

Fiche de présentation Atelier Thématique ECOLE DOCTORALE 3MPL

Nom de l'Atelier Thématique : Diffraction sur échantillon polycristallin : module II détermination ab-initio

Code : 3MPL210

Etablissement dont relève la formation : Univ. Angers / Univ. Maine / Univ. Nantes / EMN

UFR ou Ecole organisatrice : UFR Sciences

Localisation des enseignements : Le Mans - UFR Sciences - IMMM

Capacité d'accueil (min-max) : 3-8

Responsable : GOUTENOIRE François Courriel : francois.goutenoire@univ-lemans.fr

Nombre de crédits ECTS : 3

Volume horaire pour l'étudiant : 10h (2 jours)

Compétences pré-requises : notion de cristallographie, système cristallin, groupe d'espace et facteur de structure + 3MPL209 (Diffraction sur échantillon polycristallin : module I analyse Rietveld)

Compétences à acquérir par l'étudiant dans cette formation, objectifs de la formation : détermination *ab-initio* de la structure cristalline (détermination des paramètres de maille, groupe d'espace et détermination des positions atomiques) et diffraction par les grands instruments (neutronique et rayonnement synchrotron). Approche de la diffraction sur molécules organiques et problématique du polymorphisme.

Modalités de validation de ces compétences : validation d'exercices sur un logiciel de type industriel (X'Pert HighScore plus), d'utilisation très aisée.

Résumé de la formation : formation sur la diffraction sur échantillon polycristallin, affinement de type Rietveld (analyse structurale, analyse quantitative), analyse des effets de taille et de micro-structure.

Informations complémentaires : Cette formation est calquée sur un cours destiné au milieu professionnel. Cours de 2 jours dispensé dans les locaux de la société Servier (groupe de pharmacie).
Atelier dépouillement des données : parc PC équipés des logiciels (HighScore, Fullprof, Espoir)
Support papier ~ 50 pages + CD de données.