

# Open Lab Agadir

## Utilisation des instruments de diffraction X sur poudre et sur monocristal et détermination structurale

A la Faculté des Sciences d'Agadir selon le calendrier suivant :

**Du 16 au 20 Juin 2014 à Agadir**

8h30	9h 30	9h 45	11 h	11h 15	12h30		14h 30		15h 45	16h	16 h 30	19 h
<b>Accueil :</b> IUCR, BRUKER, AMC	<b>Cours 1</b> Symétrie cristalline et groupes	<b>Cours 2</b> diffraction des rayons X					<b>Cours 3</b> Instrumentation méthodes de collection des données ,	<b>Atelier 1</b>		lancement d'un enregistrement		
	<b>A. THALAL</b>	<b>A. BENLHACHEMIE</b>					<b>L. Le DREAU</b>	<b>Tous les formateurs de TP</b>				
<b>Cours 4</b> Réduction des données	<b>Cours 5</b> Résolution structurale	<b>Cours 6</b> La transformée de Fourier & détermination de structure					<b>Atelier 2 monocristal</b>		<b>Atelier 3 : mixte</b>			
<b>L. Le DREAU</b>	<b>A. BOUKHRIS</b>	<b>A,BOUKHRIS</b>					BERRAHO, EL AMMARI, SAADI, BOUKHRIS , LAKNIFLI		<b>Tous les formateurs de TP</b>			
<b>Atelier 4 Monocristal</b>									<b>Atelier 5 Monocristal</b>		<b>libre</b>	
BERRAHO, EL AMMARI, SAADI, BOUKHRIS , LAKNIFLI									BERRAHO, EL AMMARI, SAADI, BOUKHRIS , LAKNIFLI			
<b>cours 7</b> Principe de diffraction sur poudre	<b>Cours 8</b> Méthodes d'indexation et d'extraction des facteurs de Structure	<b>Cours 9</b> Description de la Methode de Rietveld					<b>Atelier 6 Poudre</b>		<b>Atelier 7 : mixte</b>			
<b>D. ZAKARIA</b>	<b>D. ZAKARIA</b>	<b>S. BELMOKHTAR</b>					AATIQ, BENMOKHTAR, ELBOUARI, ZAKARIA BENLHACHEMIE		<b>Tous les formateurs de TP</b>			
<b>Atelier 8 Poudre</b>						<b>Atelier 9 Poudre</b>						
AATIQ, BENMOKHTAR, ELBOUARI, ZAKARIA , BENLHACHEMIE						AATIQ, BENMOKHTAR, ELBOUARI, ZAKARIA, BENLHACHEMIE						

# Open Lab Agadir

## Programme

### 1<sup>er</sup> jour

8h 30' - 9h 30': ouverture

#### 9h 45' - 11h 15' : Cours 1

- Éléments de symétrie dans les cristaux.

#### 11h 30' - 13 h : Cours 2.

Diffraction des rayons X, principes de la diffraction, réseau réciproque, facteur de Diffusion atomique, facteur de structure, densité électronique, Intensité diffractée, facteurs de Debye Waller..

#### 15h - 16 h 30: Cours 3.

- Instrumentation (Principe de fonctionnement d'un diffractomètre automatique à monocristal)
- Méthodes utilisées pour la collection des données
- Conditions de lancement d'une mesure

#### 16h 45 - 19 h : Atelier 1 :

Présentation des diffractomètres automatiques de poudre et monocristal  
Préparation des échantillons (monocristaux)  
Collecte des données de diffraction.

### 2<sup>ième</sup> jour

#### 8h - 9h 30': Cours 4

Réduction des données (Logiciels utilisés) Intégration de l'intensité diffractée, correction Lorentz polarisation, correction d'absorption, analyse statistique des intensités.

#### 9h 45' - 11h 15' : Cours 5

Résolution structurale

Méthodes de détermination des structures cristallines

- ✓ Méthodes physiques (tâtonnement)
- ✓ Méthode de l'atome lourds et Patterson

- ✓ Méthode directe
- ✓ Autres méthodes (diffusion anormale, ...)

#### 11h 30' - 13 h : Cours 6.

Rappels sur la transformée de Fourier

Application : utilisation dans la détermination de la structure cristalline

#### 13h 45 - 18 h : Atelier 2 :

- Réduction des données mesurées
- Détermination des groupes d'espace
- Résolution des structures cristallines
- Affinement de la structure

#### 16h 30' - 19 h 30 : Atelier 3 : répartition en deux groupes

Présentation du diffractomètres automatique de poudre

Préparation des échantillons (poudre : Groupe 1)

Préparation des échantillons (monocristaux Groupe 2)

Lancement des enregistrements

### 3<sup>ième</sup> jour

#### 8h 00 - 13 h : Atelier 4 : monocristaux

Suite Atelier 2

#### 15h 00 - 18 h : Atelier 5 :

Suite Atelier 4

### 4<sup>ième</sup> jour

#### 8h - 9h 30': Cours 7

- Principe général de diffraction X sur poudre.
- Technique expérimentale de préparation de poudre

#### 9h 45' - 11h 15' : Cours 8

# Open Lab Agadir

---

- Introduction à la description mathématique des diffractogrammes
- profils des pics – résolution instrumentale
- Méthodes d'extraction des facteurs de Structure.
- Stratégie de détermination structurale sur poudre.

## **11h 30' - 13 h : Cours 9.**

- Méthodes d'ajustement de profils
- Ajustement du profil total par contrainte de la maille ("PATTERN MATCHING")
- L'affinement de Rietveld , stratégie d'affinement.

## **15h - 18 h : Atelier 6 :**

Affinement structural par le méthode de Rietveld  
Applications sur les exemples enregistrés

**18h 15 – 19 h 30 : Atelier 7 :** Permutation des deux groupes  
Collecte des données

## **5 ieme jour**

### **8h - 13 h : Atelier 8 :**

Suite Atelier 6

### **15h - 18 h : Atelier 9 :**

Suite Atelier 8

### **18 h 19 h : Clôture :**

