

Nouvelles approches pour la spectroscopie des phonons avec les rayons X

A.Girard^a, M. Stekiel^c, A. Bosak^b, W. Morgenroth^c, B. Winkler^c

^a Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, UMR 8233, Laboratoire MONARIS, F-75005, Paris, France

^b European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France

^c Institute of Geoscience, Goethe University, Frankfurt am Main, Germany

Contact : adrien.girard@sorbonne-universite.fr

Abstract: La diffusion inélastique des rayons X, en particulier la diffusion diffuse thermique, est une technique relativement peu utilisée pour sonder les phonons dans la matière condensée en comparaison avec des techniques spectroscopiques plus conventionnelles telles que les spectroscopies Raman/Brillouin/IR. Récemment un regain d'intérêt dans ce domaine est apparu avec l'amélioration des techniques de détection et des sources de rayonnement synchrotron. Dans ce contexte, l'analyse de la diffusion diffuse thermique, la diffusion inélastique des rayons X entre les pics de Bragg provenant des phonons (Figure 1a), permet d'obtenir une vision d'ensemble du paysage vibrationnel d'un cristal grâce à la réalisation de cartographies dans des plans particuliers de l'espace réciproque. Cela permet une identification rapide des régions d'intérêt qui peuvent être explorées par la suite au moyen d'études résolues en énergie (Figure 1b).

Dans cette présentation nous verrons comment il est possible de tirer profit de la diffusion diffuse au préalable d'une expérience de spectroscopie X de phonons en synchrotron, une combinaison particulièrement fructueuse lorsqu'elle est couplée avec des calculs *ab-initio* [1,2]. Nous présenterons un nouveau diffractomètre optimisé pour la diffusion diffuse qui a été construit comme station d'appoint du spectromètre haute résolution sur la ligne ID28, la ligne dédiée à la spectroscopie des phonons au centre européen de rayonnement synchrotron (ESRF) [2]. Nous illustrerons cette approche avec quelques exemples récents d'utilisation combinée concernant les aspects dynamiques des transitions de phase dans les matériaux cristallins.

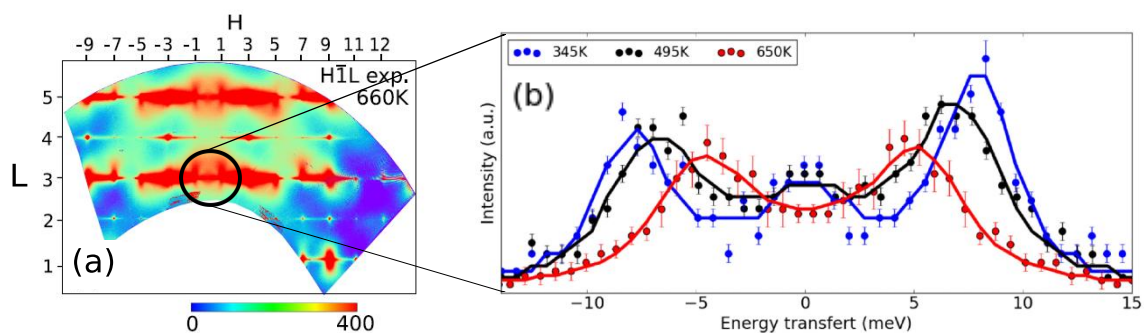


Figure 1. (a) Signal diffus fortement anisotrope d'origine inélastique, dans le plan H-1L de l'espace réciproque, résultant du ramollissement de phonons instables à l'approche de la transition ferroélectrique dans le matériau Bi_2SiO_5 [2]. (b) Spectre résolu en énergie correspondant en bord de zone de Brillouin montrant le ramollissement en température d'un phonon optique associé à une instabilité anti ferroélectrique, en compétition avec l'instabilité ferroélectrique.

Références: [1] Girard *et al*, A new diffractometer for diffuse scattering studies on the ID28 beamline at the ESRF, J. Synchrotron Rad. (2019). 26, 272-279 [2] Girard *et al*, Competing structural instabilities in Bi_2SiO_5 , PHYSICAL REVIEW B 98, 134102 (2018)