

## Des Neutrons à la mode !!!!

Aujourd'hui les thématiques de recherche doivent se dériver dans des termes affirmant l'apport de la recherche scientifique aux grands problèmes sociétaux actuels tels que les politiques les ont définis au niveau national, et mis en lumière dans la construction de l'espace européen de la recherche : Préservation de la planète, énergies propres et/ou renouvelables, santé et progrès thérapeutiques, nouvelles techniques de communication, miniaturisation, procédés industriels de pointe.... autant d'axes affichés qui ont valu de redéfinir les grands domaines de la recherche fondamentale par des « mots-clés » tournés vers les applications. Ces dernières années, les unités de recherches ont été conduites à afficher leurs activités sur la base de ces mots-clés à la mode et les chercheurs ont sans doute rêvé au système miracle « nano-bio-STIC-vert » permettant de convaincre aisément de l'importance de leur activité scientifique.

L'intérêt de cette approche est, nul ne peut en douter, d'installer l'interdisciplinarité : la classification ne se fait plus en physique fondamentale, chimie, biologie, géologie, mais est orientée « projet », faisant appel à la mise en commun de compétences ou à la création de sciences à l'interface de plusieurs communautés. Une analyse analogue s'impose désormais pour classer les sondes d'étude de la matière : elles doivent transcender les barrières thématiques et se révéler indispensables - surtout si elles sont coûteuses - pour faire reculer les limites de la connaissance.

Les techniques neutroniques n'échappent pas à la règle : si leurs atouts sont évidents pour ceux qui les utilisent, il faut continûment affirmer leur apport spécifique et convaincre qu'elles sont indispensables pour servir les axes prioritaires de recherche.

A défaut de se conformer à ce travail de communication - qui souvent embarrasse les chercheurs plus formés à la rigueur de la démarche scientifique - nous risquons de conserver l'étiquette « neutron = recherche purement fondamentale »,... qui, malheureusement, n'a plus aujourd'hui le vent en poupe ! La SFN fait ici appel aux initiatives de la communauté des neutroniciens pour mettre en lumière l'apport des techniques neutroniques et préciser le message à transmettre aux organismes nationaux et européens chargés de la réflexion sur les grands axes de recherche. La SFN profitera des prochaines JDN à Rémuzat pour aborder ce sujet et en débattre avec tous les participants.

Françoise Leclercq-Hugeux

## Dynamique de l'anomalie de densité dans les alliages liquides à base de Te

L'expansion thermique de la matière condensée est la règle, mais elle connaît des exceptions : en phase solide ou liquide, certains matériaux se contractent sous l'effet de la température. Le cas le plus célèbre est sans conteste celui de l'eau, qui se contracte entre 0 et 4°C. Ce type d'anomalie est constatée dans des systèmes comportant des structures et des types de liaisons chimiques très différents. Les alliages de type  $\text{Ge}_x\text{Te}_{1-x}$  notamment, montrent une contraction du volume quand ils sont chauffés, soit dans le liquide surfondu (c'est le cas du Te pur) ou dans le liquide, juste au-dessus du point de fusion. Dans ce groupe de composés, l'anomalie la plus importante en phase liquide est observée pour la composition eutectique  $\text{GeTe}_6$  : elle s'étend sur un domaine de 100K au dessus de  $T_f = 653\text{K}$ . Ce phénomène a été étudié par de nombreuses mesures thermodynamiques (densité, chaleur spécifique) et électriques (résistivité). Ces anomalies des propriétés macroscopiques ont été reliées à des changements structuraux, expérimentalement (diffraction, EXAFS) et par simulations ab initio. Ces études aboutissent à l'image d'un liquide dans lequel les atomes possèdent un environnement octaédrique, celui-ci étant distordu à basse T (grand volume) par le mécanisme de la distorsion de Peierls (qui est une brisure spontanée de symétrie dans les cristaux, aussi observée dans les liquides) et plus symétrique à hautes T (volume réduit). Le moteur de ce changement de structure n'était pourtant pas encore établi.

Pour mieux comprendre cette anomalie de densité, nous avons étudié la dynamique des alliages riches en tellure  $\text{GeTe}_6$  and  $\text{GeTe}_{12}$ , en phase liquide. Nous avons effectué des expériences de diffusion inélastique de neutrons sur ces composés, sur le spectromètre IN6 (ILL). Nous avons observé une forte évolution de la densité d'états de vibrations (VDOS) en température : un déplacement des modes de hautes énergies vers des fréquences plus basses à lieu (« redshift »).

Cette observation traduit l'élongation des liaisons les plus courtes autour des atomes de Ge dans la structure. Elle confirme donc le modèle structural postulant une symétrisation de l'environnement local des atomes quand la température augmente, le long de l'anomalie densité. A partir de la VDOS, nous pouvons calculer la variation d'entropie vibrationnelle en température, et la comparer à la variation d'entropie totale obtenue à partir de mesures de  $C_p$ . Nous trouvons que la variation d'entropie totale est essentiellement due à la contribution vibrationnelle. Ce gain d'entropie constitue le moteur de l'anomalie de densité observée, en contrebalançant la perte d'énergie interne due à l'affaiblissement de la distorsion de Peierls.

