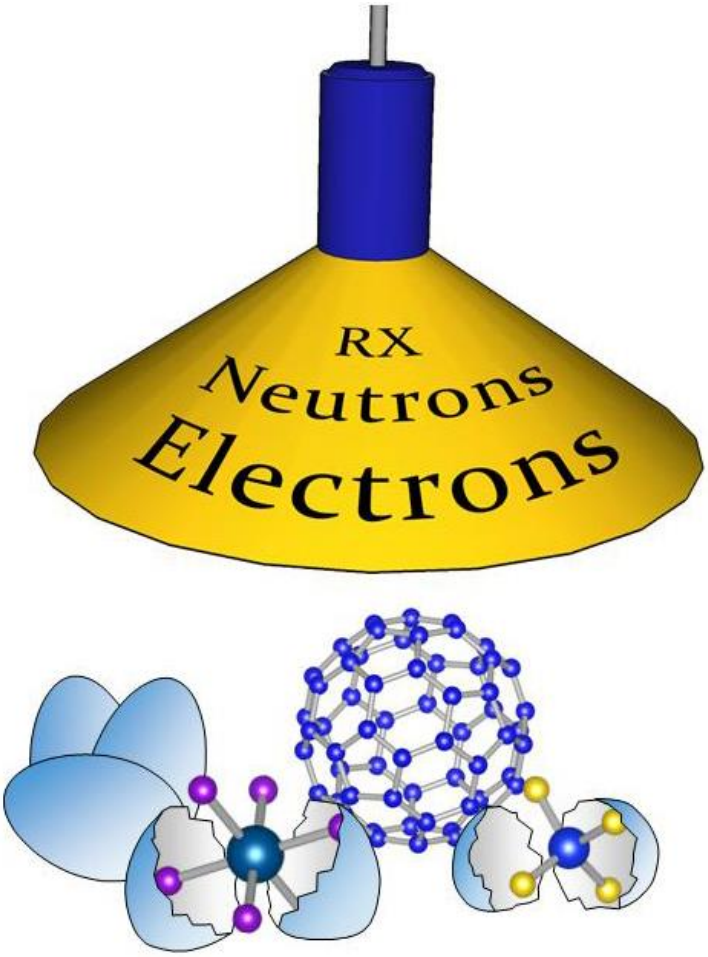
Nantes Université

IMN INSTITUT DES MATÉRIAUX DE NANTES JEAN ROUXEL

cnrs



13e FORMATION PERMANENTE

DIFFRACTION PAR LES MATERIAUX POLYCRISTALLINS :

AU-DELA DE L'AFFINEMENT STRUCTURAL

20 – 22 octobre 2026

PROGRAMME

Mardi 20 octobre 2026 : module Ab initio

09h00 **Présentation du module « Ab initio »**

09h15 **Résolution de structure *ab initio***

10h45 Pause café

12h00 Repas

14h00 **TP DETERMINATION STRUCTURALE AB INITIO**
Utilisation des différentes méthodes : méthodes directes et « charge flipping » (programme JANA2020 comme interface) ; recuit parallèle (programme FOX)

16h00 Pause café

18h00 Pot d'accueil et photo de groupe

Mercredi 21 octobre 2026 : module PDF

09h00 **Présentation du module « PDF »**

09h15 **Analyse PDF pour l'étude structurale des matériaux**

10h45 Pause café

12h00 Repas

14h00 **Analyse PDF pour l'étude structurale des matériaux (suite)**

16h00 Pause café

16h15 **Utilisation pratique des programmes PDFgetX3, PDFgui et MolPDF**

18h00 Pot d'accueil et photo de groupe

Jeudi 22 octobre 2026 : module PDF

09h00 **TP ANALYSE PDF**
Calcul de PDF à partir de données expérimentales (**PDFgetX3**), comparaison avec la PDF issue d'un affinement par la méthode de Rietveld, affinement dans l'espace direct à partir de données PDF (**PDFgui et MolPDF**)

10h30 Pause café

12h00 Repas

14h00 **TP ANALYSE PDF (suite)**
Calcul de PDF à partir de données expérimentales (**PDFgetX3**), comparaison avec la PDF issue d'un affinement par la méthode de Rietveld, affinement dans l'espace direct à partir de données PDF (**PDFgui et MolPDF**)

16h00 Pause café

18h00 Fin