

Le modèle de texture sous-déterminé de March-Dollase influence-t-il la détermination structurale ?

B. Maëstracci^{1,2}, D. Chateigner¹, S. Delchini², et S. Gascoin¹

¹Laboratoire CRISMAT, Normandie Université ENSICAEN UMR CNRS 6508, Université de Caen Normandie, IUT-Caen, 6 Boulevard du Maréchal Juin, 14050 Caen cedex 04, France

²BRGM, 3 avenue Claude Guillemin, 45100 Orléans, France

Courriel : barbara.maestracci@ensicaen.fr

Depuis très longtemps la détermination structurale sur poudres s'opère en utilisant le modèle de March-Dollase [1,2] pour compenser les mauvaises représentations d'intensités dues à l'existence de texture cristallographique. Bien que ce modèle soit intégré à la plupart des logiciels d'affinement structural utilisant la méthode de Rietveld, et qu'il est de fait limité à la représentation de textures particulières (textures de fibres simples ou à plusieurs composantes de fibre dans certains logiciels), à notre connaissance l'influence de son utilisation sur les positions atomiques n'a pas encore été menée.

L'objectif principal de cette étude est de comparer les résultats structuraux obtenus d'une part à partir de mesures de diffraction des rayons X sur poudre en mode Bragg-Brentano et d'autre part sur mesures complètes de textures cristallographiques [3], sur un échantillon standard de Corindon du NIST [4]. La première mesure est opérée sur un diffractomètre Bruker D8 Advance 2-cercles haute résolution (Figure 1), et la deuxième sur un diffractomètre Inel-Thermofisher 4-cercles mesurant les diagrammes complets pour chaque orientation d'échantillon (Figure 2). La première analyse consiste à libérer le facteur MD lors de l'affinement structural, la deuxième à affiner simultanément l'ODF afin de tenir compte de la texture réelle de l'échantillon.

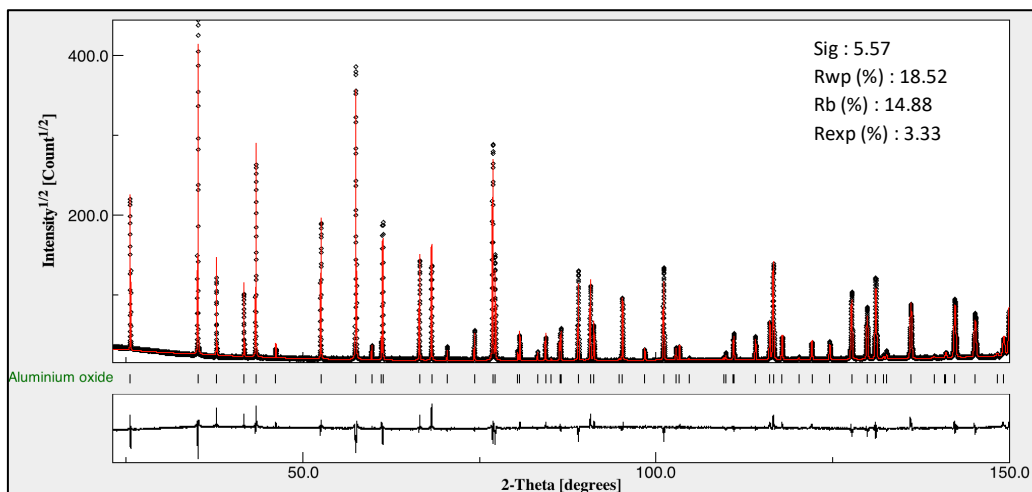


Figure 1. Diffractogramme θ - 2θ du Corindon 1976a du NIST mesuré sur un diffractomètre Bruker D8 Advance 2-cercles, affiné à l'aide du logiciel MAUD, en incluant un modèle MD.

Cette étude permet de mettre en évidence une différence de positions atomiques libres entre les deux méthodes d'affinement et de pointer du doigt la nécessité de prendre la texture en compte de manière réelle (donc de la mesurer complètement).

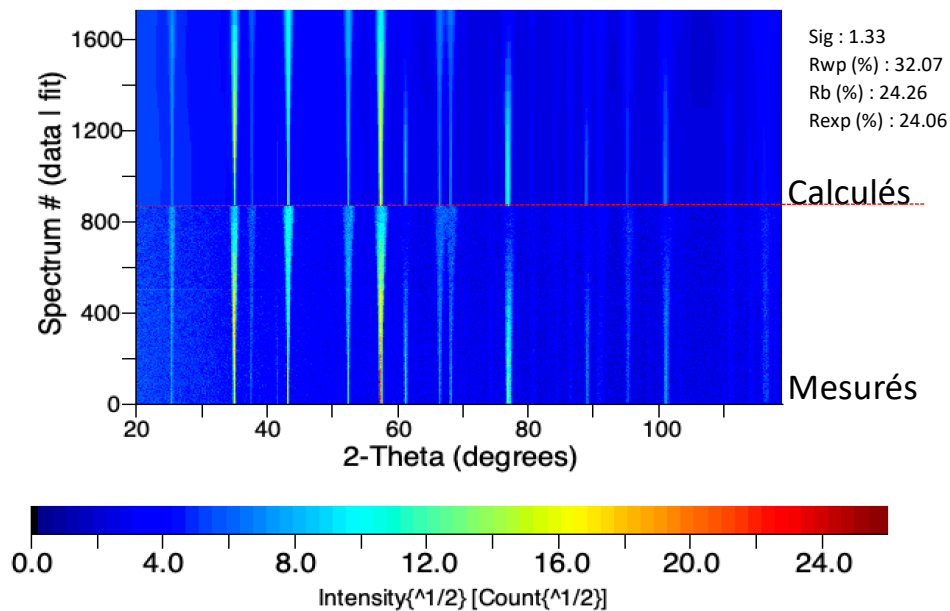


Figure 2. Diffractogrammes du Corindon 1976a du NIST mesurés sur un diffractomètre Inel-ThermoFisher 4-cercles pour 850 orientations (χ, φ) de l'échantillon, affinés à l'aide du logiciel MAUD

Remerciements : Cette étude est financée par la Région Normandie et le BRGM

- [1] March (1932). Mathematische theorie des regelung nach der korngestalt bei affiner deformation, *Zeitschrift für Kristallographie* **81**, 285
- [2] Dollase (1986). Corrections of intensities for preferred orientation in powder diffractometry: application of the March model, *Journal of Applied Crystallography* **19**, 267
- [3] Chateigner, D. (2010). "Combined analysis" John Wiley & Sons.
- [4] National Institute of Standards & Technologie (NIST) – Corundum. Standard Reference Material® 1976a

Indiquer le nom de la personne à contacter :

Nom : MAËSTRACCI **Prénom :** Barbara **Courriel :** barbara.maestracci@ensicaen.fr

Indiquer le thème de votre présentation :

- Communication d'intérêt transversal

- Instrumentation
- Traitement des données
- **Microstructure et texture**
- État mécanique, approche multi échelles
- In situ, operando
- Matériaux naturels complexes
- Cohérence
- Chimie des solides, chimie des matériaux
- Surfaces, interfaces, nanostructures
- Imagerie, tomographie
- Microélectronique
- Matériaux stratégiques et défis énergétiques

Indiquer votre mode de présentation préféré :

Communication orale*