ENSMAC

Structure des solides

École / Prépa
ENSMAC

Présentation

Code interne : PCP5-STSOL

Description

Un des objectifs généraux de la thématique CMI est de montrer comment les propriétés d'un matériau dépendent de sa composition ou de sa structure. Le cours de Structure des Solides constitue une base indispensable de ce programme, en répondant à deux questions essentielles sur la structure des matériaux cristallisés : comment la décrire, comment la déterminer.

Objectifs

Les objectifs pédagogiques de ce cours, en lien étroit avec les Travaux Pratiques de Chimie Inorganique, sont les suivants :
- Décrire une structure cristalline et reconstruire une structure d'après sa description
- Reconnaître et identifier les structures simples et celles plus complexes qui en dérivent
- Analyser un texte scientifique traitant de l'utilisation de la diffraction des rayons X en science des matériaux

- Utiliser les bases de données cristallographiques (tables internationales de cristallographie, ressources sur la structure des cristaux).

Heures d'enseignement

CM	Cours Magistraux	20h
TD	Travaux Dirigés	2,67h

Pré-requis obligatoires

Les éléments du programme de cristallographie des classes préparatoires filière PC : les notions de maille et de motif, les empilements compacts, les types structuraux simples.

Les notions de base sur la diffraction.

Syllabus

La première partie du cours est consacrée à la description des cristaux en termes de symétrie. Après une introduction historique sur la cristallographie, les notions de réseau, maille, mode et motif sont définies à partir du groupe de translations. Les différentes opérations de symétrie sont détaillées, les principes de construction des groupes ponctuels sont développés, en relation avec les systèmes cristallins et les réseaux de Bavais. Les groupes d'espace sont finalement décrits. Des structures cristallographiques simples sont utilisées comme exemples et permettent une introduction à la cristallochimie. Trois descriptions sont traitées : (i) unité asymétrique et groupe d'espace, (ii) empilements et sites occupés, (iii) polyèdres de coordination. Le réseau réciproque est introduit et appliqué à des calculs cristallographiques simples. Le cristal est modélisé en termes de convolution d'une densité électronique et d'une somme de distributions de Dirac.
La diffraction des rayons X fait l'objet de la seconde partie du cours. Après des rappels sur la diffraction, les équations de Laue sont obtenues à partir du calcul de l'intensité diffractée par un cristal, interprété dans le réseau réciproque l'équation de Bragg en est déduite. Des facteurs de structures sont calculés pour expliquer les extinctions systématiques. La figure de diffraction est interprétée en termes de transformée de Fourrier de la densité électronique du cristal. Finalement, on montre comment l'intensité diffractée permet de déterminer les positions atomiques. L'utilisation pratique de la diffraction des rayons X comme outil d'analyse est ensuite abordée, après une présentation de la production des rayons X et des diffractomètres de poudres.

Informations complémentaires

Chimie et Matériaux Inorganiques

Bibliographie

Bibliographie, disponible à la bibliothèque de l'ENSCBP :
Chimie inorganique, A. Casalot et J. Durupthy, Hachette : niveau Licence.
Introduction à la cristallographie et à la chimie structurale, M. van Meerssche et J. Feneau-Dupont, Peeters, 1984 : plus complet.
Fundamentals of crystallography, C. Giacovazzo et al., Oxford University Press, 1992 : très complet, assez complexe.
Pour voir des cristaux : musee.ensmp.fr/gm//photos.html (page consultée le 04/07/2011)

Modalités de contrôle des connaissances

Évaluation initiale / Session principale

Type d'évaluation	Nature de l'évaluation	Durée (en minutes)	Nombre d'épreuves	Coefficient de l'évaluation	Note éliminatoire de l'évaluation	Remarques
Contrôle Terminal	Ecrit	90		1		

Seconde chance / Session de rattrapage

Type d'évaluation	Nature de l'évaluation	Durée (en minutes)	Nombre d'épreuves	Coefficient de l'évaluation	Note éliminatoire de l'évaluation	Remarques
Epreuve terminale	Ecrit	90		1		

Infos pratiques

Contacts

Intervenant

Philippe Vinatier
Philippe.Vinatier@bordeaux-inp.fr