

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOULOU D MAMMERI DE TIZI-OUZOU

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE CHIMIE



MEMOIRE DE MASTER

SPECIALITE : CHIMIE

OPTION : SCIENCES DE LA MATIERE

Présenté par

SLIMANE ALI Louiza

BENSADI Ahlam

Sujet

***Propriétés dynamiques d'interfaces métalliques dans les
structures cubiques à faces centrées [110]***

Soutenu, le 14/07/2022

Devant la commission d'examen composée de

Mme. Lila DJEBALA	MCA	UMMTO	Présidente
Mme. Fazia LEKADIR	MCB	UMMTO	Rapporteur
Mme. Ouahiba NAFA	MCA	UMMTO	Examinatrice
Mme. Ouiza ALLOUANE	MAA	UMMTO	Invitée

Remerciements

En premier lieu on tient à remercier Dieu tout puissant qui nous a donné la force et le courage d'aller au bout de notre objectif.

A notre encadreur Mme LEKADIR Fazia maitre de conférences à l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou nous tenons à lui exprimer notre plus vive reconnaissance d'avoir accepté de diriger notre mémoire de fin d'étude et pour l'efficacité de la bienveillance avec lesquelles elle nous a constamment guidé et encouragé avec ses conseils qui nous ont permis de mener à terme notre travail.

A Mme DJEBALA Lila maitre de conférences à l'université Mouloud Mammeri qui nous a fait l'honneur de bien vouloir assurer la présidence du jury

A Mme NAFA Ouahiba maitre de conférences à l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou nous lui adressons notre profond remerciement d'avoir accepté d'examiner notre travail de fin d'étude.

A Mme ALLOUANE Ouiza maitre assistante à l'université Mouloud Mammeri nous lui exprimons nos plus vifs remerciements d'avoir accepté notre invitation

SLIMANE ALI & BENSADI

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail en signe de respect et de reconnaissance à :

Mes parents pour leur affection et leur amour et leurs encouragements

Mes deux frères Hichem et Moha et ma sœur Karima

Mes deux nièces Romaiissa et Aya

Que dieu les garde et les protège

A toute ma famille

Mes ami(e)s

A toi aussi ma binôme Louiza

AHLAM

Dédicaces

Ce mémoire de fin d'étude est dédié à ma chère mère et mes chers frères Ouali et Massi et mes sœurs Farida, Karima et Zohra qui m'ont toujours poussé et motivé. Sans eux je n'aurai certainement pas réussi.

Je remercie ma grand-mère et ma tante et sa famille pour leur appui et leur encouragement.

A tout mes proches

A tout mes neveux « que dieu les protège et leur offre la chance et le bonheur »

A tout mes ami(e)s que je remercie pour leur présence pour moi.

A mon amie et binôme Ahlam avec qui j'ai partagé les beaux et les mauvais moments.

Enfin,

Je dédie ce travail à la mémoire de mon très cher regretté père malheureusement il n'est pas dans ce monde pour partager avec moi ma réussite, repose en paix

LOUIZA

Sommaire

Liste des figures et tableaux

Introduction générale	1
Chapitre I : Généralités sur la dynamique vibrationnelle	3
I. Dynamique vibrationnelle des systèmes ordonnés	3
I.2. Dynamique vibrationnelle des systèmes désordonnés	6
I.2.1. Méthodes théoriques utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes désordonnés	6
I.2.1.1. La méthode de diagonalisation directe	6
I.2.1.2. La méthode des fonctions de Green	7
I.2.1.3. La méthode de raccordement	8
I.3. Calcul des densités d'états vibrationnelles	11
CHAPITRE II : Dynamique des réseaux	13
II.2. Types de défauts	13
II.2.1. Défauts ponctuels	13
II.2.2. Défauts linéaires	15
II.2.3. Défauts bidimensionnel (plan)	16
II.2.4. Les défauts tridimensionnels	16
II.3. Les phonons	17
II.3.1. Les différents types de phonons	17
2) Les phonons acoustiques	17
3) Les phonons optiques	18
CHAPITRE III : Dynamique des systèmes parfaits de type CFC	19
III.2. Dynamique du guide d'onde CFC parfait	20
III.2.1. Calcul des limites de la zone de Brillouin d'une structure CFC	20
a) Le système modèle	22
b) Les équations du mouvement	22
III.3. Propriétés vibrationnelles en volume	27
III.3.1. Courbe de dispersion	27
III.3.2. Interprétation des résultats	28
III.3.3. Calcul des facteurs de phase	28
a) Méthode du déterminant	28
b) Discussion des résultats	29
Chapitre IV : Propriétés vibrationnelles d'une interface entre deux systèmes CFC	30
IV.1. Dynamique vibrationnelle de l'interface	30

Sommaire

IV.1.1. Description du modèle perturbé	30
IV.1.2. Matrice dynamique du système perturbé	31
IV.1.3. Matrice de raccordement.....	32
IV.2. Résultats et discussions.....	35
IV.2.1. Les états localisés	35
a) Cas de durcissement.....	35
b) Cas d'homogénéité.....	36
c) Cas d'adoucissement	37
IV.2.2. Interprétation des résultats	38
IV.2.3. Les densités d'états vibrationnelles locales.....	39
IV.3. Application aux cas réels	40
IV.3.1. Etats localisés	41
IV.3.1.1. Cas du système Cu/Pt.....	41
IV.3.1.2. Cas du système Au/Pd.....	42
IV.3.1.3. Cas d'un alliage Cu/Pd	43
IV.3.2. Densités d'états vibrationnelles	43
IV.3.2. 1. Interfaces Cu/Pt et Pt/Cu.....	43
IV.3.2.2. Interfaces Au/Pd et Pd/Au.....	44
IV.3.2.3. Interfaces Cu/Pd et Pd/Cu	46
Conclusion générale	48
Références bibliographiques	49

