



European Crystallographic Association

ECA

Report for school financial support

1. Date, location and title of meeting:

Title meeting	5th School on Crystal Structure Determination from Diffraction Data: Application on Powder sample
Location	Hammamet, Tunisia
Date	22th to 24th March 2019
Website address	http://www.issbat.rnu.tn/5th_school_on_crystal_determination_from_diffraction_data.html

2. Please describe how the bursary was used.

The ECA funds were used to support young scientists (under 35) from Morocco, Algeria and Tunisia as bursary of an amount of 130 Euros per participant to attend the school.

3. Report (min. 250 words, max. 500 words, will be published on the ECA web site)

* Total number of participants: 75

* Number of participants attending the course was 65, there were also non-Tunisian delegates from Algeria and Morocco.

LIST OF THE LECTURERS:

- 1 Prof. Mongi BEN AMARA Mongi.Benamara@fsm.rnu.tn Faculté des Sciences de Monastir
- 2 Dr. Jan ROHLICEK rohlicek@fzu.cz Academie des Sciences de Prague
- 3 Dr. Mouna BEN YAHIA mouna.ben-yahia@univ-montp2.fr Université Montpellier 2
- 4 Dr. Thierry ROISNEL thierry.roisnel@univ-rennes1.fr Université de Rennes
- 5 Dr. Mathieu PASTUREL mathieu.pasturel@univ-rennes1.fr Université de Rennes
- 6 Dr. Jan GERTENBACH jan.gertenbach@panalytical.com Malvern Panalytical B.V.

During this school, we tried to introduce the theory of powder diffraction and the methods available for crystal structure determination and for microstructure analysis from powder diffraction data (indexing, space group determination, structural and microstructural refinement techniques).

One unique aspect of this school had been the extensive use of computer programs during hands-on sessions dedicated to educational exercises.

Topics:

***Crystal Structure Determination from Powder Diffraction Data.**

***Physics of Diffraction.**

***Exercises of structure solution and refinement.**

THE PROGRAM:

Programme de la 5^{ème} Ecole sur la détermination de structure cristalline à partir des données de diffraction: Application sur poudre cristalline

Vendredi 22 mars 2019

8H00 – 8H30 /8H30 – 9H00	Inscription /Cérémonie d'ouverture	
9H00 – 10H00	Cours: Elément de cristallographie géométrique (Prof . M. Ben Amar , Université Monastir)	
10H00 – 11H10	Cours: Théorie simplifiée de la diffraction des rayons-X (Cours: Théorie simplifiée de la diffraction des rayons-X (Mathieu Pasturel, U. Rennes)	
11H10 – 11H30	Pause café	
11H30 – 13H00	<u>Salle A : Niveau Débutant</u> TP I: Introduction à la description mathématique des diffractogrammes, profils de pics –résolution (Dr. Thierry ROISNEL, U. Rennes 1)	<u>Salle B : Niveau Avancé</u> TP: Indexation, Analyses cristallographiques. (Maille, symétrie, groupe d'espace). Ajustement de profil et Extraction d'intensités (Dr. Jan ROHLICEK, A.S. Czech Republic)
	Déjeuner	
14H30-16h10	Salle A: TP I: Indexation et Analyses cristallogr. (Maille, symétrie, groupe d'espace) (Mathieu Pasturel, U. Rennes)	Salle B: TP : Détermination de structures "ab initio" sur poudres -Résolution structurale : Méthode de l'espace direct (Dr. Jan ROHLICEK , A.S. Czech Republic)
16H10 – 16H30	Pause café	

