

Examen de TP Cristallographie

Exercice 01

1. Précisez le rôle des fichiers : .ins, .hkl et .res dans le raffinement cristallographique sous WinGX.
2. Décrivez les étapes principales pour affiner une structure cristallographique à l'aide de WinGX.
3. Quels sont les indicateurs de qualité d'un raffinement cristallographique ? Donnez les valeurs acceptables.
4. Vous observez une carte de Fourier différence montrant de forts pics non assignés. Que pouvez-vous en déduire et que proposez-vous comme solution ?
5. Expliquez brièvement le rôle du fichier .hkl dans l'analyse cristallographique avec WinGX.
6. Quels sont les avantages d'utiliser WinGX plutôt que SHELX seul ?
7. Vous obtenez une structure avec un facteur $R1 = 0.13$. Que pouvez-vous conclure ? Quels ajustements pourriez-vous envisager ?

Exercice 02

1. Identifiez le type de fichier affiché.
2. À partir de ce fichier déterminez :
 - λ ,
 - a, b, c, α , β , γ ,
 - Z,
 - Incertitudes,
 - Formule chimique.

plaintext

Copier

Modifier

```
TITL Simple structure - test WinGX
CELL 0.71073 5.430 6.120 7.310 90 90 90
ZERR 4 0.001 0.001 0.001 0.01 0.01 0.01
LATT 1
SYMM -X, -Y, -Z
SFAC C H N O
UNIT 4 8 2 2

C1 1 0.124 0.432 0.203 11.0
N1 3 0.241 0.322 0.187 11.0
O1 4 0.185 0.410 0.341 11.0
H1 2 0.150 0.480 0.210 11.0
H2 2 0.120 0.370 0.160 11.0
HKLF 4
END
```

Exercice 03

1. Décris en une phrase le but de la méthode de Rietveld.
2. Quels sont les types de fichiers essentiels dans un projet FullProf, et quel est le rôle de chacun (citer au moins 3) ?
3. Pourquoi utilise-t-on un éditeur comme WinPLOTR ou EdPCR avec FullProf ? Quelle est la différence entre les deux ?

Bon Courage