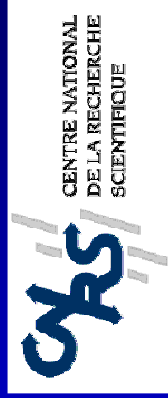


# Diffraction de poudres au LLB

*F. Damay*  
*Rencontres LLB-SOLEIL*  
*2 mars 2006*



# Le groupe poudres au LLB

## Scientifiques permanents :

G. André, F. Bourée, F. Damay,  
I. Goncharenko, I. Mirebeau,  
J. Rodriguez-Carvajal

## Ingénieurs & techniciens :

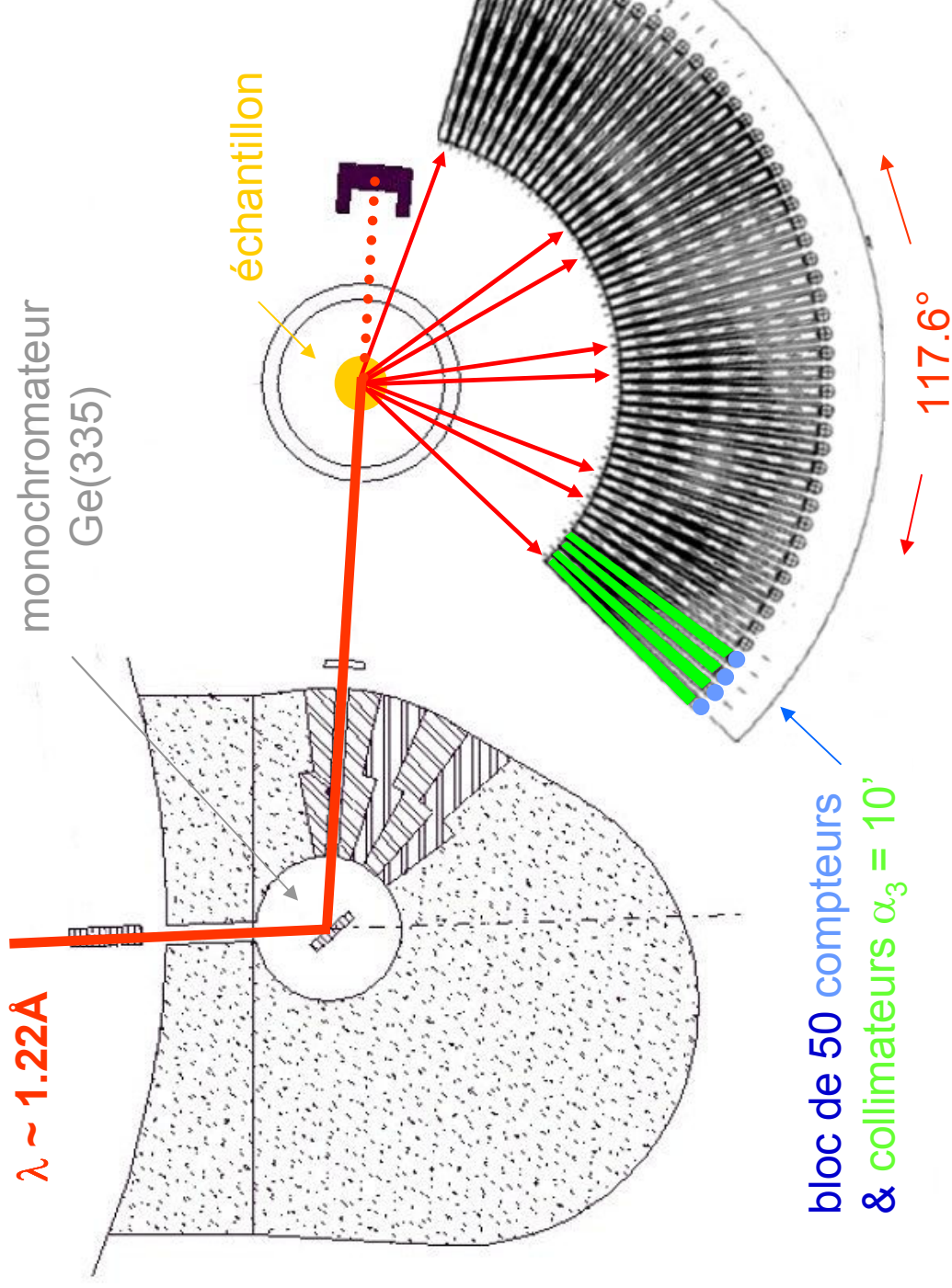
B. Rieu, X. Guillou



# Les diffractomètres poudres

- **3T2** : 2 axes neutrons thermiques, haute résolution – *détermination de structures cristallines*
- **G41** : 2 axes neutrons froids, haut flux – *détermination de structures magnétiques*
- **G42** : 2 axes neutrons froids, haute résolution – *détermination de structures cristallines de grandes mailles*
