

Diffraction des rayons X couplée aux simulations numériques et l'intelligence artificielle pour l'étude de couches minces épitaxiales.

Alexandre Boulle

1. Institut de Recherche sur les Céramiques (IRCER), UMR CNRS 7315, Limoges

L'obtention d'informations sur la structure cristalline des matériaux (espace réel) à partir des données de diffraction des rayons X (espace réciproque) se heurte au « problème de la phase ». En effet, les coordonnées atomiques, incluant les déviations à la structure moyenne, affectent l'amplitude diffusée, alors que la quantité mesurée par DRX est l'intensité, c'est-à-dire le module au carré de l'amplitude. Ainsi, alors que le module de l'amplitude peut être déterminé directement, la phase de celle-ci est perdue. Par conséquent, une inversion directe de l'intensité diffractée ne fournit que des différences de position, à partir desquelles il n'existe aucun moyen direct de retrouver des positions atomiques absolues.

Pendant des décennies, les scientifiques se sont appuyés sur des algorithmes de modélisation et d'ajustement pour contourner ce problème : un modèle structural est utilisé pour calculer l'intensité diffractée et les paramètres du modèle sont affinés de manière itérative jusqu'à obtenir un bon accord avec les données expérimentales. C'est ce qui explique l'importance primordiale des simulations numériques dans l'étude de la nanostructure des matériaux, et notamment des couches minces épitaxiales, dont la bonne qualité cristalline permet en général une détermination très poussée des paramètres nanostructuraux.

Si le succès de ce type d'approche n'est plus à démontrer, de nouveaux défis se présentent à nous, notamment du fait de l'explosion de la quantité de données consécutive aux progrès technologiques, en particulier aux installations de rayonnement synchrotron, mais également sur les diffractomètres de laboratoire. Afin de faire face à ces grandes quantités de données (qui peuvent atteindre plusieurs GO à TO selon les cas), une des solutions possibles consiste à s'appuyer sur des algorithmes d'intelligence artificielle.

Ces problématiques seront abordées au travers de quelques exemples, notamment :

- le rôle des contraintes thermiques et épitaxiales sur la transition métal-isolant de couches minces de VO_2
- la quantification des dislocations à l'interfaces de couches minces de CeO_2 déposées sur ZrO_2
- le développement de gradient de déformations dans des matériaux soumis à irradiation ionique,
- etc.