

OpenLab en Analyses Structurales de Matériaux par DRX Programme groupe A (DRX monocristal)

Jour 1 : 14 / 11 / 22 Notions de bases, Rappels essentiels		
Horaire	Activité	Modérateur
08h30 - 09h00	Inscription des participants	
09h00 - 09h30	Ouverture officielle avec Intervention de : <ul style="list-style-type: none"> ✓ Prof. Hanna Dabkowska Présidente de l' IUCr (10') ✓ Prof Amal Kasry UNESCO Chief of Section; RIESC/PCB; Natural Sciences (10') 	
10h00 - 10h30	CP1 : Les potentialités minières de la Mauritanie ; Etat des lieux, perspectives et contraintes. Nasser EDDIN (ANARPAM)	
10h30 - 11h00	CP2 : La cristallographie et l'industrie minière. Habib Boughzala	
11h00 - 11h30	CP3 : Cristallographie, un domaine incontournable de la science à l'interface de la physique, chimie, géologie et science de la vie. Claude Lecomte	
11h30 - 11h45	<i>Pause-café</i>	
		Animateur
11h45 - 12h45	Réseaux cristallins : Définitions et calculs	CL
12h45 - 14h30	<i>Déjeuner</i>	
14h30 - 16h00	Diffusion et Diffraction des Rayons X par la matière	CL
16h00 - 16h15	<i>Pause-café</i>	
16h15 - 17h00	Diffusion et Diffraction des Rayons X par la matière	CL

Jour 2 : 15 / 11 / 22 Notions de bases, Rappels essentiels		
Horaire	Activité	Animateur
08h30 - 10h50	Symétrie, Groupes ponctuels	CL
10h50 - 11h05	<i>Pause-café</i>	
11h05 - 12h15	Introduction aux groupes d'espace	CL
12h15 - 12h45	Groupes d'espace (suite)	CL
12h45 - 14h30	<i>Déjeuner</i>	
14h30 - 16H00	Groupes d'espace Tables internationales de cristallographie	HB
16h00 - 16h15	<i>Pause-café</i>	
16h15 - 17h00	Symétrie groupes d'espace Tables internationales de cristallographie	HB

OpenLab en Analyses Structurales de Matériaux par DRX Programme groupe A (DRX monocristal)

Jour 3 : 16 / 11 / 22 Aspects pratiques		
Horaire	Activité	Animateur
08H30 - 09h00	Introduction aux Diffractomètres poudre et monocristaux : goniomètre et détecteurs de RX	EW, FP
	Répartition des participants en 3 groupes Groupe A (20 pers. environ) Diffraction par un monocristal Groupes B1 et B2 Diffractométrie par les poudres	
09h00 - 10h30	Groupes A & B : Visite du synchrotron Soleil : Ligne Cristal Présentation de Soleil 1) Jean Daillant Directeur de Soleil Présentation générale du synchrotron Soleil 2) Pierre Fertey responsable de la ligne CRISTAL ou E. Bendeif (CRM2). Applications à la cristallographie des matériaux et petites molécules	Jean Daillant , Directeur de Soleil Pierre Fertey , Responsable de la ligne CRISTAL E. Bendeif
10h30 - 11h00	<i>Pause-café</i>	
11h00 - 11H30	Production des rayons X en laboratoire	EW
11h30 - 12h30	Discussion sur les parties théoriques du cours	CL, HB, FP EW
12h30 - 14h30	<i>Déjeuner</i>	
14h30 - 16h00	Principes de détermination des structures cristallines	CL
16h00 - 16h15	<i>Pause-café</i>	
16h15 - 17h00	Diffractométrie monocristal : paracétamol Choix collage et premières mesures sur diffractomètre	EW, NC en distanciel

Jour 4 : 17 / 11 / 22 Aspects pratiques		
Horaire	Activité	Animateur
08h30 - 10h 15	Réduction des données ; estimation des modules des facteurs de structure du paracétamol	EW, NC distanciel
10h 15 - 10h30	<i>Pause-café</i>	
10h30 - 12h30	Présentation des logiciels de résolution, d'affinement et de représentation de structures : Shelx, Olex2, Mercury Application au paracétamol	EW, NC distanciel
12h30 - 14h30	<i>Déjeuner</i>	
14h30 - 16h00	Résolution et affinement de la structure du paracétamol	EW (distanciel) assisté par Ibrahima T et Mamoudou D. (présentiel)
16h00 - 16h15	<i>Pause-café</i>	
16h15 - 17h00	Suite affinement et Apprentissage de Olex2 sur le paracétamol. Analyse des résultats. Représentation de la structure et préparation du CIF.	EW, CL, IT, MD