- **G61 (MICRO)** : 2 axes neutrons froids, haut flux, cellule hautes pressions : *séminaire d'I. Goncharenko*

# 3T2 – un aperçu



A photograph of a laboratory X-ray diffractometer, model 3T2. The instrument is a large, complex piece of machinery with a central goniometer head and a detector arm. It is surrounded by various cables, hoses, and control panels. The background shows a typical laboratory environment with a green wall and a concrete floor.

## 3T2 — quelques caractéristiques

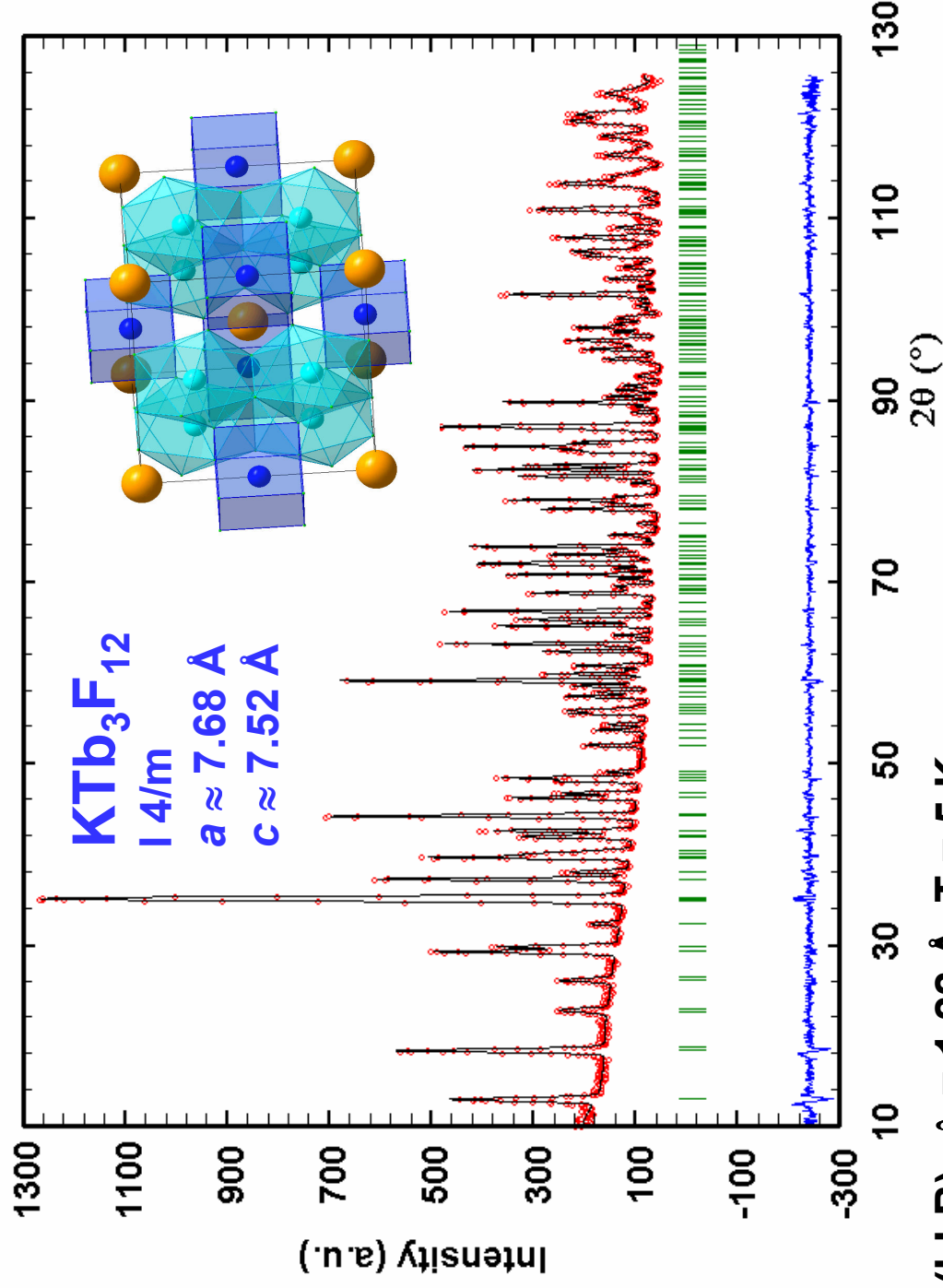
- $2\theta < 125^\circ$ ,  $\Delta(2\theta) = 0.02^\circ$
- Acquisition d'un diffractogramme : 8 h
- Cryofour :  $1.5K < T < 500K$
- Four : jusqu'à  $1000^\circ C$  (sous vide)