Liste des figures et tableaux

Figure I.1 Représentation schématique d'un solide perturbé de basse dimensionnalité -----	8
Figure II.1: Représentation schématique d'une structure cristalline-----	13
Figure II.2 : Illustration de défauts ponctuels : (a) Lacune, (b) interstitiels -----	14
Figure II.3 : Illustration de défauts ponctuels : (a) atome en substitution, (b) atome étranger en substitution. -----	14
Figure II.4 : Illustration de défauts linéaire : (a) Structure d'une dislocation coin et (b) dislocation vis --	15
Figure II. 5 : Illustration de défauts plans joints de grains et de Macles-----	16
Figure II.6 : Illustration de défauts tridimensionnels différents types de précipités-----	17
Figure III.1: Les trois structures cubiques à faces centrées dans les directions (100), (110), et (111)----	19
Figure III.2 : Cellule élémentaire d'un CFC suivant (110)-----	20
Figure III.3 : Représentation du réseau direct en (a), réseau réciproque en (b) du CFC suivant [110] ----	21
Figure III.4 : Représentation schématique d'une structure cristalline d'un réseau CFC suivant la direction [110]-----	22
Figure III.5 : Courbe de dispersion des phonons en volume d'un cristal cubique à faces centrées suivant les directions de hautes symétries -----	27
Figure III.6 : La représentation des facteurs de phase -----	29
Figure. IV.1. Représentation schématique d'une interface séparant deux systèmes de type CFC suivant la direction [110], de type A/B -----	31
Figure IV.2 : Les états localisés au niveau d'une interface du type A/B dans une structure CFC suivant [110] dans le cas de durcissement. (a) le cas d'une masse lourde, (b) une masse homogène et (c) le cas d'une masse légère -----	35
Figure IV.3 : Les états localisés au niveau d'une interface du type A/B dans une structure CFC [110] dans le cas d'homogénéité. (a) le cas d'une masse lourde, (b) une masse homogène et (c) le cas d'une masse légère -----	36
Figure IV.4 : Les états localisés au niveau d'une interface du type A/B dans une structure CFC [110] dans le cas d'adoucissement. (a) cas d'une masse lourde, (b) cas une masse homogène et (c) cas d'une masse légère -----	37
Figure IV.5 : Densités d'états vibrationnelles des sites appartenant à l'interface-----	39
Tableau IV. 1 : Les constantes de forces entre premiers et seconds voisins calculées à partir de la référence [52], en fonction des longueurs de liaisons atomiques -----	40
Tableau IV. 2 : Les constantes de forces entre premiers et seconds voisins calculées en fonction des longueurs de liaisons atomiques.-----	40
Figure IV.6 : Les états localisés au niveau d'une interface métallique : Cu/Pt et Pt/Cu.-----	41
Figure IV.7 : Les états localisés au niveau d'une interface métallique : Au/Pd et Pd/Au. -----	42
Figure IV.8 : Les états localisés au niveau d'une interface métallique : Pd/Cu et Cu/Pd.-----	43
Figure IV.9 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Cu/ Pt.-----	44

Liste des figures

Figure IV.10 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Pt/ Cu. -----	44
Figure IV.11 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Au/Pd. -----	45
Figure IV.12 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Pd/Au. -----	45
Figure IV.13 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Cu/Pd. -----	46
Figure IV.14 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Pd/Cu. -----	46

Introduction générale

Les études concernant les propriétés des interfaces nanostructurées sont un vaste sujet de recherche qui a fait apparaître un concept principal qui est la réduction de la dimensionnalité. L'intérêt porté à la connaissance des propriétés d'interfaces est stimulé par l'importance des domaines d'applications, qui sont très divers, à la fois sur le plan de la recherche fondamentale, et sur celui du progrès technologique dont les conséquences des applications industrielles sont d'une grande utilité.

Tout solide, se trouve limité par une surface ou interface de contact avec le milieu qui l'entoure (un autre matériau, un vide ...). L'existence de cette surface ou interface constitue une brisure de symétrie qui peut affecter et modifier profondément les propriétés physiques du solide. Le désordre, tel que les marches atomiques, les nano structures et les interfaces qu'on peut rencontrer dans les systèmes de basses dimensions, peut fortement influencer la propagation des ondes vibrationnelles dans ces milieux.

Les systèmes cristallins réels ne sont jamais des cristaux parfaits. Ils présentent toujours de nombreux défauts. Ces derniers sont, soient présents à l'équilibre thermique ou non, soient introduits lors de la fabrication du matériau ou encore lors de leurs utilisations. Les propriétés physiques et chimiques macro- et microscopiques des systèmes (élasticité, plasticité, fragilité, stabilité, mobilité, etc.) sont très souvent directement reliées à la présence et à la nature de ces défauts. L'étude de ces derniers dans les métaux est par conséquent, un vaste domaine de recherche en métallurgie et plus généralement en physique du solide.

Les techniques expérimentales ne sont pas toujours en mesure de fournir une interprétation satisfaisante de leurs propriétés (taille des défauts, complexité des structures, énergies, ...). Les méthodes de simulation numérique du comportement de ces systèmes nanostructurés, sont indispensables à la compréhension de leurs propriétés mécaniques et vibrationnelles. On peut distinguer, celles utilisant les approches quantiques et celles utilisant les lois classiques. Les premières sont réservées aux systèmes à l'échelle microscopique, les secondes concernent l'étude des systèmes à l'échelle microscopique.

Ce travail constitue une étude théorique basée sur des simulations numériques, consacrée à l'étude de la dynamique des interfaces métalliques dans les structures cubiques à faces centrées, suivant la direction [110].

L'objectif de ce travail est de comprendre la dynamique vibrationnelle des matériaux CFC en présence d'interfaces à cristallisation cubique à faces centrées sur les propriétés vibrationnelles des matériaux, d'une manière générale, c'est la compréhension de l'impact et le rôle des interfaces sur les propriétés vibrationnelles.

