



<https://www.afc.asso.fr/l-association/in-memoriam/howard-flack>

## Howard Flack



Howard D. Flack nous a quittés brutalement le jeudi 2 février 2017 à l'âge de 73 ans. Howard est né le 27 août 1943 dans le Surrey en Angleterre. Après ses études primaires et secondaires et l'obtention de son « honours degree » à l'Université de Nottingham en 1965, il entre à l'University College London pour préparer son Ph.D. qu'il obtient en 1968 « *Studies of Disorder in Anthrone and in Mixed Crystals of Anthrone-Anthraquinone* ».

Après sa thèse et jusqu'en 1972 il travaille comme *Research Assistant* dans le Cavendish Laboratory à l'Université de Cambridge. En janvier 1972, il quitte l'Angleterre pour s'installer en Suisse où il

prend un poste de Maître-assistant dans le laboratoire de Cristallographie à l'Université de Genève où il terminera sa carrière après avoir occupé un poste de professeur suppléant à l'Université de Lausanne d'avril à septembre 1982 puis un poste de professeur suppléant dans la même université entre octobre 2001 et mars 2002. Toutefois, il restera citoyen britannique. Toute sa carrière a été dévolue à l'enseignement dans les domaines de la chimie physique, la chimie organique, les mathématiques et bien évidemment la cristallographie qui était son domaine privilégié. Il a ainsi enseigné les méthodes de calcul en cristallographie (*Computational Methods in Crystallography*) à l'Université de Genève et dispensé des cours de cristallographie en 2ème, 3ème et 4ème année à l'Université de Lausanne. Entre 2001 et 2009 il a présenté un cours spécial sur « *The Chirality of Crystals and Molecules* » aux Universités de Genève, Lausanne, Berne, Fribourg, Neuchâtel, Nancy, Strasbourg et Zürich.

C'est dans ce dernier domaine qu'Howard est mondialement connu par ses travaux sur l'utilisation des rayons X pour définir la structure absolue ou la configuration absolue des molécules étudiées. Les travaux de Bijvoet dans les années 50 avaient montré que la loi de Friedel ( $F(hkl)=F(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ ) dans le cas de groupes d'espace non-centrosymétriques n'était pas valable et que, en fonction du terme de diffusion anormale des atomes constituant la structure, il était possible de différencier les  $F(hkl)$  des  $F(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ . Toutefois le travail du cristallographe restait fastidieux car il devait comparer les paires de Friedel une par une. L'apport de Howard dans ce domaine a été primordial et a révolutionné la façon dont on abordait l'étude de la configuration ou de la structure absolue. Ayant beaucoup travaillé sur les symétries, les désordres et les macles, Howard a eu l'idée de considérer le cristal comme étant constitué de deux domaines  $\mathbf{h}$  et  $-\mathbf{h}$  et donc de traiter le problème comme une macle particulière (macle par inversion) :

$$|F(\mathbf{h},x)|^2 = (1-x)|F(\mathbf{h})|^2 + x|F(-\mathbf{h})|^2$$

$x=0$  les coordonnées atomiques et le cristal ont la même polarité ou chiralité

$x=1$  les coordonnées atomiques et le cristal ont une polarité ou chiralité inversée

$0 < x < 1$  indique l'existence d'un problème

Ainsi, le paramètre  $x$  est la proportion des  $h$  par rapport aux  $-h$  et définit la polarité ou l'énantiomorphisme du système considéré. Ce paramètre  $x$  est mondialement connu sous le nom du **paramètre de Flack**.

En dehors de ses fonctions d'enseignant et de chercheur, Howard s'est investi au sein de la Société Suisse de Cristallographie comme membre puis secrétaire de 1981 à 1990, et de l'Union Internationale de Cristallographie (IUCr) de 1984 jusqu'à ces derniers temps. En particulier il a été membre (1984-1990) puis chairman (1990-1993) de la *Commission on Crystallographic Computing*, puis membre de la *Commission on Crystallographic Data* (1990-1993) et enfin membre de la *Commission on Mathematical and Theoretical Crystallography* (2005-2008).

Howard était un brillant esprit scientifique et pouvait aborder simultanément différents problèmes. Il adorait la vie et la bonne chère et avait un humour très « *british* ». C'était un excellent enseignant qui savait se mettre à la portée de tous et il était ouvert aux discussions. Les participants aux deux écoles de cristallographie organisées à Toulouse en 1999 et 2002 doivent se souvenir de ses cours et de sa présentation de la coupe du roi et aussi des exercices très pointus sur la symétrie lors des travaux dirigés. Sa disparition est une grande perte pour la communauté des cristallographes mais il restera à jamais présent parmi nous grâce au paramètre de Flack.

*Jean-Claude Daran, Laboratoire de Chimie de Coordination, Toulouse (7 février 2017)*