## 3T2 - exemples d'applications

- Détermination de structures cristallines
- Localisation de l'hydrogène

# Détermination de structures

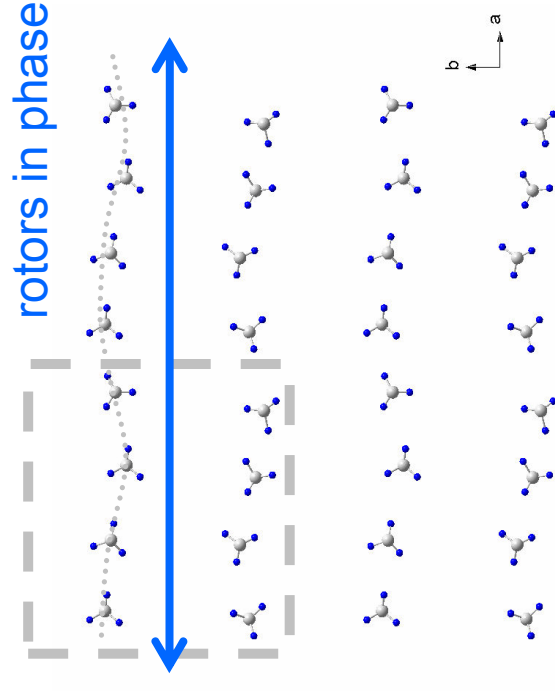
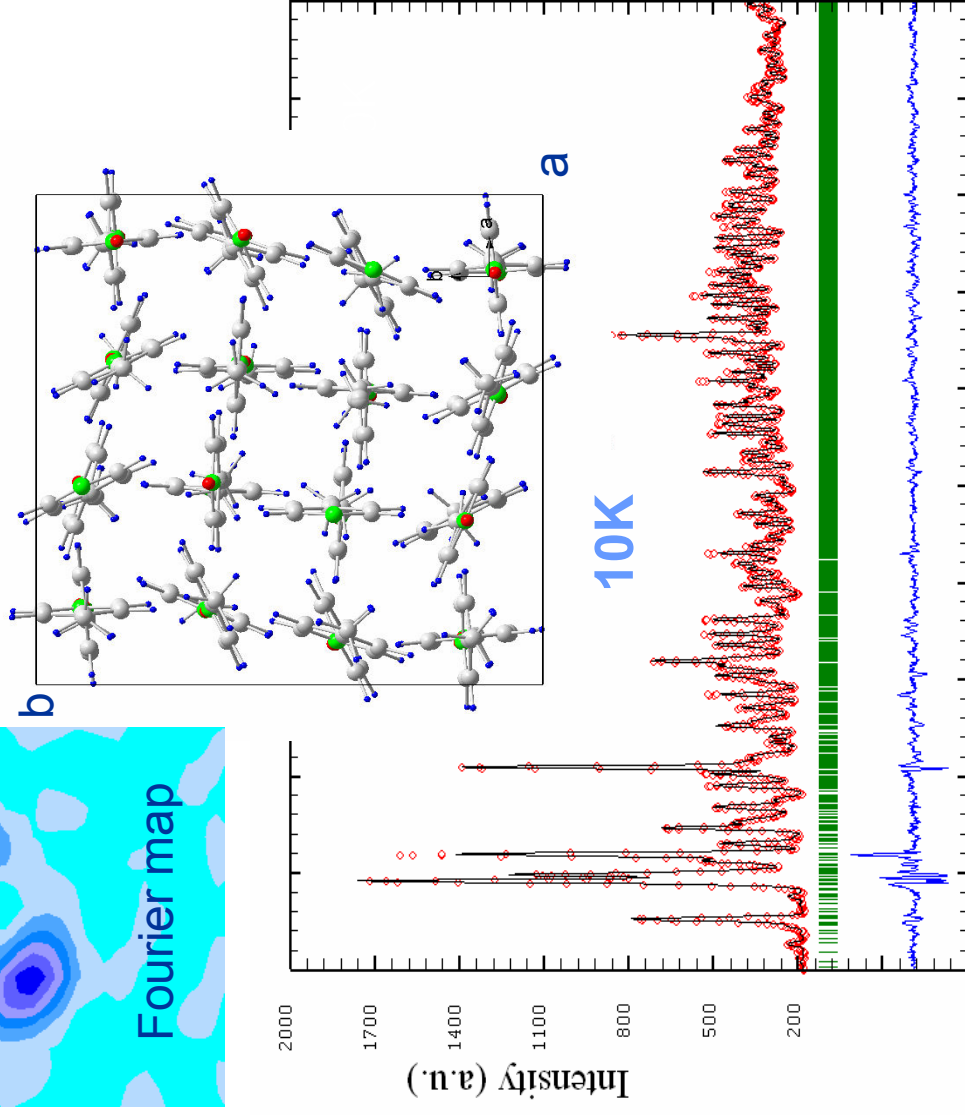
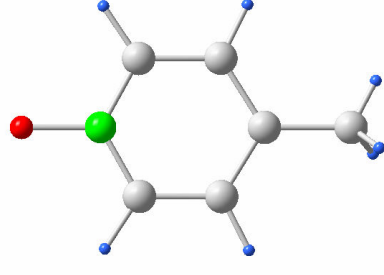
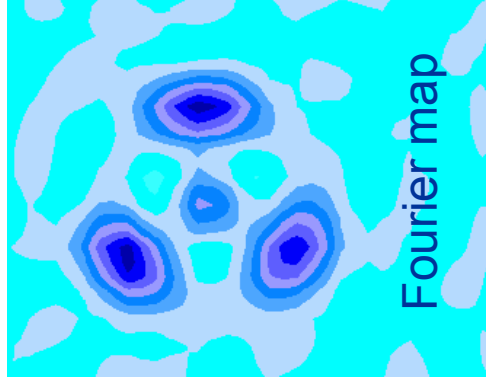
$\text{KTb}_3\text{F}_{12}$  est un fluorure à valence mixte. La diffraction de neutrons haute résolution a permis de déterminer avec précision la symétrie structurale et en particulier la position des atomes de fluor.



