

# Facteurs de diffusion asphériques de Hirshfeld dans les affinements contre des données 3D ED.

Dr Emre YÖRÜK (Institut de physique de l'académie tchèque des sciences, Prague)

Petr BRÁZDA (Institut de physique de l'académie tchèque des sciences, Prague)

Lukáš PALATINUS (Institut de physique de l'académie tchèque des sciences, Prague)

## Abstract

La diffraction d'électrons en 3D (3D ED) émerge comme une alternative à la diffraction des rayons X pour la caractérisation structurale des cristaux submicrométriques. Avec des sections efficaces de diffusion typiquement 104 fois plus grandes que celles des rayons X, les données peuvent être collectées à partir de grains de taille nanométrique, et des monocristaux peuvent être isolés à partir d'échantillons microcristallins. D'autres avantages incluent la détermination directe de la structure absolue, une localisation plus facile des atomes légers, et une sensibilité accrue aux charges atomiques. Les affinements prenant en compte la diffusion multiple des électrons permettent d'obtenir des facteurs-R comparables à ceux de la diffraction des rayons X.

Nous travaillons sur l'amélioration de la modélisation des données 3D ED en exploitant des techniques d'affinement issues du domaine de la cristallographie quantique. Nous avons déjà montré que la prise en compte des transferts de charge entre les atomes améliore la précision des structures. Nous présentons maintenant des résultats sur la mise en œuvre de facteurs de diffusion asphériques obtenus grâce au formalisme de Hirshfeld (HAR). Cette procédure comprend des calculs de densité électronique via DFT en partant de la structure affinée, et l'application de la décomposition de Hirshfeld pour calculer les facteurs de diffusion asphériques via la transformée de Fourier. Ces facteurs de diffusion sont ensuite insérés dans l'affinement pour obtenir un modèle plus précis, le cycle étant répété jusqu'à convergence.

Nous présentons ici les résultats sur le paracétamol. Nos résultats montrent une amélioration de  $wR(\text{all})$  de 7,42% à 6,84%, avec une réduction des résidus dans les cartes de Fourier de différence. La comparaison des longueurs de liaison avec les valeurs de référence des neutrons révèle un meilleur accord, suggérant une amélioration globale de la précision de l'affinement.