

Sommaire

Avant-propos	iii
1. Aspects fondamentaux de cristallographie aux rayons X	1
1.1. Introduction	1
1.2. Comparaison de la cristallographie avec les autres techniques de détermination structurale	1
1.3. L'analogie de l'œil et du microscope	4
1.4. Principes fondamentaux de l'état cristallin	7
1.5. Diffraction des rayons X par les molécules et par les cristaux	13
1.6. Géométrie et symétrie de la diffraction des rayons X	19
1.7. Les intensités des rayons diffractés	25
1.8. Les sources de rayons X	29
1.9. Résumé	32
1.10. Exercices	32
2. La cristallographie aux rayons X en pratique	35
2.1. Introduction	35
2.2. La préparation et la sélection des échantillons	35
2.3. Mesure des figures de diffraction	38
2.4. Obtenir la géométrie et la symétrie de la maille	41
2.5. La mesure des intensités	42
2.6. Réduction de données	43
2.7. Résolution de structure	45
2.8. Compléter la structure basique	56
2.9. Affiner la structure	59
2.10. Désordre, macle et la détermination de la « structure absolue »	62
2.11. Présenter et interpréter les résultats	68
2.12. Archiver et présenter les structures cristallines	70
2.13. Résumé	74
2.14. Exercices	75
3. Études de cas de cristallographie aux rayons X	77
3.1. Introduction	77
3.2. Étude de cas 1 : un complexe de thiolate de mercure	77

3.3.	Étude de cas 2 : un complexe chiral de rhodium solvaté	82
3.4.	Étude de cas 3 : des microcristaux d'un composé organique chiral	87
3.5.	Étude de cas 4 : chaîne de coordination de métal	91
3.6.	Étude de cas 5 : un palladium en complexe avec une phosphine volumineuse pour des études de catalyse	95
3.7.	Résumé	98
3.8.	Exercices	98
4.	Sujets associés	101
4.1.	Introduction	101
4.2.	Diffraction de neutrons par un cristal unique	101
4.3.	Diffraction par des échantillons en poudre	105
4.4.	Cristallographie des macromolécules biologiques	107
4.5.	Prédiction de structure cristalline	112
4.6.	Résumé	113
4.7.	Exercices	114
	Glossaire	117
	Bibliographie	123
	Index	125