3T2 (LLB),  $\lambda = 1.22 \text{ \AA}$ ,  $T = 5 \text{ K}$

# Localisation de l'hydrogène

Localisation et mise en ordre des groupes méthyle dans la 4-méthylpyridine-N-oxide à 10K

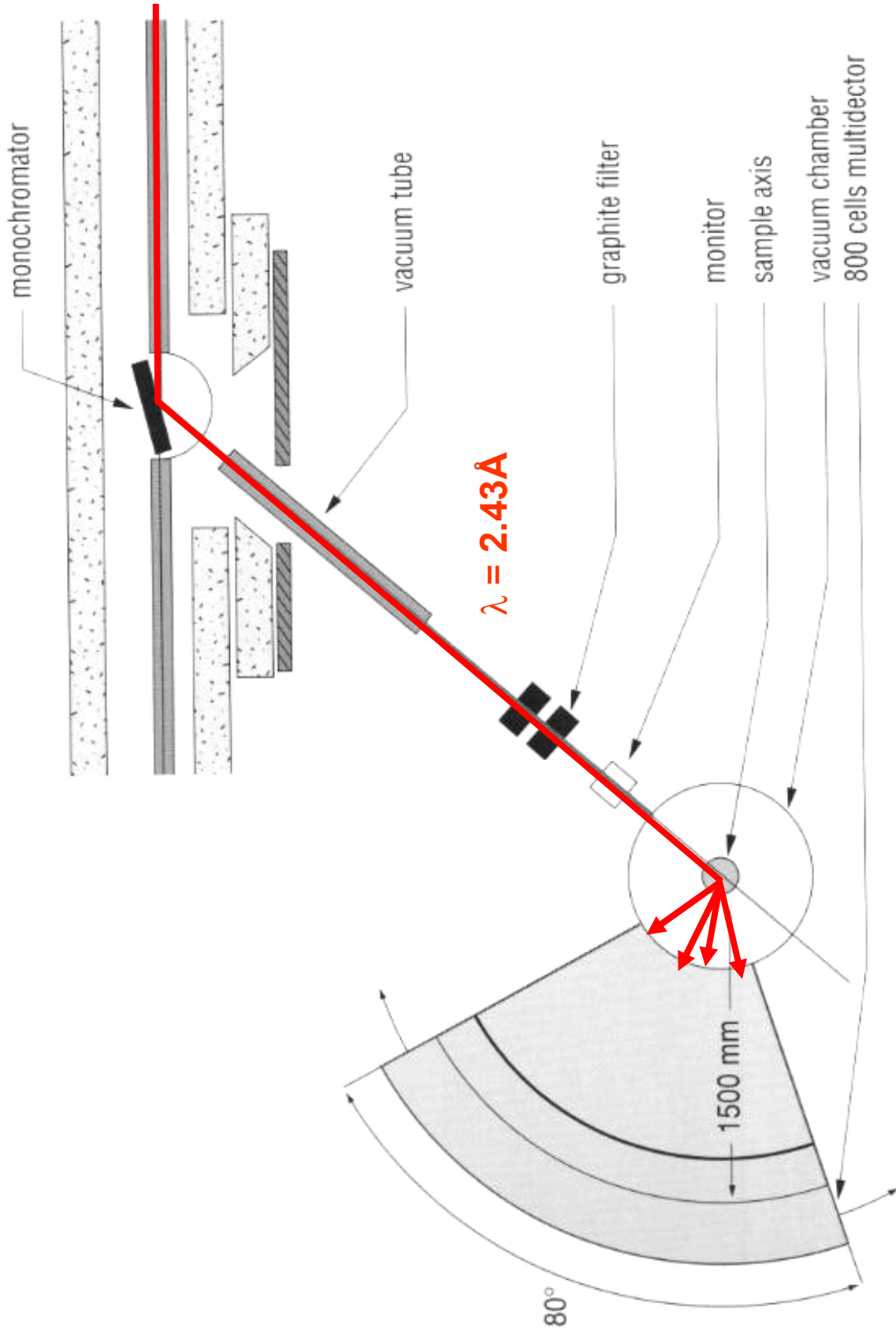




## 3T2 – autres exemples d'applications

- Positions des oxygènes (oxydes à propriétés remarquables...) et autres atomes légers
- Facteurs d'agitation thermique, déplacement ioniques (conducteurs ioniques...)
- études microstructurales
- etc...