L'ensemble du travail que nous présentons est structuré de la façon suivante :

Au premier chapitre, nous rappelons des notions de base de la dynamique vibrationnelle, ainsi que les différentes méthodes théoriques qui sont utilisées pour l'étude des systèmes désordonnés. La méthode de raccordement, y est introduite et elle sera utilisée dans notre travail. Une grande partie de ce chapitre est consacré à la description du formalisme général de la méthode utilisée. D'autres méthodes théoriques existent dans la littérature scientifique conçues pour ce genre d'étude, nous citons certaines d'entre elles.

Le second chapitre est consacré à décrire le réseau de Bravais puis nous détaillons les différents types de défauts qui peuvent exister dans un matériau à savoir défauts ponctuels, linéaires ou volumique, et une dernière partie de ce chapitre sera consacrée à définir les différents types de phonons.

Dans le troisième chapitre, nous présentons l'étude dynamique d'un système parfait (en volume) qui est la structure cubique à faces centrées suivant la direction [110], ainsi que la description de sa structure correspondante dans le réseau réciproque, et le calcul des vecteurs réciproques, nous avons tracé ses courbes de dispersion et ses facteurs de phases.

Le quatrième chapitre est réservé à l'étude vibrationnelle d'une interface métallique de type A/B suivant la direction [110], nous avons appliqué la théorie de raccordement pour le calcul des propriétés vibrationnelles ce qui a permis de tracer les courbes de dispersion des phonons localisés au niveau de l'interface dans trois cas différents: $m_2 > m_1$, $m_2 < m_1$ et $m_2 = m_1$, et aussi dans les cas d'adoucissement, l'homogénéité et le durcissement, nous avons aussi calculé les densités d'états associées aux sites localisés dans la zone perturbée.

Nous clôturons notre mémoire par une conclusion générale qui synthétise tous les résultats trouvés à travers notre étude.

Chapitre I : Généralités sur la dynamique vibrationnelle

Introduction

Les matériaux à structure cubique à faces centrées présentent un immense intérêt dans les domaines scientifique et industriels [1-4]. pour étudier les propriétés physiques liées à la dynamique vibrationnelle dans les solides cristallins présentant des défauts de structure, plusieurs techniques de calcul ont été développées et adoptées par plusieurs auteurs comme Leibfried [5], Born et Huang [6], Maradions, Montroll et Weiss [7].

I. Dynamique vibrationnelle des systèmes ordonnés

Un solide cristallin est constitué par la répétition périodique, dans la tridimension de l'espace d'un motif atomique ou moléculaire, est dite une maille. La périodicité de la structure d'un cristal, est donc représentée par un ensemble de points régulièrement disposés. Cet ensemble est dit un réseau cristallin, et les points le constituant, sont des nœuds du réseau étant des entiers relatifs si la maille choisie pour décrire le réseau est primitive. La périodicité d'un cristal est décrite par un ensemble de vecteurs positions, qui localisent chaque maille élémentaire du cristal dans l'espace [8].

Considérons une cellule composée de N atomes excités par un mode vibrationnel de fréquence angulaire ω . Soient \vec{a}_1 , \vec{a}_2 et \vec{a}_3 les trois vecteurs de base définissant la maille élémentaire du système considéré. Dans ces considérations, un atome est localisé par un vecteur position donnée par :

$$\vec{r}_0 = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3 \quad (1.1)$$

Où m_1 , m_2 et m_3 sont des entiers naturels qui peuvent être positifs, négatifs ou bien nuls.

Sous l'action des fluctuations thermiques, l'atome ne reste pas sur une position fixe. A l'instant t , la position du $l^{\text{ème}}$ atome sera désignée par le vecteur $\vec{r}(l,t)$:

$$\vec{r}(l,t) = \vec{r}_0(l,t) + \vec{u}(l,t) \quad (1.2)$$

Avec :

$\vec{r}_0(l)$ représente la position de l'atome l dans la configuration d'équilibre.

$\vec{u}(l,t)$ est le déplacement par rapport à cette position d'équilibre.

Pour étudier le mouvement de ces atomes, on applique la deuxième loi de Newton :

$$m(l) \frac{d^2 \vec{R}_i}{dt^2} = \sum \vec{F} \quad \Leftrightarrow \quad m(l) \frac{d^2 \vec{r}(l,t)}{dt^2} = \sum \vec{F} \quad (1.3)$$

Dans le cadre de l'approximation harmonique associé au modèle des forces centrales, l'équation de mouvement d'un atome occupant le site l s'écrit :

$$m(l) \frac{d^2 \vec{u}_\alpha(l,t)}{dt^2} = - \sum_{l \neq l'} \sum_\beta \left(\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) K(l, l') [\vec{u}_\beta(l, t) - \vec{u}_\beta(l', t)] \quad (1.4)$$

α et β représentent les trois directions cartésiennes x , y , et z ,

$m(l)$ la masse de l'atome du site l , $\vec{u}_\alpha(l, t)$ l'amplitude de vibration suivant la direction α ,

r_α et r_β sont respectivement les composantes cartésiennes selon les directions α et β du vecteur $\vec{r}(l, l')$ joignant les positions d'équilibre des atomes aux sites l et l' , r est le module du vecteur $\vec{r}(l, l')$, $k(l, l')$ la constante de force de rappel entre les atomes des sites l et l' .

En utilisons des solutions des ondes planes de type

$$\vec{u}(l', \omega) = \vec{u}(l, \omega) \exp(i \vec{q} \cdot \vec{r}(l, l'))$$

on peut alors réécrire l'équation (1.4) du mouvement vibrationnel de l'atome l comme suit :

$$\omega^2 m_l u_\alpha(l) = - \sum_{l \neq l'} \sum_\beta \left(\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) k(l, l') [u_\beta(l) - u_\beta(l')] \quad (1.5)$$

\vec{q} étant un vecteur d'onde du réseau réciproque du cristal ; $\vec{r}(l, l')$ est le vecteur joignant la position d'équilibre de l'atome au site l à celle de l'atome au site l' .

