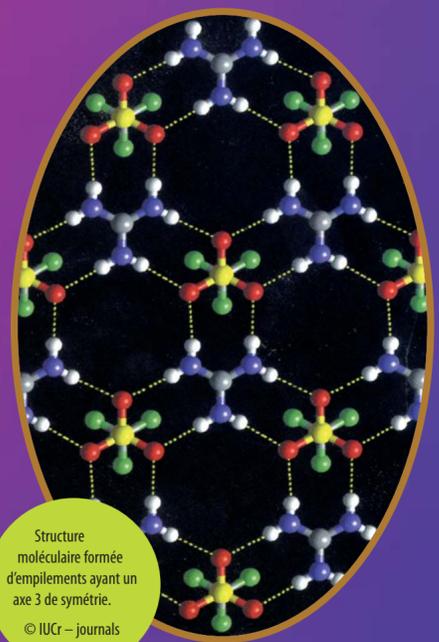




# La diffraction des cristaux : un « code barre » des matériaux

Les cristaux sont essentiels pour notre société moderne, leurs études par diffraction des rayons X, des électrons ou des neutrons ont permis la naissance de la cristallographie au début du 20<sup>ème</sup> siècle. Celle-ci permet d'élucider les relations entre les propriétés, la composition chimique et l'arrangement des atomes dans les matériaux.



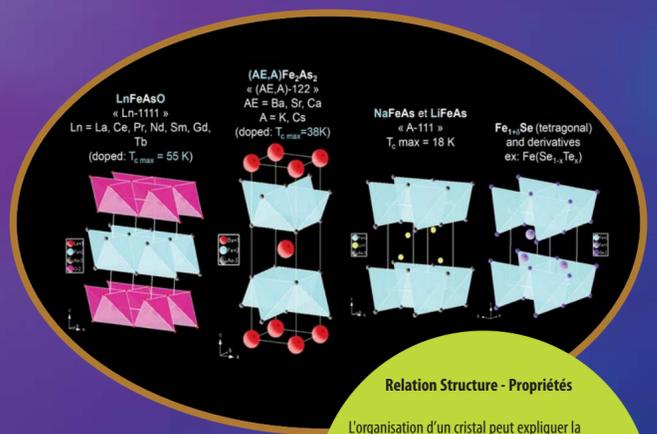
Structure moléculaire formée d'empilements ayant un axe 3 de symétrie.  
© IUCr – journals

## Une approche cristallographique

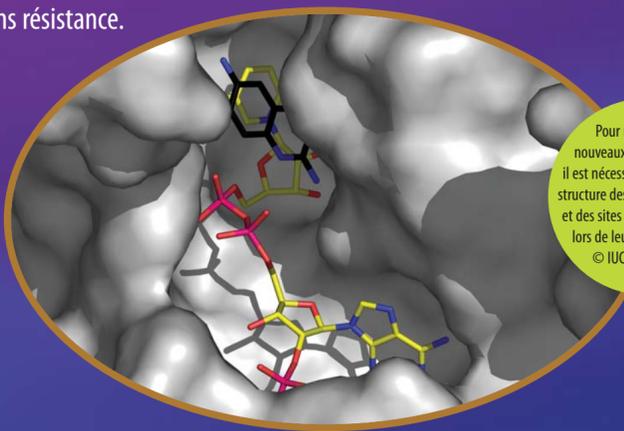
Cette approche à l'échelle atomique a constitué une véritable révolution pour les chimistes, qui ont ainsi pu visualiser l'arrangement des atomes des solides qu'ils étudiaient, leur permettant d'imaginer de nouveaux empilements d'atomes. Cette approche a permis aux chimistes de **fabriquer de nouveaux matériaux** possédant des propriétés physiques mieux adaptées et mieux ciblées ; par exemple des nouvelles générations de piles, des nouveaux composés permettant un stockage important d'hydrogène ou des fils supraconducteurs pouvant faire passer du courant sans résistance.

