

5CI610 Structure locale et périodique des matériaux

Mots clés : diffraction, résonances, rayonnement synchrotron, grands Instruments

Responsable Christian Bonhomme, Professeur, Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée de Paris, Sorbonne Université

ECTS	Cours (h)	TD (h)	TP (h)	Tutorat (h)	Ecrit (%)	CC (%)	TP (%)	Oral (%)	Eval. répartie
6	42		6	12	40		20	40	oui

Descriptif de l'UE

La description de la structure des matériaux à *plusieurs échelles* est essentielle à leur compréhension et à leur optimisation. Actuellement, les outils spectroscopiques et de diffraction connaissent de très forts développements, à la fois instrumentaux et méthodologiques.

L'UE 5CI 610 présente un ensemble de méthodes de caractérisation avancées permettant d'appréhender l'ordre local, semi-local et périodique dans le cadre de l'étude de grandes classes de matériaux (polymères, céramiques, verres, matériaux hybrides, ...). Trois axes principaux sont abordés : diffraction des rayons X, Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) à l'état solide, techniques de spectroscopie des rayons X et utilisation du rayonnement synchrotron (grands instruments). Une visite sur site de l'accélérateur AGLAE au Centre de Recherche et de Restauration des Musées de France (site Louvre) illustre concrètement cette UE. L'UE 5CI 610 sera tout particulièrement utile aux étudiants de M2 durant leur stage expérimental du second semestre et pour leur carrière future (académique ou industrielle).

Objectifs d'apprentissage

Au terme de l'UE 5CI 610, l'étudiant sera capable de maîtriser les concepts essentiels mis en oeuvre en diffraction, résonances et spectroscopie des rayons X en utilisant le rayonnement synchrotron. Il sera en mesure de répondre à la question essentielle : « quelle méthode de caractérisation dois-je mettre en place pour appréhender un problème structural particulier en science des matériaux ? ». Il sera capable également de s'approprier rapidement les différentes techniques de caractérisation nécessaires au bon déroulement de la partie pratique de son Master (au second semestre). L'étudiant sera acteur lors de la visite de l'accélérateur AGLAE.

Prérequis

Les cours sont construits de telle manière que tout étudiant ayant suivi le tronc commun du Master 1 à la Faculté des Sciences et Ingénierie de SU sera en mesure de profiter pleinement des enseignements proposés.

Langue ⁽¹⁾	Cours, TD, TP	Documents	Bibliographie
Anglais	Anglais	Anglais	Anglais

(1) D'une manière générale, les documents de cours sont à rédiger en anglais. Les sujets d'examen sont en anglais ou accompagnés d'une explication en anglais s'il y a des étudiants non francophones.

Fonctionnement de l'UE

L'UE 5CI 610 comporte 3 enseignements indépendants présentiels de même volume horaire (16h de cours et de TP) (diffraction, résonances, spectroscopie des rayons X et grands instruments de recherche). L'enseignement est complété par une visite de l'accélérateur AGLAE au C2RMF, site Louvre.

En RMN du solide, les points suivants sont abordés : résonance, spécificités de la RMN en phase solide, méthodes de haute résolution et de corrélation, noyaux quadripolaires, polarisation croisée, RMN ¹H haute résolution (ultra-fast MAS et impulsions multiples), applications à plusieurs classes de matériaux,

les développements les plus récents en RMN en phase solide (calculs *ab initio*, RMN cristallographie, DNP, micro-bobines en rotation MAS...). Ouvrages conseillés : **Introduction to solid-state NMR spectroscopy**, Blackwell Publishing, M. J. Duer, **Multinuclear solid-state NMR of inorganic materials**, Pergamon, K.J.D. Mackenzie, M. E. Smith, **Multidimensional solid-state NMR and polymers**, Academic Press, K. Schmidt-Rohr, W. Spiess.

L'enseignement des techniques de spectroscopie des rayons X commence par une présentation générale des propriétés du rayonnement synchrotron et des interactions photon-matière. Les techniques abordées sont la spectroscopie d'absorption X, la spectroscopie des photoélectrons, les techniques de spectromicroscopie X et la diffusion résonante des rayons X. La discussion de chaque technique abordée commence par une introduction de ses principes de base, suivie par la discussion d'exemples scientifiques illustrant ses potentialités, mais également ses points limitants. À la fin du cours, un aperçu est donné sur les développements les plus récents, rendu possibles par les lasers à électrons libres émettant des rayons X (nouvelles sources de rayons X présentant des propriétés inégalées). Ouvrages conseillés : **An Introduction to Synchrotron Radiation: Techniques and Applications**, Philip Willmott, Wiley-Blackwell (2011) ; **NEXAFS Spectroscopy**, Joachim Stöhr, Springer Series in Surface Sciences 25 (1992) ; **Magnetism, From Fundamentals to Nanoscale Dynamics**, Joachim Stöhr et Hans Christoph Siegmann, Springer Series in Solid-State Sciences 152 (2006) ; **A Primer in Photoemission, Concepts and Applications**, Antonio Tejada, Daniel Malterre, EDP Sciences (2019).

En DRX, des rappels de cristallographie et l'introduction du réseau réciproque permettent de poser les bases qui seront nécessaires à une approche de la diffraction plus avancée que celle enseignée au niveau L3. Cette partie permet aux étudiants qui n'ont pas de notion préalable en cristallographie d'en acquérir les bases nécessaires. On s'intéresse ensuite aux interactions des rayons X avec la matière et plus particulièrement à la façon dont la diffusion par un milieu périodique donne naissance à la diffraction. La théorie de la diffraction X est développée dans le cadre du monocristal et la géométrie instrumentale correspondante est exposée, mais l'essentiel du cours est consacré à la diffraction sur poudre, d'utilisation beaucoup plus courante et plus polyvalente. On aborde aussi des méthodes d'analyse de micro/nano structure (Williamson-Hall) et d'analyse quantitative par diffraction X. La diffraction neutronique est brièvement exposée et comparée à la DRX. Une séance de TD et de questions-réponses permet de revoir les points importants du cours. La stratégie de résolution d'une structure cristalline *ab initio* (méthodes de Patterson et de transformée de Fourier inverse), développée en cours, fait l'objet d'une formation pratique de 6 h sur des logiciels courants. Ouvrages conseillés : **Fundamentals of Crystallography**, IUCr Texts on Crystallography n°7, Carmelo Giacovazzo (ed.), Oxford University Press, 2011 ; **Crystal Structure Analysis : Principles and Practice**, IUCr Texts on Crystallography n°13, William Clegg (ed.), Oxford University Press, 2009 ; **Crystal Structure Determination**, Werner Massa, Springer-Verlag (2004)