L'équation (1.5) peut être écrite pour N atomes contenues dans la cellule élémentaire et selon les trois directions cartésiennes. Nous sommes alors en présence d'un système de $(3N)$ équations de mouvements (il y a 3 degrés de liberté par site).

Le modèle du cristal illimité qui peut être construit en répétant périodiquement dans l'espace le bloc des N atomes d'un cristal fini de même structure, présente l'avantage de la symétrie de translation avec les conditions aux limites (condition de Born Von Karman) permettent de réduire le champ des déplacements du système. En fait, grâce à la périodicité spatiale de l'environnement atomique, deux atomes l et l' , occupant deux sites équivalents du réseau, doivent effectuer à une phase près, les mêmes mouvements vibratoires.

La relation (1.5) donne $3N$ équations homogènes à $3N$ inconnues, où N désigne le nombre d'atomes dans la maille élémentaire du réseau.

L'écriture des $3N$ équations du mouvement sur les différents atomes constitutifs de la maille élémentaire du cristal étudié, combinée à la condition de périodicité, permet d'établir la matrice dynamique qui définit l'état vibratoire du système. Elle est mise en équations par le système matriciel homogène suivant :

$$[\omega^2 I - D(\vec{q})]|u\rangle = 0 \quad (1.7)$$

$D(\vec{q})$ étant la matrice dynamique ($3N \times 3N$) dont les éléments dépendent généralement des paramètres structuraux du solide, des constantes de force entre les différents atomes et du vecteur d'onde \vec{q} ; I est une matrice identité d'ordre ($3N \times 3N$), et $|u\rangle$ étant le vecteur propre du déplacement atomiques à $3N$ composantes.

La condition pour que le système homogène (1.7) ait des solutions en ω non triviales est que le déterminant soit nul :

$$\det[\omega^2 I - D(\vec{q})] = 0 \quad (1.8)$$

Ainsi, grâce à la condition de compatibilité du système (1.7) qui fournit une équation algébrique en ω , nous pouvons déterminer les différents modes de vibration du solide en affectant à chaque vecteur d'onde \vec{q} de la première zone de Brillouin, les $3N$ solutions ω_s telle que $\omega_s > 0$. L'indice $s = 1 \dots 3N$ numérote les différentes branches de dispersion. Par convention, à chaque fois on a à indexer des courbes de dispersion, on les numérote de bas en haut, en se plaçant au centre de la zone de Brillouin ($\vec{q} \rightarrow 0$).

I.2. Dynamique vibrationnelle des systèmes désordonnés

I.2.1. Méthodes théoriques utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes désordonnés

Le formalisme donné par la section précédente, basé sur les conditions aux limites périodiques de *Born* et *Von Karman*, s'applique seulement aux systèmes périodiques. Or en ce qui concerne l'étude des modes vibrationnels des systèmes perturbés de basse dimensionnalité, l'absence de la symétrie de translation dans la direction normale à l'interface rend difficile la résolution du système d'équations du mouvement vibratoire d'un solide semi

infini. Elle entraîne des modifications de l'ordonnement des atomes, de la structure électronique et de la dynamique du réseau [9], d'où la nécessité d'utiliser de nouvelles méthodes de calcul afin de réaliser un couplage des équations du mouvement d'une couche atomique à l'autre du système semi infini. Ces méthodes permettent, soit de résoudre des systèmes infinis d'équations, soit de limiter dans une approximation valable le nombre d'équations au niveau du défaut [10,11].

I.2.1.1. La méthode de diagonalisation directe :

En 1965, Clark l'a introduit dans sa formulation générale, qui a été appliquée pour la première fois aux systèmes physiques par Allen et al [12,13]. Il s'intéresse particulièrement aux modes surfaciques des réseaux cubiques à faces centrées et aux effets induits par les couches absorbantes [14]. Au cours des 20 dernières années, cette approche est apparue comme pratique et puissante dans l'étude de la dynamique vibratoire et magnétique des surfaces planes et des surfaces adjacentes.

Le principe de la méthode consiste à réduire le système étudié à un nombre fini de plans atomiques dans une direction, avec une extension infinie dans les deux autres directions cartésiennes x et y . De plus, le nombre de plans utilisés pour la modélisation doit être suffisamment grande pour garantir l'existence de régions dites volumétriques. Ensuite, il ne reste plus qu'à écrire les équations de mouvement des atomes appartenant à la cellule unitaire pour en déduire la matrice dynamique. Sa résolution numérique détermine ses vecteurs et ses valeurs propres. Cela permet de remonter aux propriétés de la surface en accédant à la courbe de dispersion, à la densité spectrale et à la densité d'états, aux vecteurs de déplacement et autres grandeurs physiques. Cependant, l'inconvénient de cette approche est l'utilisation de matrices de grande taille, ce qui augmente le temps de calcul lors des simulations numériques [15].

I.2.1.2. La méthode des fonctions de Green

On appelle fonctions de Green en physique les solutions élémentaires d'équations aux dérivées partielles linéaires à coefficients constants. Il a été introduit en 1850 par George Green [16]. C'est un outil mathématique qui a permis de un grand pas en avant à la physique dans l'étude de la dynamique des systèmes perturbés. Il a été appliqué pour la première fois à la physique du solide par Slater [17]. Ces dernières années, cette approche a été plus utilisée

pour étudier la dynamique des systèmes réels, mais avec quelques variations dans la forme mathématique [18-21].

Le principe de la méthode consiste à créer un réseau semi-infini à partir d'un réseau infini en éliminant les interactions entre atomes situés de part et d'autre du plan bissecteur de deux plans atomiques consécutifs. L'effet de cette modification sur la dynamique vibrationnelle des atomes qui composent le système s'explique par une perturbation qui transforme la matrice dynamique D d'un système magnétique infini en une matrice D_p tel que:

$$D_p = D + P \quad (1.9)$$

P représente la matrice de perturbation composée d'une sous matrice non nulle dont l'ordre fini dépend du nombre de plans affectés par la perturbation.

