

Promotion DR1

Nom d'usage :LE BAIL..... Prénom :.....ARMEL
Date de naissance :16 Juin 1950
Section(s) du Comité national :15.....
Affectation (code et intitulé de l'unité de recherche) :UMR 6010..... /Laboratoire des Oxydes et Fluorures.....
Ville :LE MANS..... Nom du directeur :LEBLANC.....

Résumé des travaux effectués en dégageant les plus récents et les plus significatifs

135 publications en caractérisation et modélisation du solide, en diffraction des rayons X ou neutrons ou par EXAFS, sur poudre ou monocristal, de composés cristallisés ou d'amorphes, de fluorures ou d'oxydes. Les travaux les plus significatifs au sens des plus cités concernent les méthodes de détermination de structure *ab initio* par diffractométrie des poudres. Les plus récents concernent la prédiction de structures inorganiques par contraintes géométriques et méthode Monte Carlo.

415 abonnés à la liste de discussion SDPD (Structure Determination by Powder Diffractometry) créée en 1999 : <http://www.egroups.com/list/sdpd/>

400 structures déterminées d'après des facteurs de structure extraits de diagrammes de diffraction de poudre par la méthode Le Bail

44 clients de niveau PhD (dont 43 étrangers) inscrits au « **SDPD Internet Course** » créé en 1999 : <http://sdpd.univ-lemans.fr/course/>

12 logiciels distribués en mode « Open Source » : SIZEDIST, ARIT, ARITVE, HKLGEN, OVERLAP, TMACLE, STRUVIR, NOCHAOS, GLASSVIR, ESPOIR, McMaille, GRINSP...

4000000 de fichiers téléchargés sur le site Web <http://www.cristal.org/> et ses miroirs (> 4000 par jour).

Programme de recherche (titre et résumé)

Titre : Caractérisation et Modélisation du Solide - nouvelles méthodes cristallographiques, prédiction de structures inorganiques.

Résumé : Développement et maintenance de moyens de modélisation de structure des amorphes et de moyens de caractérisation de structure par diffractométrie des poudres (approche Monte Carlo appliquée à l'indexation des diagrammes de poudre et à la solution *ab initio* des structures). Prédiction de structures inorganiques par contraintes géométriques. Applications à des fluorures et oxydes, et diffusion des connaissances.

Choix de 5 de vos publications (références complètes)

- 1) "*t*-AlF₃: Crystal structure determination from X-ray powder diffraction data. A new MX₃ corner-sharing octahedra 3D network." A. Le Bail, J.L. Fourquet and U. Bentrup, *J. Solid State Chem.* **100**, 151-159 (1992).
- 2) "Modelling the Silica Glass Structure by the Rietveld Method." A. Le Bail, *J. Non-Cryst. Solids*, **183**, 39-42 (1995).
- 3) "Reverse Monte Carlo and Rietveld Modelling of the NaPbM₂F₉ (M = Fe, V) Fluoride Glass Structures." A. Le Bail, *J. Non -Cryst. Solids* **271**, 249-259 (2000).
- 4) "Accounting for size and microstrain in whole-powder pattern fitting." A. Le Bail, in : Defect and Microstructure Analysis by Diffraction, R. Snyder, J. Fiala & H. Bunge Editors, Oxford Science Publications, **Chapter 22**, 535-555 (1999).
- 5) "Trends in structure determination by powder diffractometry." A. Le Bail, *Advances in Structure Analysis*, Ed. : R. Kuzel & J. Hasek, 166-189 (2001).

