



# Diffraction par les Matériaux Polycristallins

Niveau 1

Institut des Matériaux Jean Rouxel, Nantes

Mars 2024



# Programme de Formation

<b>Objectifs</b>	<p>A l'issue de la formation, les apprenants seront capables de :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Acquérir ou parfaire les bases théoriques et pratiques de la DRX sur poudre. Les différents points de la formation seront illustrés par des applications allant de l'affinement structural, à l'analyse des tailles de cristallites, à la quantification de phases, à la détermination structurale ab initio...</li> </ul>
<b>Public/Prérequis</b>	<p>Toute personne, du secteur public ou privé, désireuse d'acquérir une formation théorique et pratique en DRX sur poudre.</p> <p>Des notions de base en cristallographie sont souhaitables mais pas nécessaires.</p>
<b>Durée</b>	6 demi-journées de cours et 4 demi-journées de travaux pratiques, soit 36 heures de formation au total.
<b>Date</b>	En Mars 2024 soit 5 jours de formation
<b>Effectif</b>	20 participants
<b>Lieu</b>	Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel – Site du Campus Sciences et Techniques - Nantes
<b>Tarif de la prestation (nets de taxe)</b>	<p>Tarif « secteur privé / industriels » : 1900 €            Tarif « secteur public » Universitaires, CNRS, CDD, Post-Doc : 800 €            Doctorants : 500 €</p> <p>Frais de déplacement des intervenants inclus            Nantes Université n'est pas assujettie à la TVA pour les actions de formation continue</p>
<b>Moyens pédagogiques</b>	<p>Une large part du programme sera consacrée à des séances de travaux pratiques (cours magistral le matin et mise en pratique immédiate, l'après-midi).</p> <p>Pour ce faire, les participants travaillent en binôme sur ordinateurs où sont pré chargés les logiciels de traitement, les exercices ainsi que les données expérimentales.</p>
<b>Accompagnement pédagogique (présentiel)</b>	<p>Responsables Pédagogiques : Olivier HERNANDEZ, Professeur &amp; Mayte CALDES, Docteur à l'Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel (IMN Nantes)</p> <p>Secrétariat : Richard BASCHERA, Gestionnaire Ressources documentaires</p>
<b>Modalités d'évaluation</b>	<p>Un questionnaire d'évaluation de la satisfaction des participants est remis en fin de formation.</p> <p>l'ensemble des logiciels de traitement, des exercices ainsi que des données expérimentales est fourni aux participants qui peuvent ainsi, de retour dans leur laboratoire, reprendre la totalité de la démarche expérimentale.</p> <p>Une aide par téléphone et un échange de fichiers est possible en cas de blocage.</p>
<b>Suivi administratif</b>	<p>Service Formation Continue et Alternance (FOCAL)            Faculté des Sciences &amp; Techniques 2, rue de la Houssinière - 44322 Nantes Cx 3  <u>Correspondante</u> : Delphine VINCE - Assistante de formation            T. 02 51 12 53 95 / delphine.vince@univ-nantes.fr</p> <p>Les feuilles d'émargement cosignées par le participant et les intervenants par demi-journée témoignent de la réalisation effective de la formation.</p>

<b>Type d'action</b>	Une attestation de fin de formation est remise au stagiaire en fin de parcours.
	Action de formation

<b>Références légales</b>	<p>Art. L6353-1 du Code du travail</p> <p>Art. L6353-8 du Code du travail</p> <p>Art. D6353-3 du Code du travail (FOAD)</p>
<b>Organisme de formation</b>	<p>NANTES UNIVERSITE – Pôle Sciences et technologie</p> <p>Faculté des Sciences &amp; des Techniques</p> <p>Service Formation Continue et Alternance</p> <p>2 rue de la Houssinière – BP 92208 – 44 322 Nantes Cedex 3</p> <p>Code APE : 8542Z</p> <p>SIRET : 130 029 747 001 15</p> <p>Déclaration d'activité enregistrée sous le n° 52 44 09582 44 auprès du Préfet de Région des Pays de la Loire.</p> <p>Statut juridique : EPSCP</p>