Soit $G(\omega^2)$ la matrice des fonctions de *Green* définie par :

$$G(\omega^2) = [\omega^2 I - D]^{-1} \quad (1.10)$$

Son équivalent pour le système perturbé peut s'écrire :

$$G_p(\omega^2) = [\omega^2 I - D_p]^{-1}$$

$$G_p(\omega^2) = [\omega^2 I - (D + P)]^{-1}$$

$$\Rightarrow G_p(\omega^2) = [(\omega^2 I - D) \left(I - \frac{P}{(\omega^2 I - D)} \right)]^{-1}$$

$$\Rightarrow G_p(\omega^2) = [(\omega^2 I - D) \{ I - G(\omega^2) P \}]^{-1}$$

D'où la relation matricielle :

$$G_p(\omega^2) = [I - G(\omega^2) P]^{-1} G(\omega^2) \quad (1.11)$$

L'ensemble des états vibrationnels du système perturbé sont alors donnés par les pôles de la fonction $G_p(\omega^2)$ [22-24]. Ils permettent, en général, d'interpréter les changements causés par le défaut sur les spectres de vibration pour les phonons. Le calcul détaillé de la matrice est montré à la référence [25].

I. 2. 1.3. La méthode de raccordement

Cette méthode a été introduite pour la première fois par Feuchtwang lorsqu'il a étudié l'équilibre structural statique d'un réseau tridimensionnel semi-infini [26]. Elle a été discutée par Khater et Szeftel en 1987 dans deux articles ; le premier sur le développement de la forme mathématique utilisée, et le second sur l'application aux surfaces Ni(100) et Ni(100)+C(2x2) [27,28]. Depuis, la méthode de raccordement a contribué à l'étude de la dynamique vibrationnelle de plusieurs systèmes physiques par plusieurs auteurs [29-36].

1) Principe de la méthode

La méthode de raccordement a été introduite afin de dériver une méthode analytique pour déterminer les grandeurs physiques qui caractérisent les systèmes désordonnés. L'application de cette méthode à l'étude des ondes élastiques dans les systèmes réside dans la description du mouvement vibrationnel des atomes par un nombre fini d'équations [37]. Son application nécessite la division de l'espace d'un solide (système) en trois régions (voir Fig. 1.1) :

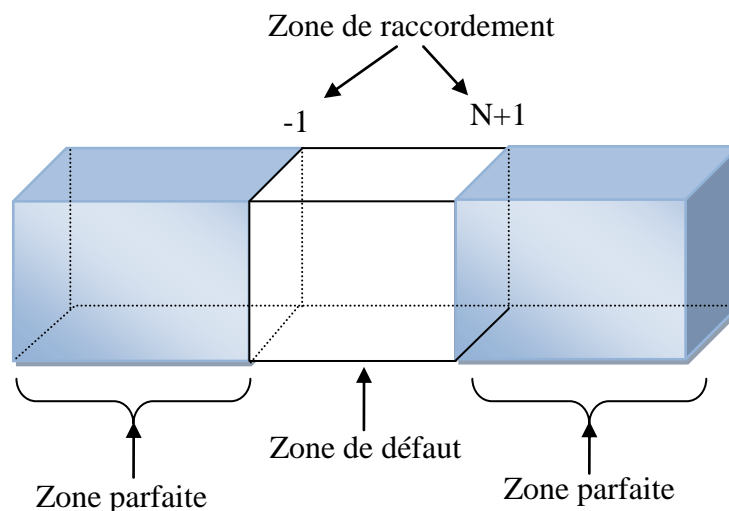


Figure I.1: Représentation schématique d'un solide perturbé de basse dimensionnalité.

- **Zone parfaite** : c'est la région où on retrouve le volume ; les atomes ne sont pas influencés par la présence du défaut, elle est caractérisée par une périodicité tridimensionnelle, et c'est elle qui permet de tracer les courbes de dispersion en volume.
- **Zone de défaut (ou la zone perturbée)** : c'est la région qui renferme toutes sortes de nanostructures et de défauts, elle est en général affectée par la relaxation et la

reconstruction des plans atomiques, la périodicité est perturbée dans cette zone, ce qui conduit à des propriétés différentes de celles du volume.

- **Zone de raccordement** : c'est la limite entre les régions parfaites et les atomes de la zone de défaut. Elle permet de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut avec les états de vibrations évanescents de la zone parfaite.

Compte tenu de la brisure de symétrie dans la direction perpendiculaire au défaut (Fig1.1), la relation pour les déplacements dans la direction cartésienne α , entre d'une part un atome l' appartenant à un plan p' et d'autre part un atome l appartenant à un plan p tous deux parallèles au plan du défaut mais se trouve dans la région du volume, vérifiant la relation suivante :

$$u_{\alpha}(l', p', \omega) = u_{\alpha}(l, p, \omega) \cdot Z^{(p'-p)} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}(l, l')) \quad (1.12)$$

Où Z est un facteur de phase inconnu, évalué dans la direction normale à l'interface métallique, tel que $|Z| \leq 1$, \vec{q} étant un vecteur d'onde dans la première zone de Brillouin, et α caractérise une des trois directions cartésiennes x , y et z .

En insérant (1.12) dans les équations de mouvements (1.5), on obtient un système d'équations pour les déplacements $|u\rangle = |u_{\alpha}(l, \omega)\rangle$ des sites atomiques d'une maille élémentaire dans le volume, qui peut s'écrire analytiquement comme suit :

$$\omega^2 M_l u_{\alpha}(l, \omega) + \sum_{\ell \neq l'} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha} \cdot r_{\beta}}{r^2} \right) K(l, l') u_{\beta}(l, \omega) [Z^{(p'-p)} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}(l, l')) - 1] \quad (1.13)$$

Ou sous la forme matricielle suivante :

$$[\omega^2 I - D(\vec{q}, Z)] = |0\rangle \quad (1.14)$$

La condition de compatibilité de ce système matricielle donne accès pour chaque couple (\vec{q}, ω) à une équation polynômiale en Z dont les solutions physiques caractérisent les différents modes vibrationnels en volume suivant la direction normale au plan du défaut. Les solutions pour lesquelles $|Z| = 1$, sont des modes itinérants, tandis que celles qui vérifient la condition $|Z| < 1$, correspondent à des modes qui s'atténuent dans le système modèle et qui ne peuvent pas le traverser: ce sont des modes évanescents.