Céline Otjacques

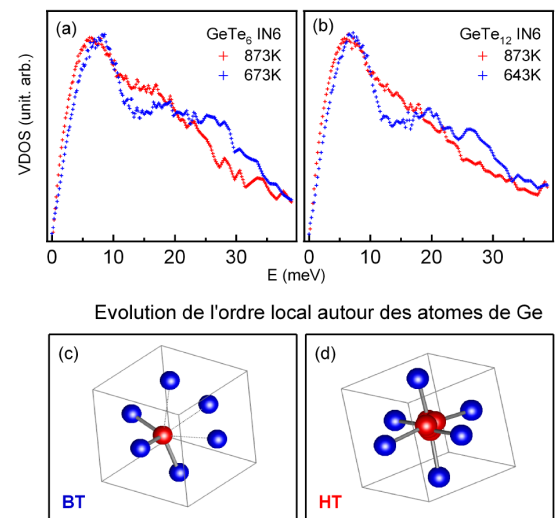


Fig. 1 – (a) et (b) VDOS obtenues sur IN6 pour  $\text{GeTe}_6$  et  $\text{GeTe}_{12}$ . (c) et (d) Illustration des environnements des atomes de Ge à basse et haute températures. A basse T la structure est formée d'atomes de Ge entourés de Te, une distorsion est présente (distances courtes et longues) et le volume est grand. A haute T l'environnement est plus symétrique et le volume réduit.

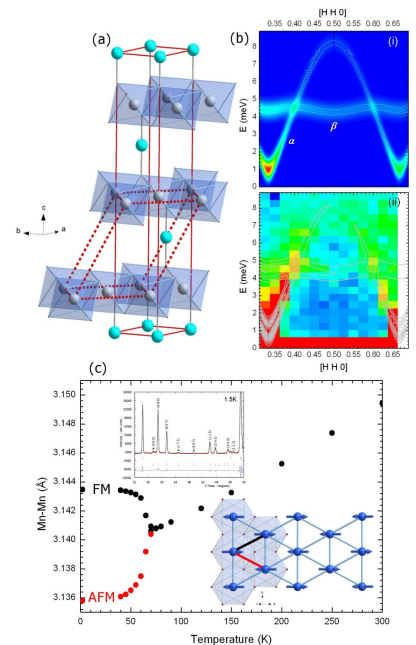
## Deux oxydes multiferroïques: $\text{CuCrO}_2$ et $\text{CuMnO}_2$

Frustration géométrique et multiferroïcité (le couplage de deux ou plusieurs paramètres d'ordre), sont actuellement deux domaines très actifs de la physique de la matière condensée. A la frontière entre ces deux domaines,  $\text{CuCrO}_2$  et  $\text{CuMnO}_2$  sont deux oxydes antiferromagnétiques (AFM) présentant une frustration géométrique du type réseau triangulaire (isotrope dans le cas de  $\text{CuCrO}_2$ , anisotrope dans celui de  $\text{CuMnO}_2$ ). Ces deux oxydes dits «delafossites» ont un caractère bidimensionnel très marqué, et peuvent être décrits comme un empilement de plans compacts  $[\text{CrO}_2]^\infty$  ou  $[\text{MnO}_2]^\infty$ , séparés par des liaisons O-Cu-O linéaires (Fig. 1a). On observe cependant dans ces deux composés des comportements différents à la température d'ordre magnétique  $T_N$ , conduisant à des propriétés magnétoélectriques dans  $\text{CuCrO}_2$ , et ferroélastiques dans  $\text{CuMnO}_2$ .

En dessous de  $T_N$ , la diffraction de neutrons permet de proposer pour  $\text{CuCrO}_2$  un modèle de structure magnétique incommensurable hélicoïdale ( $\mathbf{k} = (q \ q \ 0)$   $q = 0.329(1)$ , maille R-3m), dérivé de l'agencement à  $120^\circ$  du réseau triangulaire; il est également compatible avec une polarisation électrique dans les plans  $[\text{CrO}_2]^\infty$ , en accord avec les observations expérimentales. Sans qu'il y ait abaissement de la symétrie rhomboédrique, une relaxation de la compression selon c de l'octaèdre  $\text{CrO}_6$  est observée à  $T_N$ . La dynamique de spins de  $\text{CuCrO}_2$  se rapproche de celle attendue pour un réseau triangulaire de spins Heisenberg à 2D: pour décrire les résultats expérimentaux s'ajoutent, à un terme d'anisotropie magnétique planaire et au fort couplage antiferromagnétique premier voisin dans le plan, un couplage deuxième voisin faiblement AFM et un faible couplage FM entre plans (Fig. 1b). Ce couplage entre plans permet de comprendre l'incommensurabilité de la structure par rapport à la structure à  $120^\circ$  du réseau triangulaire parfait. La structure magnétique non colinéaire et chirale est à l'origine des propriétés magnétoélectriques de  $\text{CuCrO}_2$  [1].

