

Table des matières

Introduction	3
Chapitre I	Formalisme Mathématique
I.1 Interaction Des Rayons X Avec La Matière.....	5
I.1.1. Amplitude et Intensité De Diffraction Des Rayons X.....	5
I.1.2. Facteur de Structure.....	7
I.1.3. Facteur De Diffusion Atomique.....	9
I.1.4. Facteur de température des atomes	9
I.2. Corrections Apportées Aux Intensités Mesurées... ..	12
I.2.1. Correction De Polarisation.....	12
I.2.2. Correction De Lorentz	14
I.2.3. Correction De L'absorption	16
I.2.4. Correction d'extinction.....	17
I.2.4.1. Extinction primaire.....	17
I.2.4.2. Extinction secondaire.....	18
Chapitre II	Dispositif Expérimental Et Traitement Des Données Bruts
II.1. Système diffractométrique.....	20
II.1.1 Production des rayons X.....	20
II.1.2. La détection et le comptage.....	20
II.1.3. Goniomètre à quatre cercles.....	22
II.1.4. Ordinateur.....	27
II.2. Système de refroidissement.....	28
II.3. Enregistrement et collecte des données.....	29
II.3.1. Enregistrement des données.....	29
II.3.2. Traitement du spectre brut.....	31
II.3.3. Stockage des résultats de la collection de données	33
II.3.4. Détermination de la maille	33
II.4. Données Cristallographiques.....	34
Chapitre III	Résolution et affinement structural
II. 1. Résolution des structures	36
III. 1. 1 Principe de la résolution des structures	36
III. 1. 2 Calcul des phases par les méthodes directes.....	39
III.1. 3 Stratégie de la résolution	39
III. 1. 3. 1 Logiciel WINGX	40
III. 1. 3. 2 Détermination du Groupe d'Espace	41
III.1. 3. 3 Stratégie des méthodes directes (Programme SHELXS).....	44
III. 2. Affinement de la structure	50
III. 2. 1 Principe de l'affinement	50
III. 2. 2 Paramètres de déplacement	51
III. 2. 3 Le Facteur R	52
III. 2. 4 Affinement de la structure de la molécule C ₈ H ₉ NOS.....	52
III. 2. 5 Détermination des paramètres d'agitation thermique des hydrogènes..	58

Chapitre IV	Analyse structurale de la molécule	
IV. 1	Longueurs des liaisons chimiques	59
IV. 2	Angle de Valence	60
IV. 3	Angles de torsion	61
IV. 4	Liaison Hydrogène	63
IV.5.	Cartes de densité de déformation expérimentale.....	66
Chapitre V	Analyse De Distribution De Densité Electronique	
V. 1	Généralités	67
V. 1. 1	Formalisme Kappa	67
V. 1. 2	Modèle multipolaire.....	68
V. 1. 3	Réduction des populations.....	69
V. 2	Affinement Kappa et multipolaire.....	72
V. 2. 1	Affinement Kappa.....	72
V. 2. 2	Affinement multipolaire	73
V. 3	Distribution de la densité de déformation électronique de la molécule.....	77
V. 3. 1	Cartes de densité de déformation sur le long des liaisons de la molécule	77
V. 3. 2	Cartes de densité de déformation sur la liaison hydrogène.....	80
V. 4	Moment dipolaire moléculaire	81
V. 4. 1	Moment dipolaire dans un système d'axes moléculaires.....	82
V. 4. 2	Orientation du moment dipolaire	83
V. 5	Potentiel électrostatique	84
Conclusion		87
Annexes		
A	Programme de BLESSING	89
B	SHELX	90
C	MODELE SUR LES réflexions mesurée	91
D	Données cristallographiques et les conditions expérimentales	92
E	Les distances interatomiques	93
F	Fiche d'identité du MOPRO	94
Bibliographies		95