La détermination des états de phonons localisés au voisinage des défauts, solides semi-infinis, commence dans un premier temps par le calcul de ces modes évanescents dans tout le domaine (\vec{q}, ω) . Ensuite, nous déterminons l'équation du mouvement vibrationnel (1.15) des atomes appartenant aux positions représentatives du défaut. Cela conduit naturellement au système matriciel rectangulaire d ayant un nombre d'équations inférieur au nombre de déplacements atomiques inconnus, dont nous ne pouvons pas déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres. La résolution d'un tel système d'équations nécessite une méthode appropriée pour obtenir un système homogène d'équations solubles. Pour cela, nous décrivons les déplacements atomiques pour chaque donnée (\vec{q}, ω) , par des ondes évanescents représentées comme des combinaisons linéaires de n modes vibrationnels, résultant d'études volumiques selon la direction perpendiculaire au défaut. Ces n modes correspondent aux n racines Z satisfaisant la condition $|Z| < 1$. L'état d'un tel raccordement pourra se faire à l'aide de la relation suivante :

$$u_\alpha(l, \omega) = \sum_{\nu=1}^n u(\alpha, \nu) Z_\nu^{p'-p} R_\nu \quad (1.15)$$

Avec :

- p est la troisième coordonnée de l'atome l considéré.
- α parcourt les trois directions cartésiennes x, y et z .
- n est le nombre de modes propageant et évanescents, déterminés par la résolution de la relation explicitant la matrice dynamique (1.14).
- R_ν est un vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent ν dans la base $\{R\}$.
- Z_ν est le facteur de phase correspondant au mode évanescent ν de la matrice dynamique dans le volume.
- $u(\alpha, \nu)$ représente les déplacements atomiques des sites appartenant aux deux demi-espaces parfaits, associés à la contribution du $\nu^{\text{ème}}$ mode évanescent suivant la direction cartésienne α .

La détermination simultanée des facteurs de phases Z_ν caractérisant les modes évanescents et les modes propageant, ainsi que des vecteurs propres correspondants, tous deux issus de l'étude dynamique en volume, loin du défaut, nous permet alors de définir la matrice de raccordement qu'on notera par D_r à l'aide des développements (1.13). Le produit des deux matrices D et D_r ainsi définies, nous conduit à une matrice carrée D_s caractérisant un système d'équations homogènes pour lequel des solutions non triviales conduit à :

$$\det[\omega^2 I - D_S(\vec{q}, Z)] = 0 \quad (1.16)$$

Et donc aboutir à la détermination des modes vibrationnels localisés au voisinage du défaut considéré. Ainsi, il est alors possible de déterminer les courbes de dispersion, les densités spectrales et les densités d'états associées aux différents modes localisés au voisinage de ce défaut.

I.3. Calcul des densités d'états vibrationnelles

Plusieurs propriétés physiques intéressantes issues d'excitations élastiques ou magnétiques sont obtenues en calculant la densité d'états $N(\Omega)$ [38], définie de manière générale telle que la quantité $N(\Omega) d\Omega$ est le nombre entre les états d'énergie Ω et $(\Omega + d\Omega)$. Dans la limite thermodynamique, $N(\Omega)$ est considérée comme une fonction continue qui permet de calculer toutes les grandeurs thermodynamiques à partir de la fonction de partition dans l'approximation harmonique de la dynamique du réseau. La principale grandeur d'intérêt à cet égard est la contribution des vibrations à l'énergie libre de Helmholtz, donnée par la définition standard $F = U - TS$, où U est l'énergie interne du système considéré, S est son entropie et T est sa température absolue [39].

Nous pouvons calculer la densité vibrationnelle des états proches d'une surface métallique donnée en utilisant une forme basée essentiellement sur la fonction de Green et la méthode de jonction [40]. Pour ce faire, il faut d'abord calculer la densité spectrale. La manière la plus simple d'obtenir ce dernier est d'introduire l'opérateur de Green, qui peut être représenté de manière très compacte par la méthode de concaténation [41], sous la forme :

$$G(\Omega^2 + i\varepsilon, \varphi_x, \varphi_y, Z, r) = [(\Omega^2 + i\varepsilon)I - D_S(\varphi_x, \varphi_y, Z, r)]^{-1} \quad (1.17)$$

La matrice des densités spectrales, pour un vecteur d'onde parallèle à la direction de l'interface atomique est alors donnée par la relation suivante :

$$\rho_{(\alpha, \beta)}^{(p, p')}(\Omega, \varphi_x, \varphi_y) = 2\Omega \sum_m L_{\alpha m}^p \cdot L_{\beta m}^{p'*} \cdot \delta(\Omega^2 - \Omega_m^2) \quad (1.18)$$

Où p et p' représentent deux atomes différents, α et β deux différentes directions cartésiennes, et $L_{\alpha m}^p$ la composante α du vecteur amplitude de vibration du vecteur de site p , pour la branche d'énergie Ω_m .