Ces applications existent non seulement en **science des matériaux** mais aussi dans la synthèse et la détermination de la structure de nouveaux matériaux moléculaires qui ont aussi aidé le développement de nouveaux **médicaments**.

En principe, si un composé ou une substance peut être cristallisée, sa structure peut être déterminée par la cristallographie.

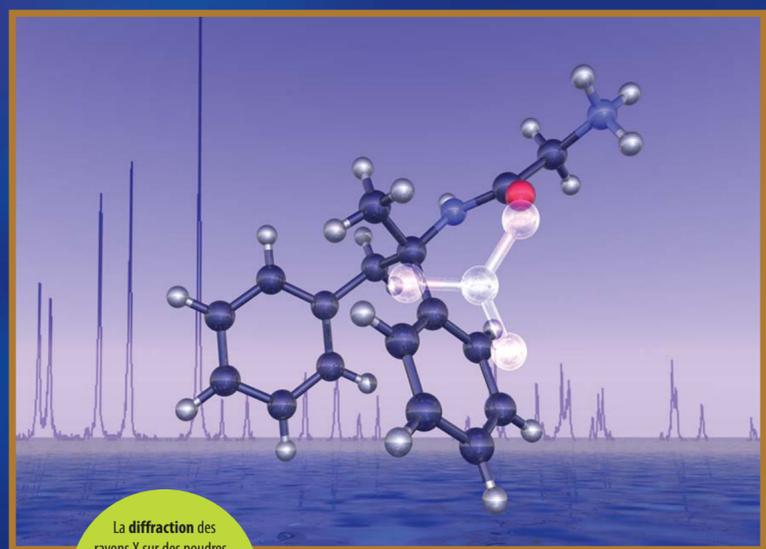
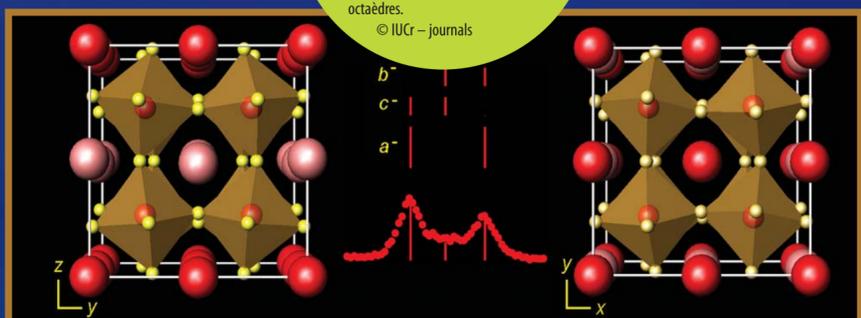


**Relation Structure - Propriétés**  
L'organisation d'un cristal peut expliquer la relation qui existe entre sa structure à l'échelle atomique et les propriétés macroscopiques. Avec les progrès de la cristallographie, les chimistes peuvent "comprendre" la matière existante et surtout essayer de concevoir de nouveaux matériaux, ayant les propriétés souhaitées. C'est le cas des oxydes supraconducteurs à base de cuivre, mais aussi des derniers nés, les oxydes supraconducteurs à base de fer.  
source : Institut Néel-CNRS



Pour réaliser de nouveaux **médicaments**, il est nécessaire d'étudier la structure des molécules actives et des sites cibles mis en jeu lors de leurs actions.  
© IUCr – journals

**Pérovskite**, le nom d'une structure cristalline aux multiples propriétés  
Dans les matériaux ayant cette structure il y a aussi une relation entre cet ordre à l'échelle atomique et les propriétés physiques observées. Leurs propriétés changent suivant les orientations des octaèdres ou suivant la nature chimique des atomes entre ces octaèdres.  
© IUCr – journals



La **diffraction** des rayons X sur des poudres cristallines peut être utilisée pour déterminer la structure des molécules.  
© IUCr – journals