



4.00 crédits	30.0 h + 10.0 h	Q1
--------------	-----------------	----

Enseignants	Filinchuk Yaroslav ;
Langue d'enseignement	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables	Base de connaissances algébriques telles que développées dans les UEs LMAT1101 <i>Mathématiques 1</i> et LMAT1102 <i>Mathématiques 2</i> .
Thèmes abordés	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Les éléments de symétrie</li> <li>• Réseau cristallin</li> <li>• Groupes ponctuels</li> <li>• Groupes d'espace</li> <li>• Utilisation des Tables Internationales de Cristallographie</li> <li>• Principes de diffraction, l'espace réciproque</li> <li>• Intensité diffractée par un cristal</li> <li>• Diffraction sur monocristaux, diffraction de poudre Les méthodes et les instruments expérimentales</li> <li>• Information obtenue par la diffraction Introduction à la chimie structurale, contribution de la cristallographie dans la connaissance de la chimie</li> </ul>
Acquis d'apprentissage	<p><b>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. <ul style="list-style-type: none"> <li>• compréhension raisonnée (savoir d'expliquer) de la symétrie et en particulier de la symétrie moléculaire</li> <li>• compréhension des fondements des méthodes modernes d'analyse cristallographique et des résultats qu'elles permettent d'obtenir</li> </ul> </li> </ol>
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	<p>L'examen oral avec une préparation écrite.</p> <p>Il comprend deux questions théoriques avec préparation écrite, les autres sans préparation (total de 15 points).</p> <p>La partie pratique est examinée par l'ingénieur, Dr. Koen Robeyns, et elle est évaluée avec un maximum de 5 points.</p> <p>Les étudiants peuvent obtenir un point de plus pour un travail créatif à domicile.</p>
Méthodes d'enseignement	<p>Le cours est donné avec l'utilisation des présentations PowerPoint, disponible sur moodle. Le cour comprend également la démonstration des logiciels et l'utilisation de matériel interactif. Des exercices sont prévus pour faciliter la compréhension.</p> <p><b>Exercices:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Groupes ponctuels</li> <li>2. Réseaux. Groupes du plan. Plan de glissement</li> <li>3. Groupes spatiaux</li> <li>4. Les exercices pratiques dans le laboratoire : <ul style="list-style-type: none"> <li>- Diffraction sur monocristaux, de poudre</li> <li>- Description et comparaison des structures cristallines.</li> <li>- Les types de structure</li> </ul> </li> </ol>
Contenu	<p>Symétrie</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Introduction, molécules et cristaux, les éléments de symétrie</li> <li>2. Groupes ponctuels, chiralité</li> <li>3. Translation, groupes du plan, réseau cristallin, les éléments de symétrie périodique</li> <li>4. Groupes spatiaux, Tables Internationales de Cristallographie</li> </ol> <p>Méthodes</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Rayons X, neutrons, principes de diffraction, l'espace réciproque</li> <li>2. Facteur de structure, synthèse de Fourier, problème de phase</li> <li>3. Information obtenue par la diffraction</li> <li>4. Méthodes de diffraction: monocristaux et polycristaux (poudres)</li> <li>5. Résolution des structures, identification des composés connus et inconnus</li> <li>6. Affinement des structures cristallines</li> <li>7. Présentation des logiciels modernes (CrysAlis, Fullprof, Shelx, Fox)</li> </ol> <p>Résultats</p>

	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Utilisation et présentation des résultats, interprétation des données de la littérature</li> <li>2. Introduction à la chimie structurale</li> <li>3. Chimie par la diffraction: études <i>in-situ</i></li> <li>4. Les grands "instruments" - synchrotrons et sources des neutrons: les grand possibilités</li> </ol>
Ressources en ligne	<ul style="list-style-type: none"> <li>&gt; <a href="https://symmetry.otterbein.edu/">https://symmetry.otterbein.edu/</a> - guide interactif sur la symétrie moléculaire</li> <li>&gt; <a href="https://escher.epfl.ch/mobile/">https://escher.epfl.ch/mobile/</a> - cristallographie sur un téléphone portable, groupes périodiques 2D</li> <li>&gt; <a href="https://nanocrystallography.research.pdx.edu/index.py/links">https://nanocrystallography.research.pdx.edu/index.py/links</a> - collection des liens utiles</li> <li>&gt; <a href="https://escher.epfl.ch/eCrystallography/">https://escher.epfl.ch/eCrystallography/</a> - cours électronique de cristallographie</li> </ul>
Bibliographie	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. J.-J. Rousseau, A. Gibaud, <i>Cristallographie géométrique et radiocristallographie</i> (Dunod, 3e édition, 2007).</li> <li>2. R. Tilley, <i>Crystals and crystal structures</i> (Wiley, 2006).</li> </ol>
Faculté ou entité en charge:	CHIM

<b>Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)</b>				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Bachelier en sciences chimiques	CHIM1BA	4		
Mineure en chimie	MINCHIM	4		
Master [120] en biochimie et biologie moléculaire et cellulaire	BBMC2M	4		