La densité d'états qui correspond à la somme sur φ_x , et φ_y de la trace des matrices de densités spectrales peut alors s'écrire ainsi :

$$\begin{aligned}
 N(\Omega) &= \sum_{\varphi_x, \varphi_y} \sum_{p\alpha} \rho_{(\alpha, \beta)}^{(p, p')}(\Omega, \varphi_x, \varphi_y) \\
 &= -\frac{2\Omega}{\pi} \sum_{\varphi_x, \varphi_y} \sum_{p\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [Im G_{\alpha\alpha}^{pp}(\varphi_x, \varphi_y, \Omega^2 + i\varepsilon)]
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

CHAPITRE II : Dynamique des réseaux

Introduction

Un cristal parfait est constitué par la répétition périodique dans les trois dimensions de l'espace d'un motif atomique ou moléculaire contenu dans une unité de répétition périodique. Les modes de répétition peuvent s'inscrire dans une classification en 7 systèmes cristallins et 14 modes de réseau. La maille élémentaire du cristal est la plus petite entité qui permette d'identifier le mode de réseau.

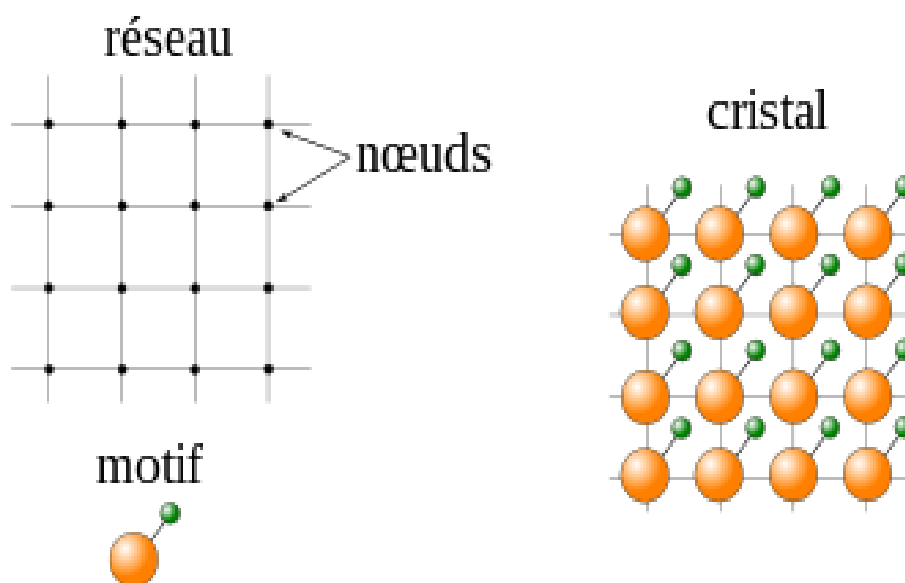


Figure II.1: Représentation schématique d'une structure cristalline

II.2. Types de défauts

Un défaut cristallin est une interruption de la périodicité du cristal. La périodicité d'un cristal représente la répétition régulière des positions atomiques dans les trois directions de l'espace. Les motifs réguliers sont interrompus par des défauts cristallographiques. Ils peuvent être ponctuels, linéaires, planaires ou volumiques (3 dimensions).

II.2.1. Défauts ponctuels

Le cristal parfait est un empilement régulier et infini d'atomes, ions ou molécules. Un défaut ponctuel typique est l'absence d'un atome « lacune », la présence d'un atome du réseau entre les atomes « défaut interstitiel », la présence d'un atome étranger entre les atomes du

réseau « solution solide interstitiel » ou à la place d'un atome du réseau « solution solide de substitution »

a) Les lacunes : Ce défaut correspond à un site atomique inoccupé dans la structure. Elles jouent un rôle fondamental dans la diffusion à l'état solide qui résulte de déplacements d'atomes sur de longues distances notamment à la base des traitements thermiques.

b) Les interstitiels : Ce sont des atomes qui s'insèrent dans les espaces vides du réseau cristallin. Si l'atome en insertion est lui - même un atome du réseau cristallin, on parle d'auto - interstitiel. Les défauts interstitiels jouent un grand rôle dans la constitution des alliages

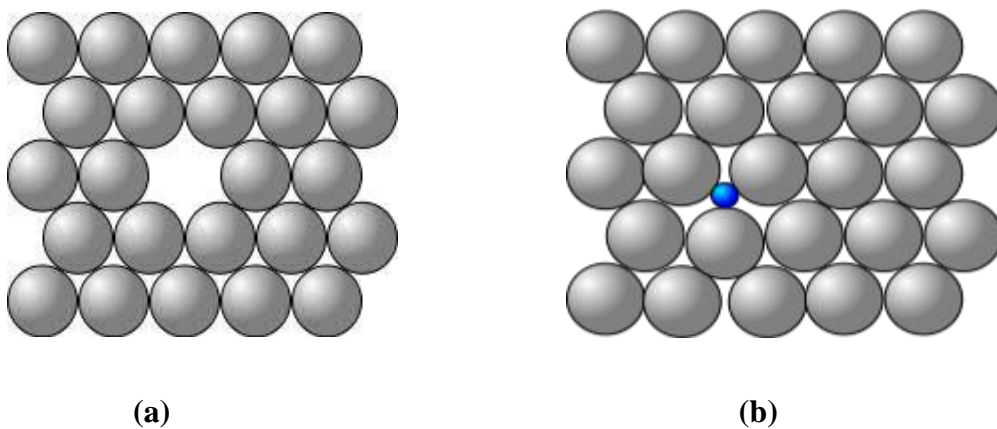


Figure II.2 : Illustration de défauts ponctuels (a) Lacune, (b) interstitiels.

c) Atomes en substitution : C'est un atome étranger qui se place un nœud du réseau cristallin. Ce type de défauts joue également un rôle important dans la constitution des alliages.

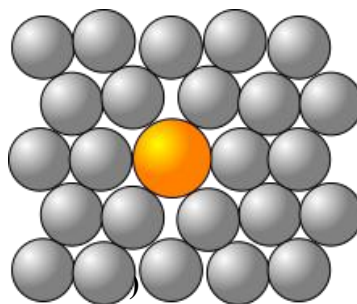


Figure II.3 : Illustration de défauts ponctuels, atome étranger en substitution.

