

3.0 crédits

22.5 h + 7.5 h

Enseignants:	SOMEBODY ;
Langue d'enseignement:	Anglais
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés :	<ol style="list-style-type: none"> 1. Cristallisation. 2. Diffraction des rayons X, théorie et méthodes expérimentales. 3. Méthodes de détermination des structures cristallines et moléculaires. 4. Interprétation des résultats.
Acquis d'apprentissage	<ol style="list-style-type: none"> 1. Détermination de structures moléculaires par la diffraction des rayons X. 2. Application aux petites molécules et aux macromolécules biologiques. <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>
Contenu :	<ol style="list-style-type: none"> 1. Cristallisation des petites molécules et des macromolécules biologiques. 2. Manipulation des cristaux, montages cryogéniques, préparation de dérivés d'atomes lourds. 3. Rappel des relations de base de radiocristallographie. 4. Méthodes expérimentales applicables aux monocristaux. 5. Détermination des paramètres réticulaires directs et réciproques. 6. Détermination des groupes spatiaux. 7. Mesure des intensités diffractées par un cristal. 8. Corrections de Lorentz, de polarisation, d'absorption, ... 9. Comment passer des données de diffraction à la structure: facteurs de structure et densité électronique, transformée de Fourier, problème des phases. Statistique de Wilson. 10. Fonction de Patterson, méthodes directes, remplacement isomorphe, utilisation de la dispersion anormale, méthodes MAD (multiwavelength anomalous dispersion) et SAD (single wavelength anomalous dispersion). 11. Détermination et utilisation de la symétrie non cristallographique. 12. Affinement et extension des phases par modification de la densité électronique. 13. Remplacement moléculaire, méthodes classiques et méthodes basées sur le "maximum likelihood". 14. Affinement des structures moléculaires. 15. Qualité, analyse et interprétation des résultats.
Autres infos :	Pré-requis: - Eléments de cristallographie et spectroscopie moléculaire. Première partie: Cristallographie (CHM1251A): Mode d'évaluation: - examen oral avec préparation écrite
Cycle et année d'étude: :	> Master [120] en sciences chimiques
Faculté ou entité en charge:	CHIM