instruments. La résolution angulaire. La complémentarité des techniques. Poudre vs diffraction sur un monocristal. Les Possibilités et limites des techniques de diffraction. 4. Les absences systématiques, la détermination du groupe d'espace. Reconstruction de sections de l'espace réciproque de données de monocristal. Indexation - un défi pour la diffraction de poudre. 5. Méthodes modernes de résolution de la structure: "charge flipping" et les méthodes dans l'espace direct. 6. Les méthodes classiques de résolution de structure: les méthodes de Patterson et les méthodes direct, le remplacement moléculaire, le remplacement isomorphe, l'utilisation de la dispersion anormale.

	<p>7. Finalisation de la structure: les cartes différentielles de Fourier, affinement de la structure, des contraintes et des restraints.</p> <p>8. Dernière touche: structure absolue, la validation des résultats. Problèmes: les défauts, les jumelages, le désordre. La diffusion diffuse</p> <p>9. Qualité des données, l'interprétation des résultats. La publication des résultats d'une thèse ou d'une publication. Bases de données, Pearson symbole, séquence Wyckoff, type de structure.</p> <p>10. Description d'une structure, la structure chimique. Identification de type de liaison.</p> <p>11. Au-delà d'une structure. Évolution structurale et réactivité dans des conditions non ambiantes: avec le temps, la température, la pression hydrostatique ou de gaz. Les grandes installations, la rédaction d'une proposition (projet)</p>
Ressources en ligne	http://www.ruppweb.org/Xray/101index.html - cours interactif avec un accent sur la cristallographie macromoléculaire.
Bibliographie	<p>1. C. Giacovazzo, Ed., Fundamentals of crystallography (IUCr Texts on Crystallography, Oxford University Press, 2002).</p> <p>2. Y. Pecharsky, P. Zavalij, Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials (Springer, second edition, 2009).</p> <p>3. W.-K. Li, G.-D. Zhou, T. Mak, Advanced structural inorganic chemistry (IUCr Texts on Crystallography, Oxford University Press, 2008).</p> <p>4. R. Tilley, Crystals and crystal structures (Wiley, 2006).</p>
Autres infos	<p>1. Crystal structure models: NaCl, CsCl, diamond, graphite, CaCO₃. Working with International Tables for Crystallography volume A: space groups, special positions. Calculating a powder pattern (PowderCell, Mercury, Diamond)</p> <p>2. Indexing (CrysAlis, Dicvol), space group determination (CrysAlis, ChekCell), profile matching (Fullprof)</p> <p>3. Structure solution by charge flipping (Platon), global optimization (FOX)</p> <p>4. Structure solution by direct methods, refinement on single-crystal (Shelxs & Shelxl; WinGX) and powder (Fullprof) data</p> <p>5.</p> <p>6. Modèles de structure de cristal: NaCl, CsCl, le diamant, le graphite, CaCO₃. Travailler avec les Tables Internationales de Cristallographie volume A: groupes d'espace, les positions spéciales. Le calcul d'un diagramme de poudre (PowderCell, Mercury, Diamond)</p> <p>7. Indexation (CrysAlis, Dicvol), détermination de groupe d'espace (CrysAlis, ChekCell), l'affinement d'une profil (Fullprof)</p> <p>8. Solution de structure par charge flipping (Platon), et par l'optimisation globale (FOX)</p> <p>9. Solution de structure par des méthodes directes, l'affinement pour un monocristal (Shelxs & Shelxl; WinGX) et pour une poudre (Fullprof)</p>
Faculté ou entité en charge:	CHIM

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master [120] en sciences chimiques	CHIM2M	3		