





Au vu du contexte sanitaire lié à la propagation du coronavirus, les modalités d'organisation et d'évaluation des unités d'enseignement ont pu, dans différentes situations, être adaptées ; ces éventuelles nouvelles modalités ont été -ou seront- communiquées par les enseignant-es aux étudiant-es.

4 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 <i>Le(s) prérequis de cette Unité d'enseignement (UE) sont précisés à la fin de cette fiche, en regard des programmes/formations qui proposent cette UE.</i>
Thèmes abordés	<ul style="list-style-type: none"> - Les élément de symétrie - Réseau cristallin - Groupes ponctuels - Groupes d'espace - Utilisation des Tables Internationales de Cristallographie - Principes de diffraction, l'espace réciproque - Intensité diffractée par un cristal - Diffraction sur monocristaux, diffraction de poudre- Les méthodes et les instruments expérimentales - Information obtenue par la diffraction- Introduction à la chimie structurale, contribution de la cristallographie dans la connaissance de la chimie
Acquis d'apprentissage	<ul style="list-style-type: none"> - compréhension raisonnée de la symétrie et en particulier de la symétrie moléculaire 1 - compréhension des fondements des méthodes modernes d'analyse cristallographique et des résultats qu'elles permettent d'obtenir <p style="text-align: center;">- - - -</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	En raison de la crise du COVID-19, les informations de cette rubrique sont particulièrement susceptibles d'être modifiées. examen oral avec un préparation écrite. Il comprend deux questions théoriques: l'une avec préparation écrite et l'autre sans préparation (total de 15 points). La partie pratique est examinée par l'ingénieur, Dr. Koen Robeyns, et elle est évaluée avec un maximum de 5 point. Un point de plus les étudiants peuvent obtenir pour le travail créatif à domicile.
Méthodes d'enseignement	En raison de la crise du COVID-19, les informations de cette rubrique sont particulièrement susceptibles d'être modifiées. Le cours est donné avec l'utilisation des présentations PowerPoint, disponible à l'iCampus. Le cour comprend également la démonstration des logiciels et l'utilisation de matériel interactif. Des exercices sont prévus pour faciliter la compréhension. Exercices: <ol style="list-style-type: none"> 1. Groupes ponctuels 2. Réseaux. Groupes du plan. Plan de glissement 3. Groupes spatiaux 4. Les exercices pratiques dans le laboratoire: diffraction sur monocristaux, de poudre Description et comparaison des structures cristallines. Les types de structure
Contenu	Symétrie <ol style="list-style-type: none"> 1. Introduction, molécules et cristaux, les éléments de symétrie 2. Groupes ponctuels, chiralité 3. Translation, groupes du plan, réseau cristallin, les éléments de symétrie périodique

	<p>4. Groupes spatiaux, Tables Internationales de Cristallographie</p> <p>Méthodes</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Rayons X, neutrons, principes de diffraction, l'espace réciproque 2. Facteur de structure, synthèse de Fourier, problème de phase 3. Information obtenue par la diffraction 4. Méthodes de diffraction: monocristaux et polycristaux (poudres) 5. Résolution des structures, identification des composés connus et inconnus 6. Affinement des structures cristallines 7. Présentation des logiciels modernes (CrysAlis, Fullprof, Shelx, Fox) <p>Résultats</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Utilisation et présentation des résultats, interprétation des données de la littérature 2. Introduction à la chimie structurale 3. Chimie par la diffraction: études in-situ 4. Les grands "instruments" - synchrotrons et sources des neutrons: les grandes possibilités Symétrie+ <ol style="list-style-type: none"> 1. Les tables de caractères, les représentations irréductibles
Ressources en ligne	<p>http://symmetry.otterbein.edu/ - guide interactif sur la symétrie moléculaire</p> <p>http://escher.epfl.ch/mobile/ - cristallographie sur un téléphone portable, groupes périodiques 2D</p> <p>http://nanocrystallography.research.pdx.edu/index.py/links - collection des liens utiles</p> <p>http://escher.epfl.ch/eCrystallography/ - cours électronique de cristallographie</p>
Bibliographie	<ol style="list-style-type: none"> 1. J.-J. Rousseau, A. Gibaud, <i>Cristallographie géométrique et radiocristallographie</i> (Dunod, 3e édition, 2007). 2. R. Tilley, <i>Crystals and crystal structures</i> (Wiley, 2006).
Autres infos	<p>Compétences à acquérir:</p> <ul style="list-style-type: none"> - compréhension raisonnée (savoir d'expliquer) de la symétrie et en particulier de la symétrie moléculaire - compréhension des fondements des méthodes modernes d'analyse cristallographique et des résultats qu'elles permettent d'obtenir
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	4		
Master [120] en biochimie et biologie moléculaire et cellulaire	BBMC2M	4		
Master [60] en sciences chimiques	CHIM2M1	4		
Bachelier en sciences chimiques	CHIM1BA	4	LMAT1101 ET LMAT1102	
Mineure en chimie	LCHIM100I	4		