Production scientifique	depuis le début de votre carrière	dont ces 10 dernières années	dont ces 4 dernières années
Nombre de publications dans des revues avec comité de lecture :	115	40	22
Nombre de publications dans des actes de colloque avec comité de lecture :	20	14	9
Nombre de publications électroniques :	86	86	41
Nombre de conférences invités dans des congrès internationaux :	26	20	16
Nombre d'ouvrages ou de participations importantes à des ouvrages :	3	3	1
Nombre de sites WEB créés :	1	1	0
Nombre de Mailing List ouvertes :	2	2	0
Nombre de cours à distance créés et enseignés sur Internet (étudiants) :	1 (44)	1	0
Nombre de Round Robin organisés :	4	4	3

Renseignements complémentaires

- 1977-1981 : Séjour professionnel prolongé à l'étranger : maître assistant à l'Université d'Oran, Algérie
- 1981 : Changement thématique – verres fluorés : approche de la structure par EXAFS et méthodes de diffraction (R.X., neutrons)
- 1986 : Ecole thématique GALERNE, Caen. Conférence : « Analyse globale des spectres de diffraction de composés mal cristallisés »
- 1987 : Changement thématique – débuts de l'implication dans le développement des méthodes de détermination de structure par diffractométrie des poudres
- 1990 : Changement thématique – date de la dernière publication EXAFS
- 1992 : Banque de donnée : Création de SDPD-D (Structure Determination by Powder Diffractometry-Database)
- 1992 -1993: Cours de DEA – Détermination de structure par diffractométrie des poudres
- 1994-1995 : Accueil d'un post-doctorant européen « Capital et Mobilité » (Thomas Hansen – permanent à l'ILL depuis peu)
- 1995 : Diffusion du savoir : création d'un site Web spécialisé en cristallographie (<http://www.cristal.org/>)
- 1995 : Enseignement : mise à disposition gratuite des cours de détermination de structure par diffractométrie des poudres sur Internet
- 1995 : Contrat de 5000 US\$ avec la société Procter & Gamble (New York) pour une détermination de structure sur poudre.
- 1997 : Contrat de 5000 US\$ avec la société Hydro-Aluminum (Hollande) pour la détermination de structure de α -NaCaAlF₆
- 1998 : Organisation du SDPD Round Robin : test en aveugle pour évaluer l'efficacité des méthodes de détermination de structure par diffractométrie des poudres
- 1998 : Hébergement Web des archives de la liste de discussion sur la méthode de Rietveld, avec moteur de recherche
- 1999 : Co-fondation avec Lachlan Cranswick de la liste de discussion SDPD (315 inscrits à ce jour)
- 1999 : Ecole thématique : IUCr Kunming Workshop (Chine) – Méthode de Rietveld et détermination de structure par diffractométrie des poudres - seul intervenant avec R.A. Young
- 1999-2003 : Contrat pour analyses quantitatives de mélanges de variétés α et β de thalidomide par la méthode de Rietveld
- 1999-2003 : Enseignement : création du Diplôme Universitaire SDPD (Structure Determination by Powder Diffractometry) en EAD (Enseignement à Distance). 33 étudiants de niveau \geq PhD (<http://sdpd.univ-lemans.fr/course/>)
- 2000 : Ecole thématique : Sixth International Workshop on Crystallography : amorphous and nano-crystalline materials (Egypte)
- 2000 : Contrat de 20000 US\$ avec la Compagnie Dupont de Nemours (Richard Harlow, USA) pour améliorer le logiciel ESPOIR de détermination de structure par diffractométrie des poudres (Monte Carlo, recuit simulé, localisation de molécules).
- 2001 : Accueil de Xiaolong Chen (Académie des Sciences de Beijing) pendant 3 mois pour une collaboration dans le domaine des déterminations de structure par la méthode des poudres.
- 2001 : 29 septembre, grave accident de la route.
- 2002 : Organisation du SMRR (Search-Match Round Robin) et du SDPDRR-2 (Structure Determination by Powder Diffractometry Round Robin 2) - Développement du programme McMaille (indexation de diagramme de poudre par méthode Monte Carlo).
- 2002/3 : Ecriture du logiciel McMaille d'indexation des diagrammes de poudre par méthode Monte Carlo.
- 2003 : Organisation de la très controversée Crystallography Open Database (COD) : <http://www.crystallography.net/>
- 2003/4 : Organisation des UPPWs (Unindexed Powder Pattern of the Week) et proposition des "indexing benchmarks".
- 2004 : Ecriture du logiciel GRINSP (Geometrically Restrained INorganic Structure Prediction).