OpenLab en Analyses Structurales de Matériaux par DRX Programme groupe A (DRX monocristal)

Jour 5 : 18 / 11 / 22 Fin aspects pratiques, travaux de synthèse		
Horaire	Activité	Animateur
08h30 - 10h 15	Réduction de données du nitroprussiate de sodium (SNP)	EW
10h15 - 10h 30	<i>Pause-café</i>	
10h30 - 13h 30	Résolution et affinement structurale du nitroprussiate de sodium (SNP)	EW, CL, IT, MD
13h30 - 14 h 30	<i>Déjeuner</i>	

Jour 6 : 19 / 11 / 22 Travaux de synthèse, clôture		
Horaire	Activité	Animateur
09h00 - 10h15	Découverte de la CCDC	PK
10h15 - 10h30	<i>Pause-café</i>	
10h30 - 12h30	- Bilan de l'OpenLab - Remise de diplômes et attestations - Clôture	AB
12h30 - 14h30	<i>Déjeuner</i>	
15h00 - 18h00	Sortie, Visites, ...	

Animateurs : Emmanuel Wenger (EW) ; Claude Lecomte (CL) ; Florence Porcher (FP) ; Habib Boughzala (HB) ; Ibrahima Ihiam (IT) ; Mamoudou Diallo (MD) ; Patrice Kenfack (PK) ; Aliou Barry (AB) ; Nicolas Claiser (NC).

OpenLab en Analyses Structurales de Matériaux par DRX Programme groupe B (DRX poudre)

Jour 1 : 14 / 11 / 22 Notions de bases, Rappels essentiels		
Horaire	Activité	Modérateur
08h30 - 09h00	Inscription des participants	
09h00 - 09h30	Ouverture officielle avec Intervention de : <ul style="list-style-type: none"> ✓ Prof. Hanna Dabkowska Présidente de l' IUCr (10') ✓ Prof Amal Kasry UNESCO Chief of Section; RIESC/PCB; Natural Sciences (10') 	
10h00 - 10h30	CP1 : Les potentialités minières de la Mauritanie ; Etat des lieux, perspectives et contraintes. Nasser EDDIN (ANARPAM)	
10h30 - 11h00	CP2 : La cristallographie et l'industrie minière. Habib Boughzala	
11h00 - 11h30	CP3 : Cristallographie, un domaine incontournable de la science à l'interface de la physique, chimie, géologie et science de la vie. Claude Lecomte	
11h30 - 11h45	<i>Pause-café</i>	
		Animateur
11h45 - 12h45	Réseaux cristallins : Définitions et calculs	CL
12h45 - 14h30	<i>Déjeuner</i>	
14h30 - 16h00	Diffusion et Diffraction des Rayons X par la matière	CL
16h00 - 16h15	<i>Pause-café</i>	
16h15 - 17h00	Diffusion et Diffraction des Rayons X par la matière	CL

Jour 2 : 15 / 11 / 22 Notions de bases, Rappels essentiels		
Horaire	Activité	Animateur
08h30 - 10h50	Symétrie, Groupes ponctuels	CL
10h50 - 11h05	<i>Pause-café</i>	
11h05 - 12h15	Introduction aux groupes d'espace	CL
12h15 - 12h45	Groupes d'espace (suite)	CL
12h45 - 14h30	<i>Déjeuner</i>	
14h30 - 16h00	Groupes d'espace Tables internationales de cristallographie	HB
16h00 - 16h15	<i>Pause-café</i>	
16h15 - 17h00	Symétrie groupes d'espace Tables internationales de cristallographie	HB

OpenLab en Analyses Structurales de Matériaux par DRX Programme groupe B (DRX poudre)