# Contenu pédagogique :

<b>Accueil et présentation de la formation</b>	<b>0H30</b>
<b>Diffraction des RX par les poudres :</b>	<b>1H00</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Principes fondamentaux</li> <li>• Instrumentation</li> <li>• La préparation des échantillons et ses implications</li> <li>• Erreurs et aberrations</li> <li>• Application de la diffraction par les poudres</li> </ul>	<b>2H45</b>
<b>PRESENTATION DU PROGRAMME EVA</b>	<b>1H00</b>
<b>TP Tournants :</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Recherche de Phases</li> <li>• Acquisition de données sur diffractomètres Inel et Bruker</li> <li>• Préparation d'échantillons</li> </ul>	<b>2H45</b>
<b>Les programmes de décomposition de diagramme Winplotr et d'indexation (Treor, Dicvol, Chekcell)</b>	<b>1H15</b>
<b>Symétrie dans les cristaux :</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Eléments de symétrie, réseau, classes de symétrie</li> <li>• Groupes d'espace</li> <li>• Utilisation des Tables Internationales de Cristallographie</li> </ul>	<b>2H00</b>
<b>TP Recherches de symétrie et Affinement de paramètres de maille</b>	<b>4H30</b>
<b>Méthodes d'analyses des diagrammes de diffraction de poudres (Neutrons, RX) :</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Méthodes d'analyse de diagrammes de diffraction (en dispersion angulaire)</li> <li>• Affinement mathématique des profils</li> <li>• Analyse de profils avec contrainte de maille</li> <li>• Analyse RIETVELD (analyse des profils avec contrainte structurale)</li> </ul>	<b>3H15</b>
<b>PRESENTATION DU PROGRAMME RIETVELD</b>	<b>1H15</b>
<b>TD Initiation à l'affinement de profil avec contrainte de maille et à la méthode de Rietveld :</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Utilisation de la chaîne de programmes permettant l'affinement structural d'un composé à partir de son diagramme de poudre</li> </ul>	<b>3H15</b>

<b>Détermination structurale Ab initio à partir d'une liste (d, intensité) :</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Méthodologie</li> <li>• Méthodes d'indexation automatique</li> <li>• Fonction de patterson, méthodes directes, recuit simulé et «Charge flipping »</li> </ul>	<b>3H15</b>
<b>Options Ateliers TP :</b>	<b>Présentiel</b>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Option 1 : analyse quantitative par la méthode de RIETVELD</li> <li>• Option 2 : détermination structurale ab initio</li> <li>• Option 3 : analyse par la méthode de Rietveld : perfectionnement</li> </ul>	<b>4H30</b>
<b>Caractérisation structurale des matériaux par diffraction électronique :</b>	
<p>Détermination :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• du type de réseau</li> <li>• de la classe de Lauë</li> <li>• de la classe de symétrie</li> <li>• du groupe d'espace</li> <li>• de la structure</li> </ul>	<b>3H15</b>
<b>Bilan de fin de formation :</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Bilan de la semaine et utilisation de programmes annexes : Diamond, Vesta (visualisation), comparaison des caractéristiques, performance et stabilité de différents programmes Rietveld...</li> <li>• Analyse quantitative en présence de phases amorphes</li> <li>• Compléments sur les microdéformations (formalisme de Stephens)</li> </ul>	<b>2H30</b>
<b>TOTAL HEURES :</b>	<b>36 HEURES</b>

# Liste des intervenants

---

- > Mayte CALDES, **Co-responsable pédagogique**, Docteur à l'Institut des Matériaux de Nantes Jean ROUXEL
- > Olivier HERNANDEZ, **Co-responsable pédagogique**, Professeur à l'Institut des Matériaux de Nantes Jean ROUXEL
  
- > BORDET Pierre, Docteur, Institut Néel Grenoble
- > DENIARD Philippe, Docteur à l'Institut des Matériaux de Nantes Jean ROUXEL
- > HERNANDEZ Olivier, Professeur à l'Institut des Matériaux de Nantes Jean ROUXEL
- > CALDES Mayte, Docteur à l'Institut des Matériaux de Nantes Jean ROUXEL



Service Formation Continue et Alternance  
Enregistré sous le N°52 44 09582 44. Cet enregistrement ne vaut pas agrément de l'Etat  
Code APE : 8542Z  
[focal@univ-nantes.fr](mailto:focal@univ-nantes.fr)

[univ-nantes.fr/focal](http://univ-nantes.fr/focal)