



19^e FORMATION PERMANENTE
DIFFRACTION PAR LES MATERIAUX POLYCRISTALLINS
20 - 24 Septembre 2010

PROGRAMME

Lundi 20 septembre 2010

- 09H00 Accueil des stagiaires
- 09H10 **PRESENTATION DE LA FORMATION** - Dr. P. DENIARD
- 09H30 **DIFFRACTION DES RX PAR LES POUDRES** - Dr. P. DENIARD
- Principes fondamentaux
 - Instrumentation
 - La préparation des échantillons et ses implications
 - Erreurs et aberrations
 - Application de la diffraction par les poudres
- 12H15 Repas
- 14H15 **PRESENTATION DU PROGRAMME EVA** (salle de TP) - Dr. A. LAFOND
- 15H15 **TP TOURNANTS :**
- Recherche de Phases
 - Acquisition de données sur diffractomètres Inel et Bruker
 - Préparation d'échantillons
- 18H00 - Pot d'accueil et photo de groupe

Mardi 21 septembre 2010

- 09H00 **SYMETRIE DANS LES CRISTAUX** - Dr. F. BOUCHER
- Eléments de symétrie, réseau, classes de symétrie
 - Groupes d'espace
 - Utilisation des Tables Internationales de Cristallographie
- 11H15 **LES PROGRAMMES DE DECOMPOSITION DE DIAGRAMME WINPLOTR et D'INDEXATION (TREOR, DICVOL, CHEKCELL)** - Dr. Ph. DENIARD
- 12H15 Repas
- 14H00 **TP RECHERCHE DE SYMETRIE ET AFFINEMENT DE PARAMETRES DE MAILLE**
- 18H30 Fin

Mercredi 22 septembre 2010

- 09H00 **METHODES D'ANALYSES DES DIAGRAMMES DE DIFFRACTION DE POUDRES (NEUTRONS, RX)** - Dr. P. BORDET
- Méthodes d'analyse de diagrammes de diffraction (en dispersion angulaire)
 - Affinement mathématique des profils
 - Analyse de profils avec contrainte de maille
 - Analyse RIETVELD (analyse des profils avec contrainte structurale)
- 12H15 Repas
- 14H00 **PRESENTATION DU PROGRAMME FULLPROF** (salle TP) - Dr. P. DENIARD

- 14H45 **TD INITIATION A L'AFFINEMENT DE PROFIL AVEC CONTRAINTE DE MAILLE ET A LA METHODE DE RIETVELD**
- Utilisation de la chaîne de programmes permettant l'affinement structural d'un composé à partir de son diagramme de poudre
- 18H30 Fin

Jeudi 23 septembre 2010

- 09H00 **DETERMINATION STRUCTURALE Ab initio A PARTIR D'UNE LISTE (d, intensité)** - Dr. P. BORDET
- Méthodologie
 - Méthodes d'indexation automatique
 - Fonction de patterson, méthodes directes, recuit simulé et «Charge flipping «
- 12H15 Repas
- 14H00 **OPTIONS ATELIERS T.P.**
- Option 1 : analyse quantitative par la méthode de RIETVELD
Drs. P. BORDET / P. DENIARD
 - Option 2 : détermination structurale ab initio
Drs. P. BORDET / P. DENIARD
 - Option 3 : analyse par la méthode de Rietveld : perfectionnement
Drs. P. BORDET / P. DENIARD
- 18H30 Fin

Vendredi 24 septembre 2010

- 09H00 **CARACTERISATION STRUCTURALE DES MATERIAUX PAR DIFFRACTION ELECTRONIQUE** - Pr. J.P. Mornirolli
- Détermination :
 - Du type de réseau
 - De la classe de Lauë
 - De la classe de symétrie
 - Du groupe d'espace
 - De la structure
- 12H15 Repas
- 14H00 **PRESENTATIONS**
- bilan de la semaine et utilisation de programmes annexes : Diamond, Vesta (visualisation), GSAS (autre programme Rietveld), PowderCell (simulation de diagrammes), Endeavour (recuit simulé), FOX (parallel tempering)...
 - analyse quantitative en présence de phases amorphes
- 16H30 Fin