16H30 – 18H00	<u>Salle A: TP II</u> : Extraction intensités– Ajustement de profil (suite TP I) (Dr. Thierry ROISNEL, U. Rennes 1)	<u>Salle B: TP</u> : Travaux pratiques sur la résolution de structures cristallines (Utilisation de la base de données CSD, Programme Fox) (Dr. Jan ROHLICEK , A.S. Czech Republic)
18H00 – 18H30	Session Poster	
Samedi 23 mars 2019		
9H00 – 10H00	<u>Salle A</u> : Cours : Introduction à la méthode de Rietveld - stratégie d'affinement(Dr. Thierry ROISNEL, Univ. Rennes 1)	
10H00 – 11H10	<u>Salle A</u> : T P: Affinement Rietveld-stratégie d'affinement(Dr. T.ROISNEL, Univ. Rennes 1)	
11H10 – 11H30	Pause café	
11H30 – 13H00	<u>Salle A</u> : TP: Identification des phases connues (bases de données) Décomposition d'un diagramme d'échantillon polycristallin-extraction des intensités intégrées des raies. (Mathieu Pasturel, U. Rennes)	
13H00 – 14H30	Déjeuner	
14H30 – 16H10	<u>Salle A</u> : TP I : Analyses microstructurales (Dr. Jan Gertenbach, Panalytical)	
16H10 – 16H30	Pause café	
16H30 – 18H00	<u>Salle A</u> : TP II : Analyses microstructurales (Dr. Jan Gertenbach, Panalytical)	

17H30 – 18H00	<u>Salle A</u> : Crystal structure determination and phase transitions of some $AIBlVO_4$ vanadates from XRPD experiments (Dr. Jan Gertenbach, Panalytical)
18H00 – 19H00	Session Poster
Dimanche 24 mars 2019	
9H00 – 9H45	<u>Salle A</u> : Cours: Introduction à la méthode DFT (Théorie de la Fonctionnelle de la Densité) - Modélisation des propriétés macroscopiques et microscopiques de systèmes périodiques. Préambule théorique: principes et approximations (Dr. Mouna BEN YAHIA, U. Montpellier)
9H50-10H30	<u>Salle A</u> : TP : Introduction au logiciels de calculs , exemple d'application : polymorphes du carbone. (Dr. Mouna BEN YAHIA, U. Montpellier)
10H30 – 11H00	<u>Salle A</u> : Suite TP : Introduction au logiciel de Calculs , exemple d'application : polymorphes du carbone. (Dr. Mouna BEN YAHIA, U. Montpellier)
11H00-12H00	Clôture et Déjeuner

LIST OF THE BURSARY HOLDERS FROM THE ECA OF THE AMOUNT OF 66.66 Euros (225 TND) WHICH COVERS HALF THE PARTICIPATION FEE

Nom et prénom	Adresse mail	Université
Hanane MEZZOURH	mezzourhhanane@gmail.com	University of Cadi Ayyad Marrakech Morocco
Said BEN MOUMEN	said.benmoumen@yahoo.fr>	University of Cadi Ayyad Marrakech Morocco
Nour El Houda BELKAFOUF	nourelhouda.belkafouf@univ-mosta.dz	university of Mostaganem Algeria
Amina BEN AYED	benayed.aminalfpc@gmail.com	faculty of sciences of Sfax
Rahma ZRELLI	rahmazrelli@yahoo.fr	Faculty of Sciences of Bizerta
Chayma ABBES	chayma.abbes.1425@gmail.com	Faculty of Sciences of Tunis
Boutheina MESSAI	boutheina.messai1993@gmail.com	Faculty of sciences of Monastir
Sarra ABDI	sarra.abdi.94@gmail.com	University of Tunis El Manar, Faculty of Sciences
Chaima OULED AMOR	amorchaima92@gmail.com	Faculty of sciences of Gafsa
Hela LANDOLSI	hela.landolsi90@gmail.com	University of Tunis El Manar, Faculty of Sciences
Wiem JEDIDI	jedidiwiem@gmail.com	University of Tunis El Manar, Faculty of Sciences
Asma BOUARISSA (Algeria)	asma.bouarissa@fst.utm.tn	University of Tunis El Manar, Faculty of Sciences
Mayssa Zouaoui	zouaouimayssa05@gmail.com	faculté des sciences de Tunis, Univ. Tunis El Manar
Mouna DERBALI	mounaderbali0@gmail.com	University of Tunis El Manar, Faculty of Sciences
Mariem Ben Jomaa	mariem.benjemaach@gmail.com	faculté des sciences de Tunis, Univ. Tunis El Manar
Wejden JBELI	wej.22jbeli@gmail.com	faculté des sciences de Tunis, Univ. Tunis El Manar

Prof. Rached BEN HASSEN, Chairman