# G41 – un aperçu



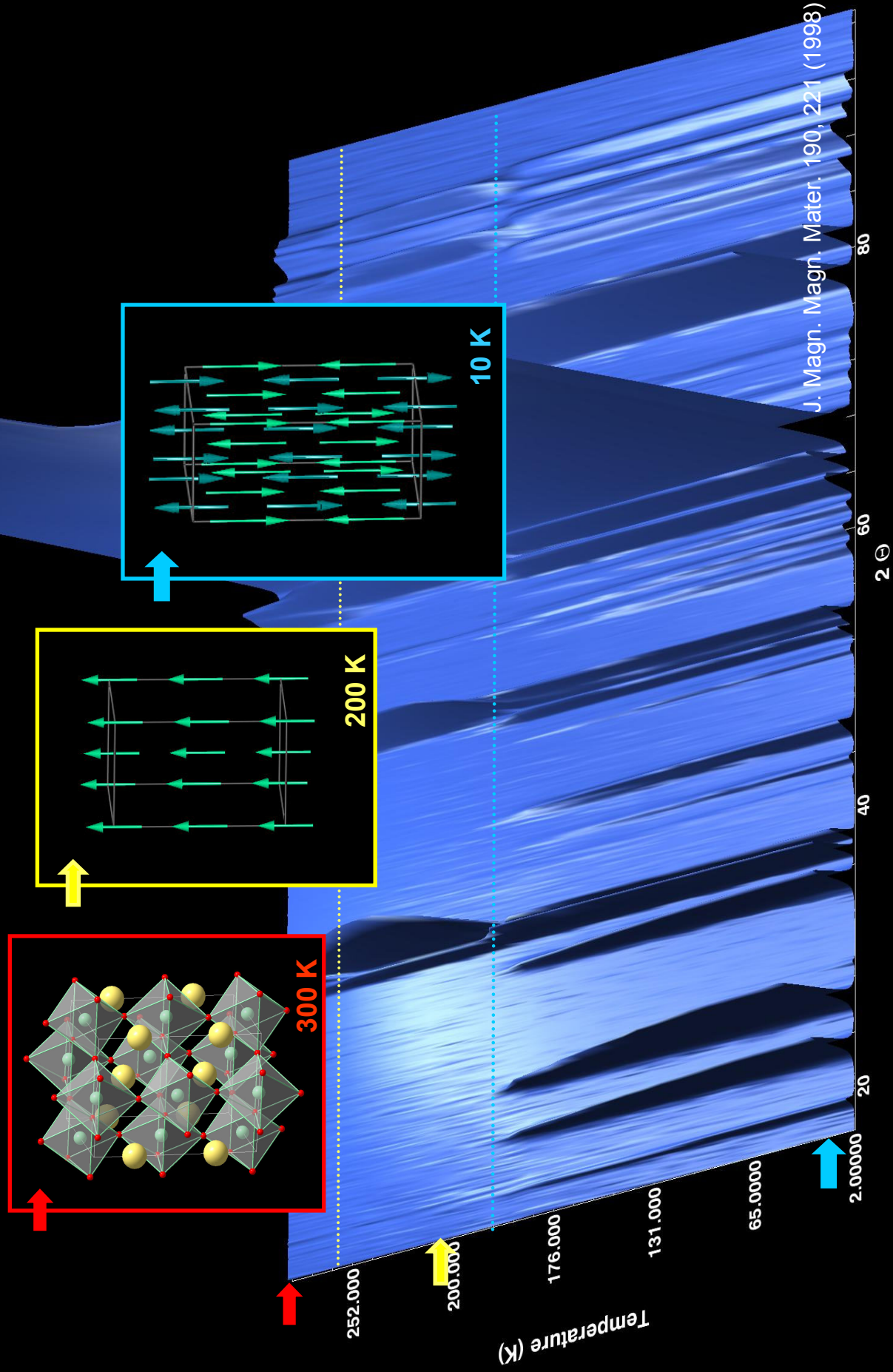
# G41 – quelques caractéristiques

- $2\theta < 100^\circ$
- Acquisition d'un diffractogramme :  $\sim 30$  mn
- Cryostat :  $1.5\text{K} < T < 300\text{K}$
- Four :  $T < 1000^\circ\text{C}$  (sous vide)
- Dilution : 50 mK
- Champ électrique
- Photomagnétisme in situ

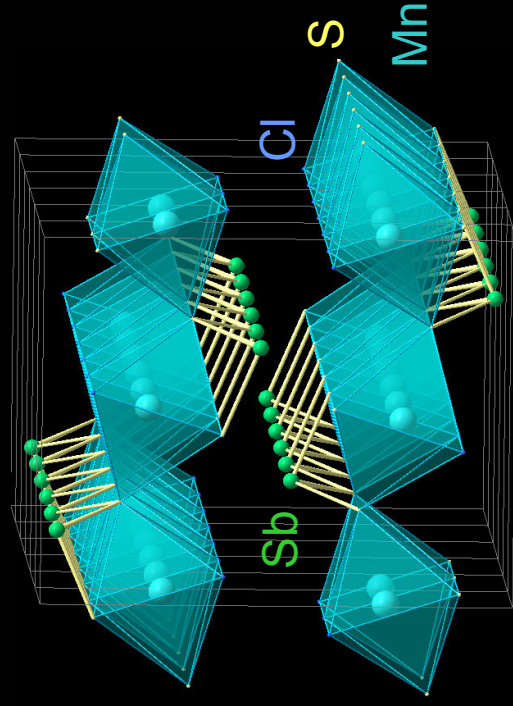
# G41 – exemples d'applications

- Études des transitions de phases structurales et magnétiques avec T
- Détermination de structures magnétiques complexes

