

Amorpheus : un logiciel en libre accès pour l'analyse des données de diffusion de rayons X sur des systèmes liquides ou amorphes

L'étude de la structure locale d'un liquide ou d'un solide amorphe soumis à des conditions extrêmes de pression et de température permet d'en déduire la densité, ainsi que la compressibilité, l'expansion thermique et, éventuellement, d'identifier des transitions de phase liquide-liquide. L'analyse et l'exploitation du signal de diffusion sont complexes et les logiciels existants ne sont pas nécessairement adaptés au traitement systématique d'une grande quantité de données.

Dans ce contexte, le logiciel Amorpheus a été créé à l'IMPMC. Écrit en python pour garantir une meilleure versatilité et une distribution libre, il permet de déterminer le facteur de structure, la fonction de distribution radiale et la densité d'un liquide ou d'un amorphe. Ce logiciel se distingue par son implémentation d'algorithmes automatiques pour le traitement de données en série et la possibilité de tester l'influence des différents paramètres entrants dans l'analyse du signal de diffusion. Amorpheus a été testé pour traiter des données obtenues en dispersion angulaire et en dispersion d'énergie sur des échantillons en conditions extrêmes de pression et de température, générés en presse Paris-Edimbourg, multi-enclumes et cellule à enclume de diamants.

La structure d'un liquide ou d'un matériau amorphe se différencie de la structure d'un solide cristallin, caractérisée par un ordre à longue distance, et de celle d'un gaz, caractérisée par l'absence d'ordre. Un liquide ou un solide amorphe présentent un ordre à courte distance et leurs structures locales peuvent être décrites par une fonction de distribution radiale. Cette fonction représente la probabilité de trouver un atome à une distance r d'un autre atome considéré comme l'origine.

Dans le domaine des conditions extrêmes, étudier la structure d'un liquide ou d'un solide amorphe et extraire sa densité a un intérêt fondamental, car cela permet de déterminer ses propriétés thermo-élastiques telles que la compressibilité et l'expansion thermique, qui sont des grandeurs cruciales pour de nombreuses applications dans le domaine de la physique et chimie des matériaux, aussi qu'en planétologie.

Grâce au développement des synchrotrons de troisième génération et des diffractomètres de laboratoire de plus en plus performants, l'étude de la structure des matériaux liquides et amorphes en conditions extrêmes est désormais devenue largement accessible. L'analyse du signal de diffusion de rayons X nécessaire pour extraire le facteur de structure, la fonction de distribution radiale, ainsi que la densité, reste cependant complexe à réaliser, notamment pour le choix des paramètres nécessaires à la normalisation. Plusieurs logiciels ont été développés à cet effet (e.g. PDFgetX, GudrunX, LiquidDiffract et Glassure), mais une solution open-source facile à utiliser et permettant d'extraire la densité de façon cohérente sur une série de données manquait.

Amorpheus est un logiciel facile d'utilisation, avec une interface à ligne de commande (Figure). L'implémentation d'algorithmes permet une exploration efficace de l'espace des paramètres pour la normalisation du signal, l'extraction du facteur de structure, la fonction de distribution radiale et la densité. Grâce à une fonction Batch, l'analyse systématique d'une importante quantité de données en série est enfin possible. De plus, un outil avec interface graphique (RPS : Remove Peaks & Smooth) peut être utilisé pour pré-traiter les données brutes, soustraire les pics restants du solide et lisser le signal.