Dans  $\text{CuMnO}_2$ , la structure magnétique stabilisée en dessous de la température d'ordre AFM est colinéaire ( $\mathbf{k} = (-\frac{1}{2} \ \frac{1}{2} \ \frac{1}{2})$ , maille C-1); les moments magnétiques, orientés dans la direction d'élongation des octaèdres  $\text{MnO}_6$ , témoignent d'une forte anisotropie uniaxiale à l'origine d'un gap dans le spectre des excitations. La mise en ordre AFM s'accompagne d'une distorsion du réseau triangulaire anisotrope, conduisant à un abaissement de la symétrie cristalline de monoclinique à triclinique, qui permet de lever la frustration des couplages magnétiques (Fig. 1c). A la transition magnéto-élastique, les contraintes calculées évoluent quadratiquement avec le moment magnétique, qui est le paramètre d'ordre primaire: c'est la signature d'un composé ferroélastique impropre, dans lequel il est possible de contrôler les domaines magnétiques par application d'une contrainte externe.

Françoise Damay



**Figure** : Figure 1 : (a) Structure delafossite (en rouge) et structure monoclinique dérivée (en pointillés). Les plans compacts  $[\text{CrO}_2]^\infty$  ou  $[\text{MnO}_2]^\infty$  d'octaèdres  $\text{CrO}_6$  (ou  $\text{MnO}_6$ ) sont représentés en bleu foncé, les atomes de cuivre en bleu turquoise. (b) Modélisation (i) et carte expérimentale (ii) de la dispersion des ondes de spins selon  $[H \ H \ 0]$  dans  $\text{CuCrO}_2$  (4F2, LLB,  $kf = 1.970\text{\AA}^{-1}$ ) mettant en évidence par l'intermédiaire de l'affaissement de la branche  $\beta$  le couplage deuxième voisin dans le plan hexagonal. (c) Evolution avec la température des distances Mn-Mn dans  $\text{CuMnO}_2$ . Le diagramme de diffraction de neutrons à 1.5K (G4.1, LLB) et la structure magnétique correspondante sont également représentés.

[1] T. H. Arima et al., J. Phys. Soc. Japan **76**, 073702 (2007)

Ce travail est le fruit d'une collaboration entre le CRISMAT (Caen) et le LLB (CEA-Saclay)

M. Poienar et al., Phys. Rev. B **79**, 014412 (2009); F. Damay et al., Phys. Rev. B **80**, 094410 (2009)

## Marguerite Quilichini (1940-2009)



Marguerite Quilichini est décédée le 21 novembre 2009 après une lutte de plusieurs années contre le cancer. Après s'être formée à la neutronique à l'ILL, elle avait rejoint le LLB dans les premières années d'Orphée. Parallèlement à son travail de recherche, elle enseignait à l'Université de Paris VI. Spécialiste des transitions de phase, elle a encadré de nombreuses thèses basées sur des mesures de phonons réalisées sur les spectromètres 3-axes. La qualité de ses résultats lui a valu rapidement l'estime des meilleurs spécialistes de ce domaine. Elle s'engageait pleinement dans les collaborations et sa ténacité a permis l'aboutissement de nombreux travaux. Elle a ainsi été pionnière dans l'obtention de résultats de mesure de phonons dans les quasi-cristaux ou dans des composés organiques comme l'alanine. Elle avait la passion de l'enseignement et était unanimement appréciée de ses étudiants et de ses thésards. Elle alliait avec beaucoup de spontanéité la rigueur dans le travail et un comportement quasi maternelle, qu'elle maîtrisait avec beaucoup d'humour. Son caractère entier et son rire facétieux en faisait une collègue aimée de tous. Quand elle a appris qu'elle souffrait d'un cancer, elle n'a pas baissé les bras. Elle a continué son enseignement et a assuré jusqu'au bout l'encadrement de la thèse en cours. En juin 2008, elle a officiellement pris sa retraite ainsi que Fernande Moussa, Martine et Bernard Hennion. La rencontre scientifique organisée à cette occasion a été le dernier rendez-vous public avec ses collègues et amis. Ces travaux scientifiques perdureront, mais nous garderons surtout le souvenir d'une collègue et amie irremplaçable.

Bernard Hennion

## Le coin des annonces

Envoyez vos annonces à [gregory.chaboussant@cea.fr](mailto:gregory.chaboussant@cea.fr)

### Conférences, Workshop et Écoles Thématiques

- Parution des cours de l'école thématique «Diffusion inélastique des neutrons pour l'étude des excitations dans la matière condensée» (JDN16 en 2008) sur le site [www.neutron-sciences.org](http://www.neutron-sciences.org)
- ECNS 2011 Prague (17-21 juillet 2011). Deadline résumé: février 2011. Site web: <http://ecns2011.org/>