



Utilisation des outils du Bilbao Crystallographic Server : application aux transitions de phase

Compte rendu

L'ANF sur les outils du serveur Bilbao s'est tenue du 30 septembre au 4 octobre 2024, au Centre CAES du CNRS, la Vieille Perrotine à Oléron. Elle a réuni une quarantaine de personnes, dans une ambiance chaleureuse et stimulante comme à l'accoutumée. Elle a été financée grâce au SFIP et au soutien des industriels Bruker, Rigaku et Stoe.

La plupart des présentations ont été faites par les deux créateurs du serveur : **Mois Ilia Aroyo** et **Juan Manuel Perez-Mato** du Departamento Física de la Materia Condensada, Universidad del País Vasco, Bilbao (Espagne). Ils ont débuté par des rappels sur les calculs de matrice appliqués à la cristallographie et par l'explication des outils space-group symmetry. La représentation des opérations de symétrie dans ces tables a été abordée ainsi que les diagrammes des groupes d'espace. Cette partie s'est terminée par l'étude des transformations des coordonnées en cristallographie.

Le cours suivant a permis de découvrir les outils du serveur Bilbao pour étudier les structures cristallines (sous-partie *Structure utilities*), afin de comparer, par exemple, 2 descriptions d'une structure cristalline et de vérifier s'il s'agit ou non de la même structure. Il peut être utile aussi de pouvoir comparer la description structurale d'une même phase si les choix qui ont été faits sont différents pour décrire les atomes de l'unité asymétrique, l'origine ou l'orientation de la maille. Le programme **COMPSTRU** permet cette comparaison en quantifiant la distorsion globale ?, qui inclut à la fois la déformation du réseau et les déplacements atomiques, lors du passage d'une structure à une autre.

Philippe Rabiller de l'Institut de Physique de Rennes a conclu cette première journée en introduisant la théorie de Landau des transitions de phase. Cette théorie donne une vue d'ensemble phénoménologique pour toutes les transitions de phase en considérant uniquement les interactions en moyenne et non les fluctuations locales. Le lien entre cristallographie et transition de phase a été particulièrement développé avec notamment l'étude des relations groupe / sous-groupe.

Mois Alia Aroyo a ainsi enchaîné très logiquement le mercredi matin avec un cours sur les relations groupe / sous-groupe entre les groupes d'espace. L'outil **SUBGROUPS**, situé dans la sous-partie *Group-Subgroup Relations of Space Groups* du serveur, permet d'obtenir un graphe des sous-groupes pour n'importe quel groupe d'espace. Lorsqu'un cristal homogène dans la phase d'origine (de haute symétrie) subit une transition de phase vers une structure de plus faible symétrie, cette nouvelle phase aura presque toujours la forme d'une structure non homogène constituée de multiples régions homogènes appelées domaines. Les états de domaine sont limités par les relations de groupe/sous-groupe.

Juan Manuel Perez-Mato a présenté ensuite des relations cristal-structure. Partant d'un groupe d'espace connu de haute symétrie, la question est de déterminer le groupe d'espace de moindre symétrie et la distorsion nécessaire pour passer d'une structure à l'autre grâce notamment à l'outil **PSEUDO** dans la sous-partie *Solid State Theory Applications*. Il permet principalement de prédire des transitions de phase ou encore de rechercher des matériaux ferroïques.

Il s'agissait ensuite pour M. Aroyo d'expliquer les représentations des groupes cristallins. Les informations liées aux représentations irréductibles sont utilisées dans des tables de caractères, qui permettent notamment de prédire si une transition entre 2 états est interdite pour des raisons de symétrie. Toutes la sous-partie *Representations and Applications/ Point and Space Groups* du serveur Bilbao propose des outils en lien avec la représentation : avec **REPRES** on peut obtenir la zone de Brillouin et les représentations irréductibles d'un groupe d'espace selon le vecteur d'onde **k** choisi. La suite de la formation a été consacrée à la présentation et à l'utilisation du programme **AMPLIMODES**, qui utilise les représentations irréductibles.

Juan Manuel Perez-Mato a présenté l'analyse de la symétrie des transitions de phase. Généralement, pour une transition de phase ou une structure déformée, on utilise des modes collectifs adaptés à la symétrie (théorie de Landau) et on va comparer les amplitudes de ces modes de déformations. Tous les modes compatibles avec la symétrie seront

présents dans la distorsion totale, mais tous n'auront pas la même importance.

Ce cours s'est terminé le lendemain matin avec une démonstration réalisée par Pierre-Emmanuel Petit (IMN, Nantes), qui a affiné des structures en combinant l'outil **AMPLIMODES** et le logiciel **FullProf**. Les effets des distorsions sur un diffractogramme ont ainsi pu être observés.

Les supports des interventions sont disponibles en ligne sur le site de RÉCIPROCS à la page dédiée à la formation : https://cdifx.univ-rennes1.fr/RECIPROCS/ANF2024_BCS/RECIPROCS_ANF2024_BCS_presentations.htm



Les participants, encadrés par les 2 formateurs.