Jour 3 : 16/11/22 Aspects pratiques		
Horaire	Activité	Animateur
08h30 - 09h00	Introduction aux Diffractomètres poudre et monocristaux : goniomètre et détecteurs de RX	EW, FP
	Répartition des participants en 3 groupes Groupe A (20 pers. environ) Diffraction par un monocristal Groupes B1 et B2 Diffractométrie par les poudres	
09h00 - 10h30	Groupes A & B : Visite du synchrotron Soleil : ligne cristal Présentation de Soleil 1) Jean Daillant directeur de Soleil Présentation générale du synchrotron Soleil 2) Pierre Fertey responsable de la ligne CRISTAL ou E. Bendeif (CRM2). Applications à la cristallographie des matériaux et petites molécules	Jean Daillant Directeur de Soleil Pierre Fertey Responsable de la ligne CRISTAL E. Bendeif
10h30 - 11h00	<i>Pause-café</i>	
11h00 - 11h30	Production des rayons X en laboratoire	EW
11h30 -12h30	Discussion sur les parties théoriques du cours	CL, HB, FP, EW
12h30 – 14h30	<i>Déjeuner</i>	
14h30 – 16h00	Analyse Qualitative & Base de données ; Analyse Quantitative des Phases (Rietveld)	HB
16h00 – 16h15	<i>Pause-café</i>	
16h15 – 17h00	Quantification de l'amorphe	HB
17h00–18h00	Pré-installation des logiciels : Groupe B1 : GSAS, EXPO & QUANTO, FullProf Groupe B2 : Fullprof & QualX + PowCOD + Mercury	HB FP

Jour 4 : 17 / 11 / 22 Aspects pratiques		
Horaire	Activité	Animateur
08h30 - 09h00	Installation des logiciels Groupe B1 : GSAS, EXPO& QUANTO, FullProf Groupe B2 : Fullprof&QualX + PowCOD + Mercury	HB FP
09h00 - 09h45	Groupe B1 : Découverte d'un diffractogramme. Identification de phase. Autotest : Découverte Groupe B2 : Diffraction géométrique – Identification de phase (QualX +PowCod)	HB FP
09h45 - 10h15	Groupe B1 : Indexation – Pattern matching Outil : EXPO Groupe B2 : Diffraction géométrique- Profile Matching (FullProf)	HB FP
10h15 - 10h30	<i>Pause-café</i>	
10h30 - 12h30	Groupe B1 : Indexation – Pattern matching Outil : GSAS Groupe B2 : Affinement Rietveld 1 (diagramme monophasé)	HB FP
12h30 - 14h30	<i>Déjeuner</i>	
14h30 - 16h00	Groupe B1 : QPA – Outil : GSAS Groupe B2 : Affinement Rietveld 2 (diagramme monophasé)	HB FP
16h00 - 16h15	<i>Pause-café</i>	
16h15 - 17h00	Groupe B1 : QPA - Outil : QUANTO Groupe B2 : Affinement Rietveld 3	HB FP

OpenLab en Analyses Structurales de Matériaux par DRX Programme groupe B (DRX poudre)

Jour 5 : 18 / 11 /22 Aspects pratiques		
Horaire	Activité	Animateur
08h30 - 09h15	Groupe B1 : Taux de Substitution_1 TSOutil : GSAS Groupe B2 : Quantification de phase (Qualx → FullProf)	HB FP
09h15 - 10h15	Groupe B1 : Taux de Substitution_1 TS Outil : EXPO Groupe B2 : Affinement Rietveld 4 (diagramme multiphasé)	HB FP
10h15 - 10h30	Pause-café	
10h30 - 12h30	Groupe B1 : Taux de Substitution_2 TSOutil : GSAS Groupe B2 : Affinement Rietveld 5 (diagramme multiphasé)	HB FP
12h30 - 13h30	Groupe B1 : Taux de Substitution_2 TSOutil : EXPO Groupe B2 : Affinement Rietveld 6 (diagramme multiphasé - profils)	HB FP
13h30 - 15h00	Déjeuner	

Jour 6 : 19/11/22 Travaux de synthèse, clôture		
Horaire	Activité	Animateur
09h00 - 10h15	Découverte de la CCDC	PK
10h15 - 10h30	<i>Pause-café</i>	
10h30 - 12h30	- Bilan de l'Openlab - Remise de diplômes et Attestations - Clôture	AB
12h30 - 14h30	<i>Déjeuner</i>	
15h00 - 18h00	Sortie, Visites, ...	

Animateurs : Emmanuel Wenger (EW) ; Claude Lecomte (CL) ; Florence Porcher (FP) ;
Habib Boughzala (HB) ; Ibrahima Ihiam (IT) ; Mamoudou Diallo (MD) ; Patrice Kenfack (PK) ;
Aliou Barry (AB) ; Nicolas Claiser (NC).