

Nantes, le 27 mai 2025

Madame, Monsieur,

Depuis maintenant 33 ans, nous organisons, à Nantes, une formation sur la diffraction des matériaux polycristallins par les rayons X, les neutrons et les électrons (dite de niveau 1). Suite à la demande d'anciens participants dont vous faites peut-être partie, nous avons mis en place une formation de niveau 2 de **trois journées** destinée, d'une part à la détermination structurale *ab initio* et, d'autre part, à l'analyse par Fonction de Distribution de Paires (PDF). Ces deux sujets traitant de problématiques distinctes mais néanmoins complémentaires à la formation de niveau 1, pourront être choisis à la carte par les participants. La journée détermination structurale *ab initio* aura lieu le mardi 21 octobre et sera suivie de deux journées dédiées à l'analyse PDF les mercredi et jeudi 22 et 23 octobre.

Ces trois journées s'adressent exclusivement à des personnes ayant déjà de solides connaissances en diffraction sur poudre (connaissances formation niveau 1 requises).

La journée **détermination structurale *ab initio***, permettra de passer en revue les différentes approches (méthodes directes, recuit parallèle et *charge flipping*) permettant d'obtenir un modèle structural préalable à tout affinement. Elle offrira l'occasion de découvrir notamment les puissantes possibilités d'interfaçage du programme d'affinement **JANA2020** vers les différentes approches.

L'**analyse PDF** basée sur l'étude de la diffusion totale et s'appliquant donc aussi bien à l'étude de matériaux cristallisés qu'à celle d'amorphes ou de vitrocristallins fera l'objet des deux journées suivantes. Alors que la technique PDF a longtemps été la quasi exclusivité des grands instruments (synchrotron ou neutrons), **le nombre d'études n'a cessé d'augmenter** et cet accroissement devrait s'accélérer avec la possibilité de réaliser bon nombre de ces analyses sur de **simples diffractomètres de laboratoire**. La préparation des données PDF passera par l'utilisation des programmes **PDFGetX2** ou **PDFGetX3** alors que les affinements seront réalisés avec **PDFGUI** ou **MoPDF**.

Pour l'ensemble des thèmes abordés, une large part du programme sera consacrée, comme à l'accoutumée, à des séances de travaux pratiques.

Veillez trouver ci-joint le déroulement détaillé de notre formation, ainsi que les conditions d'inscription et les informations générales. Nous restons à votre disposition pour tous renseignements complémentaires.

Salutations distinguées,

Olivier HERNANDEZ



Mayte CALDES



Responsables de la Formation Permanente "Diffraction par les poudres"