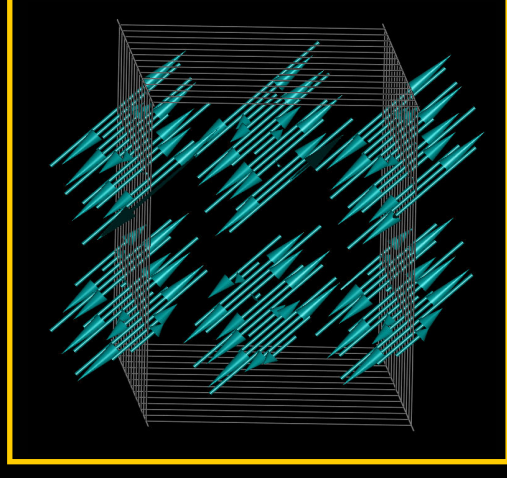
**Evolution avec la température des diagrammes de diffraction neutronique de l'oxyde de manganèse  $Pr_{0.5}Sr_{0.41}Ca_{0.09}MnO_3$**



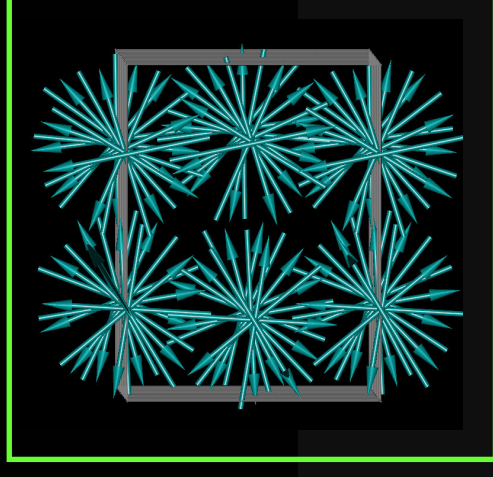
# Une structure magnétique complexe : $\text{MnSbS}_2\text{Cl}$



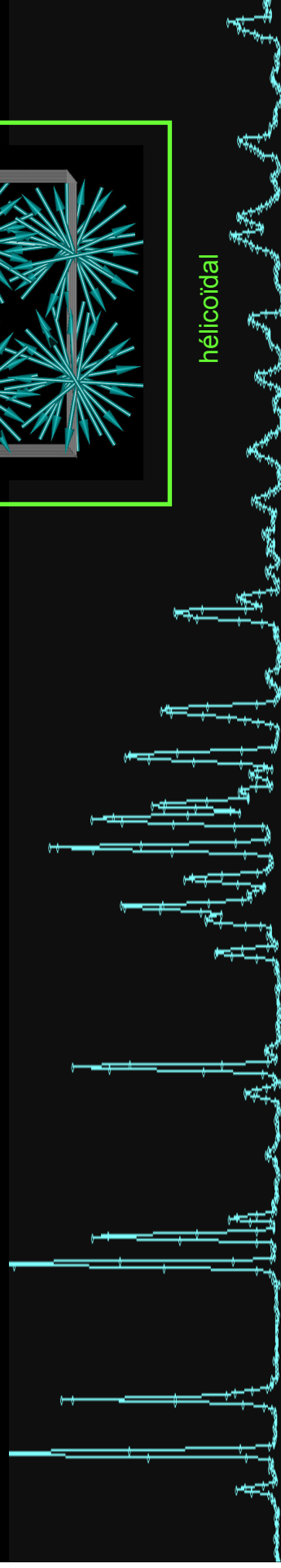
Structure antiferromagnétique  
incommensurable, deux modèles  
magnétiques possibles :



