

REGISTRE FIAS DES SPÉCIFICATIONS DE RECHERCHE

Profil CIF minimal pour les structures moléculaires de la plateforme de diffraction X

IDENTIFIANT DU REGISTRE

FOAR-CON2X-K645G80S7

TYPE D'OBJET

Profil d'une norme externe

MATURITÉ DU DOCUMENT

Candidat pour un usage stable

PUBLIÉE

14 décembre 2018, 12:00 UTC

VERSION

1.0

DOMAINE

Chimie et science des matériaux

SOUMISE

28 septembre 2018, 12:00 UTC

LICENCE

Creative Commons Attribution 4.0

VERSION FAISANT AUTORITÉ

L'enregistrement consigne le résultat de l'examen du Registre pour cette version : la soumission a été suffisamment identifiée, documentée et déterminée en interne pour la procédure indiquée. La portée, l'adoption et les conventions concurrentes sont documentées séparément lorsqu'il y a lieu.

STATUT AU REGISTRE**Acceptée pour enregistrement**

14 décembre 2018, 12:00 UTC

Description principale

TYPE DE SOUMISSION

Nouveau concept de registre

TITRE COMPLET

Profil CIF minimal pour les structures moléculaires de la plateforme de diffraction X

TITRE COURT OU ACRONYME

Profil CIF-DRX

TYPE D'OBJET

Profil d'une norme externe

STATUT REVENDIQUÉ PAR LE DÉPOSANT

Norme de projet

MATURITÉ DE CETTE VERSION

Candidat pour un usage stable

VERSION

1.0

DOMAINE PRINCIPAL

Chimie et science des matériaux

MOTS-CLÉS

- cristallographie
- diffraction des rayons X
- CIF
- checkCIF
- chimie moléculaire

PROBLÈME, PORTÉE ET EXCLUSIONS

Le profil fixe le paquet minimal remis par un laboratoire de chimie moléculaire à l'issue d'une détermination structurale monocristalline: CIF, facteurs de structure, rapport checkCIF et note de résolution des alertes A/B. Son périmètre concerne le conditionnement et la traçabilité du dépôt; le modèle CIF de l'IUCr, les critères éditoriaux d'une revue et l'interprétation chimique relèvent de leurs cadres propres.

UTILISATEURS ET CONTEXTES VISÉS

- Utilisateurs d'une plateforme de diffraction monocristalline
- Ingénieurs responsables de l'archivage des déterminations
- Auteurs préparant le dépôt d'une structure avec un article

RELATION AVEC LA PRATIQUE EXISTANTE

Profile une norme existante

CONTEXTE SCIENTIFIQUE, SOURCES ET ÉCHANGES SCIENTIFIQUES

Cette section décrit les fondements scientifiques, les travaux sous-jacents et les sources de la spécification, ainsi que les groupes de recherche et les cadres scientifiques dans lesquels la solution proposée ou sa formalisation a été présentée ou discutée. Elle documente le contexte et la nature de ces échanges scientifiques.

La détermination d'une structure moléculaire par diffraction X produit plusieurs éléments complémentaires : modèle cristallographique, facteurs de structure et résultats de validation. Le CIF et les dictionnaires de l'IUCr offrent un langage partagé pour les décrire. Le service checkCIF examine la syntaxe, la géométrie, la symétrie, les paramètres de déplacement et les facteurs de structure ; ses alertes appellent une réponse documentée qui doit accompagner le dépôt.

La plateforme DRX de l'IPCM, à Sorbonne Université et au CNRS, constitue le cadre de recherche et d'échange entre cristallographes et chimistes moléculaires. Les travaux de J.-R. Jiménez et al. (2018) sur un complexe scorpionate illustrent les applications structurales de cet environnement, auquel participe L.-M. Chamoreau. La comparaison et la réutilisation de telles déterminations demandent que les fichiers expérimentaux, le modèle et les explications des alertes puissent être retrouvés ensemble.

Les exigences de validation et de publication des structures ont été discutées à ECM31, à Oviedo, du 22 au 27 août 2018. Dans sa contribution sur les pratiques des services de cristallographie, A. Ellern examine les limites de l'affinement, la justification des modèles et la fourniture des données d'intensité et d'affinement avec le CIF. Cette discussion éclaire le besoin d'un dossier de dépôt réunissant les données structurales et les éléments nécessaires à leur examen.

