

Connaissances préalables recommandées : cristallographie niveau L3

Objectifs: - A l'issue de cette formation, l'étudiant devra être en mesure de déterminer le groupe d'espace d'un monocristal, de déterminer la composition d'un mélange de poudres, de déterminer la valeur de contraintes dans un *matériau massif ou encore déterminer l'orientation de croissance des grains sur un films minces. De plus l'étudiant maîtrisera la lecture des tables internationales de cristallographie qui constitue l'ouvrage de référence de ce cours*

Contenu de la matière :

1 – Loi de répétition géométrique des atomes

- les différentes opérations de symétrie et les associations (classes de Laüé)
- les différents groupes d'espaces
- apprendre à lire **et à utiliser** les tables internationales de cristallographie

2– Diffraction par les solides

- production des rayons X
- interaction RX/matière (Bragg)
- facteurs de diffusion, de structure et de forme.
- obtention d'un diffractogramme (i.e. les différents appareils)
- lecture et exploitation d'un diffractogramme (fiche JCPDF/.../ affinement Rietveld)
- Cristallinité d'une poudre (de Scherrer à Warren-Averbach)
- Contraintes macroscopiques dans un matériau massif ($\sin^2\psi$ et Hooke)

3 – Diffraction par les monocristaux

- le principe : réseau réciproque, conditions de Laue, sphères d'Ewald et de résolution
- reconstruction du réseau réciproque, détermination du groupe d'espace.
- résolution structurale : méthodes directes et de Patterson.
- calcul des facteurs de structures de structures types
- les différents appareils (de la chambre de Weissenberg aux diffractomètres automatiques équipés de caméras CCD)

4 – Travaux pratiques

Etudes de diffractogrammes de poudre

- simulation numérique de diffractogrammes théoriques, dépouillement de diffractogrammes expérimentaux (correspondants aux produits élaborés en CIP)
- Détermination structurale par affinement Rietveld

Références :

- **Van meerssche et al.,** *Introduction à la cristallographie et à la chimie structurale*, Ed. Peeters, 1984
- **J.J. Rousseau,** *Cristallographie géométrique et radiocristallographie*, Ed Dunod, 2000
- **L. Smart,** *Introduction à la chimie du solide*, Masson, 1999
- **C. Kittel,** *Physique de l'état solide*, Dunod université, 5eme édition.