



**RÉCIPROCS** organise cette année, du 5 au 9 juin 2023, à Gréoux-les-Bains, dans les Alpes-de-Haute-Provence, une action nationale de formation (ANF) intitulée :

**Résolution et affinement de structures cristallines :  
méthodes avancées**

La formation s'articule autour de 2 axes :

- Diffraction sur monocristal : Au-delà des modèles classiques, comment mieux modéliser les cortèges électroniques.
- Diffraction des échantillons polycristallins : Comment résoudre la structure.

Pour chacune des méthodes, les principes, conditions d'applications et limites seront présentés. De très nombreux travaux pratiques permettront ensuite de prendre en main les logiciels (voir ci-dessous). Les participants seront invités à apporter leurs propres données pour des moments d'échange et de discussion.

*Public visé*

Cette formation s'adresse à tous les personnels (C, EC, IT) impliqués dans le domaine de la cristallographie structurale. Des connaissances de base en cristallographie (symétries, groupe d'espace...) sont nécessaires. Savoir résoudre et/ou affiner des structures cristallines simples à partir de données de diffraction sur échantillons mono- et/ou poly-cristallins est également indispensable. Une majorité de la formation sera assurée en anglais.

*Programme préliminaire*

- **Modélisation des cortèges électroniques**
  - **Approche cristallographie quantique par NoSpherA2** : histoire et développement des modèles *ab-initio*, théorie et principes du programme NoSpherA2, interprétation des résultats.
    - \* *Travaux pratiques*
      - Olex2 : Résoudre et affiner une structure en utilisant Olex2 + outils avancés : évaluation de la qualité des données, modélisation du désordre...
      - NoSpherA2 : premiers calculs et exemples avancés
  - **Approche par les affinements multipolaires** : introduction, contexte, méthodes et interprétation des résultats
    - \* *Travaux pratiques*
      - Présentation et utilisation de la suite MoPro
      - Exemples d'affinements multipolaires
- **Comment résoudre une structure à partir de données de diffraction d'échantillons polycristallins**

**Les méthodes de résolution structurale** et les possibilités offertes par le logiciel EXPO.

- \* *Travaux pratiques* :
  - 4 séances abordant pas à pas les différentes étapes du processus en s'appuyant sur l'usage du logiciel EXPO.

### *Les intervenants*

- Angela ALTOMARE, Istituto di Cristallografia, CNR, BAri, Italy
- Benoît GUILLOT, Laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et Modélisations, Nancy
- Florian KLEEMISS, OlexSys GmbH, Regensburg, Allemagne

*Nombre maximum de participants :30*

### *Adresse de la formation*

Domaine de Château-Laval - Route de Valensole  
04800 Gréoux-les-Bains

### *Préinscriptions :*

- Date limite : **29 avril 2023**
- Sur le site Azur Colloque à l'adresse suivante : <https://www.azur-colloque.fr/DR16/inscription/inscription/23>

### **Protection des données**

Conformément au Règlement Général pour la Protection des Données Personnelles du 27 avril 2016 (RGPD) et pour respecter la plus grande transparence, nous vous informons que les informations recueillies sur Azur Colloque seront gardées par le service financier du CNRS le temps nécessaire. Ces informations feront également l'objet d'un traitement par le réseau RÉCIPROCS. Les seuls destinataires de ces données sont les organisateurs de cette ANF. Aucun autre usage des données personnelles ne sera effectué et aucune transmission de ces informations ne sera réalisée à un tiers.

Les données seront conservées par le réseau jusqu'au 1er septembre 2024. Vous pouvez accéder aux données vous concernant, les rectifier, demander leur effacement ou exercer votre droit à la limitation du traitement de vos données en contactant Olivier Pérez ([olivier.perez@ensicaen.fr](mailto:olivier.perez@ensicaen.fr)). Vous pouvez également contacter le délégué à la protection des données (DPO) du CNRS pour toute question relative à la protection des données personnelles. Ses coordonnées sont les suivantes : Service Informatique et Libertés du CNRS, 2 rue Jean Zay, 54519 Vandoeuvre-lès-Nancy.



**Résolution et affinement de structures cristallines :  
méthodes avancées  
Programme prévisionnel**

### Lundi 5 juin

- 18h30 Arrivée  
20h00 - Dîner

### Mardi 6 juin

8h30 - 10h30 **Méthodes de résolution de structures à partir de données de diffraction sur poudre** [A. Altomare (IC, Bari)]  
10h30 - 11h00 *Pause*  
11h00 - 12h30 **Résoudre et affiner avec Olex2** [F. Kleemiss (OlexSys)]  
12h30 - 14h00 *Pause déjeuner*

14h00 - 16h00 **Détermination des paramètres de maille et du groupe d'espace (EXPO)** [A. Altomare (IC, Bari)]  
16h00 - 16h30 *Pause*  
16h30 - 18h30 **Extraction des intensités intégrées et résolution (EXPO)** [A. Altomare (IC, Bari)]  
18h30 - 19h00 **Mot des sponsors**  
19h00 - 20h00 *Pause*  
20h00 - 21h30 *Dîner*

### Mercredi 7 juin

8h30 - 10h30 **Introduction à NoSphereA2** [F. Kleemiss (OlexSys)]  
10h30 - 11h00 *Pause*  
11h00 - 12h30 **Résolution de structures par recuit simulé (EXPO)** [A. Altomare (IC, Bari)]  
12h00 - 13h30 *Pause déjeuner*

14h00 - 18h30 *Vie du réseau*  
18h30 - 18h45  **sujet [orateur (Labo)]**  
19h00 - 19h45 *Pause*  
20h00 - 21h30 *Dîner de gala*

### Jeudi 8 juin

8h30 - 10h30 **Les affinements multipolaires** [B. Guillot (CRM2, Nancy)]  
10h30 - 11h00 *Pause*  
11h00 - 12h30 **Affinement et validation (EXPO)** [A. Altomare (IC, Bari)]  
12h30 - 14h00 *Pause déjeuner*

14h00 - 16h00 **NoSphereA2 pratique**[F. Kleemiss (OlexSys)]  
16h00 - 16h30 *Pause*  
16h30 - 18h30 **Structures difficiles (EXPO)** [A. Altomare (IC, Bari)]  
18h30 - 19h00 **Mot des sponsors**  
19h00 - 20h00 *Pause*  
20h00 - 21h30 *Dîner*

*Vendredi 9 juin*

8h00 - 10h00 MoPro : premiers pas [B. Guillot (CRM2, Nancy)]  
10h00 - 10h30 *Pause*  
10h30 - 12h00 MoPro : premiers pas [B. Guillot (CRM2, Nancy)]  
12h00 - 13h30 *Pause déjeuner*  
  
14h00 - Départ

en rouge : lectures

en bleu : practicals