Le profil formalise cette continuité documentaire sous la forme d'un paquet réunissant CIF, facteurs de structure, rapport checkCIF et note structurée sur les alertes A et B. La version de chaque fichier et les réponses apportées aux contrôles deviennent ainsi vérifiables lors de la remise et de l'archivage d'une détermination structurale.

Références:

- IUCr, Crystallographic Information Framework. Texte: <https://www.iucr.org/what-we-do/digital-standards/cif>
- IUCr checkCIF validation service. Texte: <https://checkcif.iucr.org/>

- Jiménez J.-R. et al. A [FeIII(Tp)(CN)3]– scorpionate-based complex as a building block for designing ion storage hosts (Tp: hydrotrispyrazolylborate). Chemical Communications. 2018;54:5189–5192. DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CC01374H>
- IPCM, plateforme DRX — Lise-Marie Chamoreau. Texte: <https://ipcm.fr/plateformes/pt-drx/lise-marie-chamoreau/>
- Ellern A. Scope and limitations on refinement strategy. Service crystallographer's publishing woes. ECM31, Oviedo, 22–27 août 2018, résumé MS20-P03, p. e291. Recueil des résumés: https://ecm31.ecanews.org/archivos/pdf/Book_of_abstracts.pdf

STATUT DE NORMALISATION EXTERNE

Aucune prévue

LICENCE DE LA SPÉCIFICATION SOUMISE

Creative Commons Attribution 4.0

DÉCLARATION DE PUBLICATION

Oui

Profil d'une norme externe

NORME DE BASE, VERSION ET RÉFÉRENCE STABLE

Crystallographic Information Framework (CIF), syntaxe CIF 1.1 et dictionnaire coreCIF version 2.4.5 de l'IUCr, avec validation par le service checkCIF. Références stables: <https://www.iucr.org/what-we-do/digital-standards/cif> et https://www.iucr.org/cif/cifdic_html/1/cif_core.dic/index.html

QUELLE EST LA CIBLE DE CONFORMITÉ ?

Jeu de données ou collection d'enregistrements

FONCTIONNALITÉS REQUISES SÉLECTIONNÉES DANS LA NORME DE BASE

- CIF syntaxiquement valide utilisant les noms de données du dictionnaire core
- Coordonnées atomiques, paramètres de maille, groupe d'espace et détails d'affinement
- Fichier des facteurs de structure associé
- Rapport checkCIF complet daté
- Réponse pour chaque alerte de niveau A ou B
- Identifiant local de l'échantillon et date de collecte

FONCTIONNALITÉS EXCLUES OU INTERDITES

- Données biologiques macromoléculaires
- Diffraction sur poudre
- Remplacement des dictionnaires ou règles de validation de l'IUCr
- Affirmation qu'un rapport sans alerte démontre la justesse de la structure

EXTENSIONS OU CONTRAINTES LOCALES

Le paquet contient `manifest.yml`, le CIF, les facteurs de structure et le rapport checkCIF. Le manifeste lie les fichiers par SHA-256 et consigne l'instrument, la longueur d'onde, la température, le logiciel d'affinement avec version, ainsi que la disposition donnée à chaque alerte A/B: corrected, justified ou unresolved.

COMPATIBILITÉ AVEC LES IMPLÉMENTATIONS CONFORMES À LA NORME DE BASE

Le profil étend la norme de base

EXPLICATION DE LA COMPATIBILITÉ

Le CIF reste conforme à l'IUCr et peut être lu sans le manifeste local. Les fichiers additionnels étendent le paquet de dépôt et imposent une discipline d'archivage; les data names CIF et le fichier CIF de base restent inchangés.

TEST DE CONFORMITÉ DU PROFIL

Vérifier que les quatre composants du paquet existent et correspondent aux digests; exécuter checkCIF sur le CIF et les facteurs; comparer les alertes A/B au manifeste; vérifier que chacune possède une disposition non vide. Une alerte justifiée reste visible; son acceptabilité scientifique relève d'une évaluation séparée.

Historique d'examen du Registre

Soumission reçue

28 septembre 2018, 12:00 UTC

Soumission reçue.

Acceptée pour enregistrement

14 décembre 2018, 12:00 UTC

Accepté comme profil local strict de CIF. La portée a été limitée au conditionnement et à la traçabilité; les règles de cristallographie restent celles des référentiels cités.