sinusoïdal



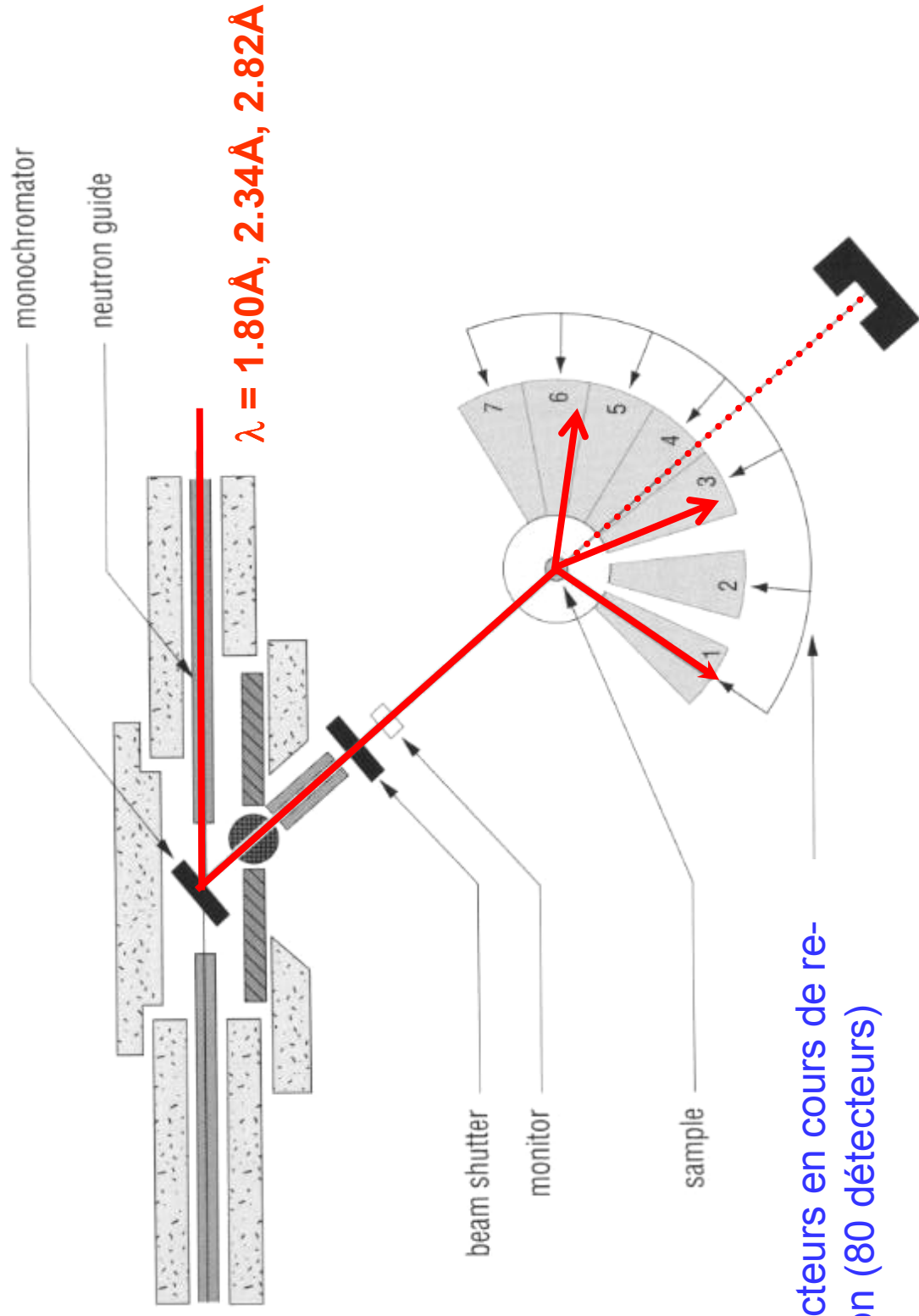
hélicoïdal



# G41 – autres exemples d'applications

- Études cinétiques
- Analyses quantitatives
- Dosage de l'hydrogène

# G42 – un aperçu



Bloc détecteurs en cours de re-conception (80 détecteurs)



# G42 – futur proche

- Caractéristiques :
  - 80 compteurs
  - $\lambda$  variable
  - $2\theta < 150^\circ$
  - Acquisition d'un diffractogramme :  $\sim 10$  h
  - Cryofour :  $1.5\text{K} < T < 500\text{K}$
- Applications : *composés à grandes mailles*

**A bientôt au LLB!**