

Nom et prénom :

Note et observations :

Question 01 : Citer cinq parties principales d'un diffractomètre pour monocristal

- 1-
- 2-
- 3-
- 4-
- 5-

Question 02 : Citer quatre banques de données structurales

- 1-
- 2-
- 3-
- 4-

Question 04 : Donner des définitions pour les fichiers suivants :

- .HKL :
- .INS :
- .RES :
- .CIF :
- .LST :

Question 05 : Que représentent ces différentes commandes du fichier .INS (.RES) :

- TITL :
- CELL :
- ZERR :
- LATT :
- SYMM :
- SFAC :
- UNIT :
- TEMP :
- SIZE :
- HKLF :

Question 06 :

Q6-1- La définition de la résolution structurale se repose sur deux points essentiels, lesquels ?

.....

.....

Q6-2- Au cours de la résolution structurale on aura besoin de deux fichiers nécessaires, lesquels ?

.....

.....

Q6-3- Quelle est la particularité du logiciel de dessin des structures "ORTEP" ?

.....

Q6-4- Quelle est la différence entre SHELXS et SHELXL ?

.....

.....

Q6-5- Donner les deux méthodes de placement des hydrogènes au cours de la résolution.

.....

.....

Q6-6- Quelle est l'utilité du fichier .cif ?

.....

.....

Q6-7- Quel est le rôle de WinGX ?

.....

.....

Q6-8- Donner trois rôles du logiciel "Mercury".

.....

.....

.....

Bon Courage

Corrigé type CM042 - Master 2 Matériaux

R01 : 05 * 01 = 02.50 pts

Source Rx, Goniomètre, Détecteur, BeamStop, Caméra, tête goniométrique...

R02 : 04 * 0.5 = 02.00 pts

CSD, ICSD, PDB, CrystMet, PDF...

R04- 0.75 * 05 = 03.75 pts

.HKL : Fichier de données des rayons X

.INS : Fichiers d'entrée de commande

.RES : Fichier de sortie de résultats

.CIF : Fichier des informations cristallographiques

.LST : Fichier historique de la résolution et l'affinement

R05- 10 * 0.5 = 05.00 pts

TITL : Titre

CELL : Paramètres de la maille

ZERR : Le Z et l'erreurs sur les paramètres

LATT : Réseau de Bravais

SYMM : Carte de symétrie

SFAC : Séquence des éléments

UNIT : Nombre des éléments par maille

TEMP : Température de mesure

SIZE : Taille de cristal

HKLF : Type de fichier de données des rayons X .hkl

R06- 06.75 pts

R6-1- La nature et la position des atomes

01 pts

R6-2- Les fichiers .ins et .hkl

0.75 pts

R6-3- ORTEP prend en considération le facteur d'agitation thermique.

0.5 pts

R6-4- SHELXS : résolution structurale et SHELXL : affinement des structures.

01 pts

R6-5- Par fourrier et par calcul géométrique.

01 pts

R6-6- Unifier les données cristallographiques sous un format universel. (Faciliter)

0.5 pts

R6-7- Résolution, Affinement, Calculs, Analyses et présentation

01 pts

R6-8- Visualisation, Calculs, Analyses et présentation

01 pts