



Jeudi 11 mai 2023



Jeudis de la chimie du solide



Olivier Masson

Institut de recherche sur les céramiques (IRCER), Limoges

La méthode de la PDF : un outil d'analyse structurale puissant et accessible en laboratoire

Au cours des 20 dernières années, l'utilisation de la fonction de distribution de paires atomiques (PDF) dans l'étude structurale de solides cristallisés a nettement progressé. Obtenue à partir de mesures de diffusion totale des rayons X, des neutrons ou encore des électrons, la PDF apporte en effet des informations souvent non accessibles avec les méthodes cristallographiques conventionnelles. Historiquement dédiée à l'étude des verres et très longtemps cantonnée aux expériences sur grands instruments, la méthode de la PDF tend à se démocratiser en laboratoire mais reste néanmoins encore confidentielle. Pourtant, dans le cas de solides complexes dont l'ordre local est mal décrit par la structure moyenne, elle permet d'accéder sans trop de difficulté à la structure locale, connaissance nécessaire à une bonne compréhension des propriétés physiques.

Dans cet exposé, nous présenterons la méthode de la PDF, son principe, les conditions expérimentales nécessaires à l'obtention de données de qualité et ses limites. Nous verrons comment les méthodes de simulation à l'échelle atomique (classique ou ab-initio) permettent d'aller plus loin dans l'analyse des PDF. Nous illustrerons le propos avec des travaux de recherche issus de l'IRCER portant sur des nanoparticules d'oxydes métalliques de dimension inférieure à 5 nm, des silicates de lanthane conducteurs ioniques à structure apatite, des composés « anti-verres » ou encore vitreux à base d'oxyde de tellure.



Codes de connexion accessibles à l'adresse

<https://new.societechimiquedefrance.fr/divisions/chimie-du-solide/jeudis-de-la-chimie-du-solide/>