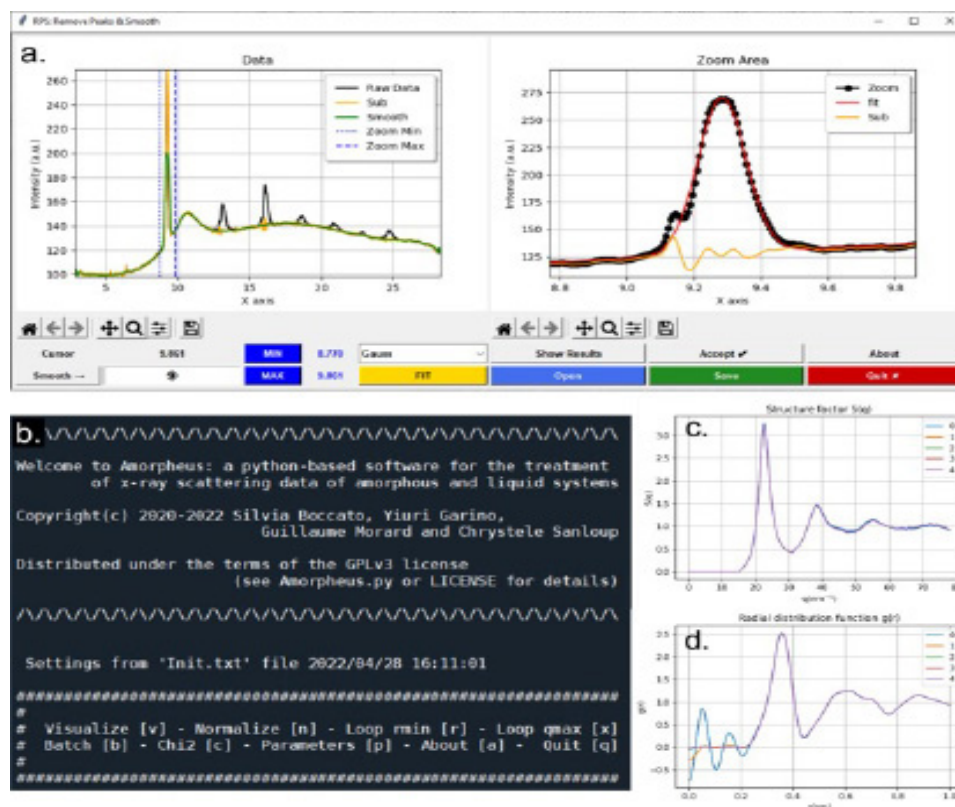


Figure
a. Interface du logiciel. RPS (Remove Peaks & Smooth) et b., interface de Amorpheus. Le facteur de structure et la fonction de distribution radiale obtenus pour l'exemple d'un verre à base de cérium sont représentés en c. et d..

Amorpheus est un logiciel conçu pour le traitement de données à conditions ambiantes et en conditions extrêmes de pression et de température. Il a été testé sur plusieurs solides amorphes (MgSiO_3 , SiO_2 et un verre à base de cérium) et liquides (Fe, Al et un alliage de Fe-Si) à des pressions allant jusqu'à 100 GPa et des températures allant jusqu'à plusieurs milliers de Kelvin. Ces conditions extrêmes ont été avec des dispositifs haute pression variés (Presse Paris-Edimbourg, presse à multi-enclumes et des cellules à enclumes de diamants) présentant donc des environnements d'échantillon très différents.. Amorpheus est déjà utilisé pour l'analyse des données mesurées sur différentes lignes de lumière comme PSICHE à SOLEIL, ID27 à l'ESRF, I15 à Diamond Light Source et 13-IDD à l'APS.

La création de ce logiciel vise à fournir à la communauté scientifique un standard pour l'analyse d'un signal de diffusion des liquides et des solides amorphes. Optimisé pour des expérimentations à haute pression, son utilité reste ouverte à un public plus large et sa nature évolutive permettra l'adaptation aux différents besoins des utilisateurs.

Référence

Amorpheus: a Python-based software for the treatment of X-ray scattering data of amorphous and liquid systems

S. Boccato, Y. Garino, G. Morard, B. Zhao, F. Xu, C. Sanloup, A. King, N. Guignot, A. Clark, G. Garbarino, M. Morand & D. Antonangeli

High Pressure Research, 2022, <https://doi.org/10.1080/08957959.2022.2032032>

Software download : <https://github.com/CelluleProjet/Amorpheus>

Contacts

Silvia Boccato silvia.boccato@upmc.fr

Yiuri Garino yiuri.garino@cnrs.fr