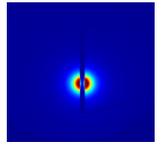


Atelier SAXS/SANS

26 & 27 septembre 2023 / ESPCI - 10 rue Vauquelin - Paris



Mardi 26 septembre 2023

14h-15h Introduction à la diffusion du rayonnement – Martin In

Principe. Domaines de q appropriés, choix de longueur d'onde du faisceau, distance(s) au détecteur. Exemple : fluctuations de densité dans un liquide.

15h-16h Contraste, variation – Julian Oberdisse

Cas des systèmes biologiques (protéines)

16h-16h30 Pause-café

16h30-17h30 Traitement de données – François Boué

Spectre 2D : Traitement de données à partir de Foxtrot (« nettoyage » du faisceau, moyennage radial (anisotropie/orientation ?), soustraction bruit de fond, mise à l'échelle absolue, transmission)

Spectre 1D : Soustraction du capillaire, capillaire/ cellule de mesure idéal(e), solvant, bruit de fond, témoin idéal.

Conséquences sur l'analyse des données.

17h30-19h00 Atelier pratique traitement de données (2 groupes) (Evelyne Lutton, Qiang Zhang)

On pourra partir d'exemples pratiques de résultats proposés par les participants.

Soirée libre.

Mercredi 27 septembre 2023

9h00-10h00 Milieux dilués : détermination du rayon de giration, du volume (invariant de Porod), de la masse moléculaire. Représentation de Kratky et flexibilité – Pierre Roblin

10h00-10h45 Du dilué au très concentré : extrapolations du facteur de forme, facteur de structure, pics, longueur de corrélation, spécificités du concentré – François Boué-Fabrice Cousin

10h45-11h15 Pause-café

11h15-12h00 A l'intérieur des objets : géométrie vs exposants, tailles caractéristiques, « cross-overs » en q – A l'extérieur des objets : remontées aux petits angles.

– François Boué-Fabrice Cousin

12h00-13h30 Pause-déjeuner (sur place)

13h30-15h30 - Ateliers

Groupe 1 – Retour d'expériences – François Boué, Denis Renard et al.

Présentation par les utilisateurs/utilisatrices de leurs expériences en diffusion aux petits angles (X, neutrons, lumière) et échanges/discussion autour de leurs résultats

Groupe 2 – Modélisation, structures – Pierre Roblin

13h30-14h00 Ajustement 1D de courbes : Modèles simples, SASView

14h00-15h00 Calcul de la fonction de distribution de distance (PDDF, $p(r)$). Modèles 3D basse résolution

15h00-15h30 Couplage SEC-SAXS