



Université Blaise Pascal

UNIVERSITÉ BLAISE PASCAL  
U.F.R de Recherche Scientifique et Technique



## CYCLE DE CONFÉRENCES DE CHIMIE

Avec le concours de : *Manufacture Française des Pneumatiques MICHELIN*  
*Centre de Développement Préclinique, Schering-Plough*  
*Fédération de Chimie (FR 2404)*  
*Section Auvergne de la Société Française de Chimie*  
*U.F.R.S.T. / Master de Chimie / Département de Chimie*

---

# Mardi 15 Décembre 2009 à 16h (hors cycle)

Amphi de Chimie Paul REMI - (Site des Cézeaux)

## Dr. Pierre BORDET

*Institut Néel, CNRS, Grenoble*

# Cristallographie des « mauvais » cristaux grâce à la fonction de distribution de paires.

La cristallographie s'intéresse à l'agencement des atomes au sein des matériaux solides cristallins, avec pour principal outil expérimental la diffraction de rayonnements dont la longueur d'onde est de l'ordre de grandeur des distances inter-atomiques, soit environ 0.1 nm : les neutrons, les électrons et les rayons X. Grâce à de constants progrès méthodologiques et technologiques, la cristallographie connaît aujourd'hui un succès considérable, son champ d'application s'étendant des études de matériaux dans des conditions de pressions et températures voisines de celle rencontrées au cœur des planètes, à celles de la structure des ribosomes ou du mécanisme réactionnel de l'oxygène avec l'hémoglobine. La limite inhérente à la cristallographie est de s'intéresser aux cristaux, c'est-à-dire à des matériaux pouvant être décrits comme la répétition tridimensionnelle infinie d'un motif immuable (le contenu de la maille cristalline). Il suffit donc de connaître celui-ci et la loi de périodicité pour être capable de décrire le cristal complet. Cependant, on constate de plus en plus que la compréhension des propriétés physico-chimiques des matériaux nécessite une connaissance de la structure à l'échelle locale, et que celle-ci peut être différente de la structure « moyenne » décrite à partir des méthodes expérimentales classiques de la cristallographie. Par exemple, les objets de dimensions de l'ordre du nanomètre peuvent présenter des structures différentes de celles des composés habituels, du fait de la part prépondérante des forces de surfaces. La structure locale peut également présenter des distorsions par rapport à la structure moyenne, désordonnées sur l'ensemble du matériau. Les analyses cristallographiques des données de diffraction, basées sur la seule mesure des pics de Bragg (conséquence de la périodicité cristalline), sont nécessairement insuffisantes pour révéler ces arrangements locaux par essence non périodiques. L'analyse de la fonction de distribution de paires est un des outils en développement pour obtenir des données quantitatives à ces échelles. Développée initialement pour l'étude des liquides et amorphes et basée sur des mesures du signal de diffusion totale (y compris hors pics de Bragg), elle permet maintenant, grâce à des évolutions méthodologiques récentes et aux nouvelles sources de rayonnements, une étude multi-échelle de la structure des matériaux. Les principes à la base de cette méthode seront introduits. On présentera ensuite les aspects expérimentaux qui lui sont spécifiques, et on illustrera son potentiel par quelques exemples d'applications.

---

Coordinatrice : Christine MOUSTY, LMI UMR UBP-CNRS 6002

24, avenue des Landais, 63177 Aubière cedex-France ☎ 33 473 407 598 – fax : 33 473 407 707  
courriel : Christine.Mousty@univ-bpclermont.fr <http://chimie.univ-bpclermont.fr>