

Table ronde 2 : "Nouveaux composés, caractérisation structurale multi-échelle et modélisation"

L'une des missions principales des Chimistes du solide est d'enrichir en nouvelles compositions les ressources des laboratoires concernés par l'élaboration, la mise en forme, la structuration de nouveaux matériaux, que ce soit sous forme de cristaux, de couches minces ou de matériaux massifs. Dans ce cadre il semble aujourd'hui indispensable de faire perdurer et surtout de redynamiser la culture exploratrice de la recherche de nouvelles phases et de nouveaux composés (sous forme cristalline ou amorphe), présentant ou non des propriétés nouvelles en considérant toutes les familles de composés (oxydes, fluorures, chalcogénures, nitrures,). Celle-ci correspond à un « travail en amont » de longue haleine mais qui est indispensable dans une démarche qui consiste à synthétiser de nouveaux matériaux.

Les caractérisations structurales fines, de l'échelle macroscopique jusqu'à celle de l'atome, sont indispensables au processus de découverte de nouvelles phases et par conséquent de création de matériaux nouveaux. Il est pour ce faire nécessaire de disposer des meilleures compétences techniques et des outils les plus performants que ce soit expérimentalement ou théoriquement sachant que la plupart du temps ces composés se distinguent par une complexité structurale (ordre/désordre, défauts structuraux...).

Cette table ronde permettra de faire le point sur les techniques de caractérisations de pointe utilisées ou développées, afin d'aller au-delà d'une caractérisation « standard » de la structure des composés. Nous pouvons citer entre autres les techniques de microscopie les plus avancées (HRTEM corrigée, tomographie électronique, champ proche), celles de diffraction des rayons X et des électrons associées aux méthodes d'analyses non conventionnelles (par exemple : méthodes des fonctions de distribution de paires (PDF)) ainsi que l'apport des grands instruments (synchrotron, neutrons, RMN) de plus en plus accessibles aux laboratoires. Elle permettra également de dresser un bilan des outils et des méthodes de modélisation (dont les simulations à l'échelle atomique ou *ab initio*) qui apportent une contribution de plus en plus significative à la compréhension fine de la matière à l'état solide. Ceux-ci connaissent actuellement un développement rapide et sont de plus, dans la plupart des cas, capables d'en prévoir les propriétés.