II.2.2. Défauts linéaires

Dislocations : Il existe deux types de dislocations droites les dislocations coin et les dislocations vis. En pratique, les dislocations présentent souvent en proportion donnée, le caractère coin et le caractère vis : on parle alors de dislocations mixtes. Ces dislocations sont courbes (ou gauches) et en chaque point on peut les décomposer en un composant coin et une composante vis

- **Dislocations coin :** Géométriquement, une dislocation coin peut être comprise comme résultant de l'introduction d'un demi plan atomique à l'intérieur d'un cristal parfait. L'emplacement de la dislocation est défini comme la limite de ce demi plan supplémentaire dans le cristal par ailleurs parfait. La déformation est identique à celle créée en introduisant un plan supplémentaire d'atomes à la partie supérieure du cristal. Les atomes du demi - cristal supérieur sont comprimés, les autres sont dilatés.
- **Dislocations vis :** On peut se représenter une dislocation vis en imaginant que l'on fait une entaille dans le cristal et que l'on fait glisser l'un des bords de cette entaille par rapport à l'autre d'une distance interatomique. Une dislocation vis transforme les plans atomiques successifs en une surface hélicoïdale d'où son nom (voir Fig.II,4).

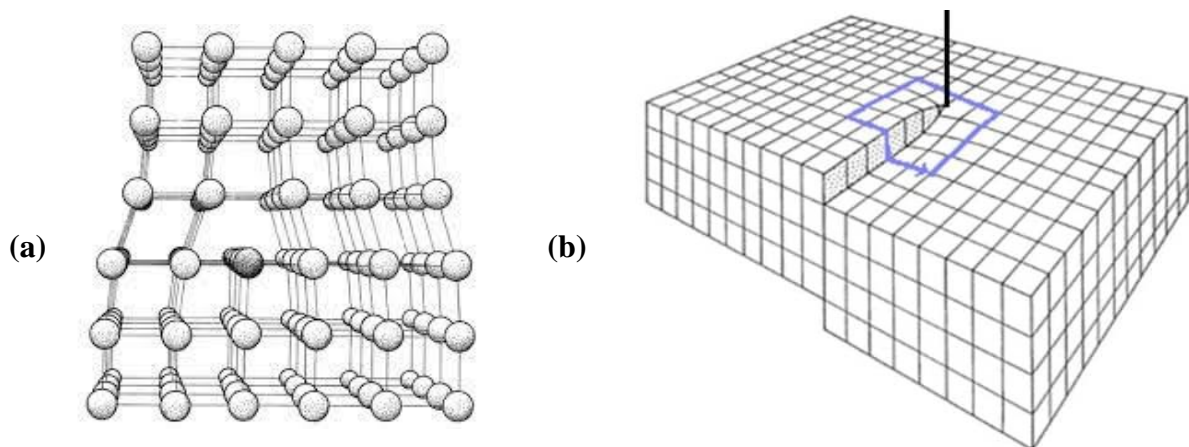


Figure II.4 : Illustration de défauts linéaire (a) Structure d'une dislocation coin et (b) dislocation vis.

II.2.3. Défauts plan (bidimensionnel)

Les défauts plans sont des défauts 3D. Ce ne sont pas des défauts internes au cristal mais le résultat de plusieurs monocristaux accolés les uns aux autres pour former des polycristaux. Les zones de raccordement des deux cristaux d'orientations différentes sont

appelées joints de grains. Les défauts plans peuvent aussi être des défauts d'empilement ou des Macles.

- **Joints de grain** : La matière solide est en général constituée par un assemblage de microcristaux. A la jonction de ces microcristaux se forment des petites cavités dans lesquelles les impuretés se rassemblent habituellement.
- **Macles** : Les macles résultent de l'association de plusieurs monocristaux de même nature qui ont grandi dans des directions différentes au cours de leur croissance. Ce défaut est très visible à l'échelle macroscopique, car il correspond à l'imbrication des monocristaux.

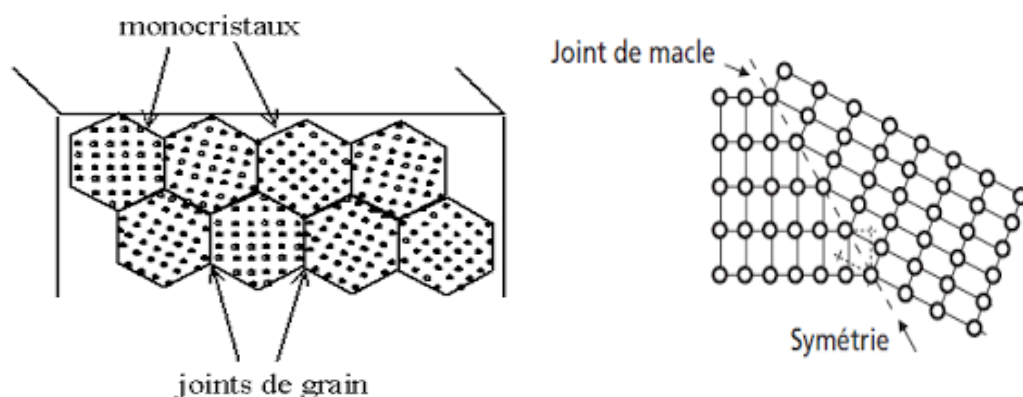


Figure II. 5 : Illustration de défauts plans joints de grains et de Macles.

II.2.4. Les défauts tridimensionnels :

On peut considérer que le remplacement d'une partie du cristal par un volume d'un composé différent est un défaut tridimensionnel. Ce composé «étranger» peut différer du cristal par sa nature chimique et / ou cristallographique et peut être soit un précipité soit une inclusion. Les précipités sont des particules de seconde phase qui sont formés par combinaison entre les atomes du métal et les atomes des éléments d'alliage. Les inclusions correspondent à des impuretés qui proviennent généralement de son élaboration depuis l'état liquide.

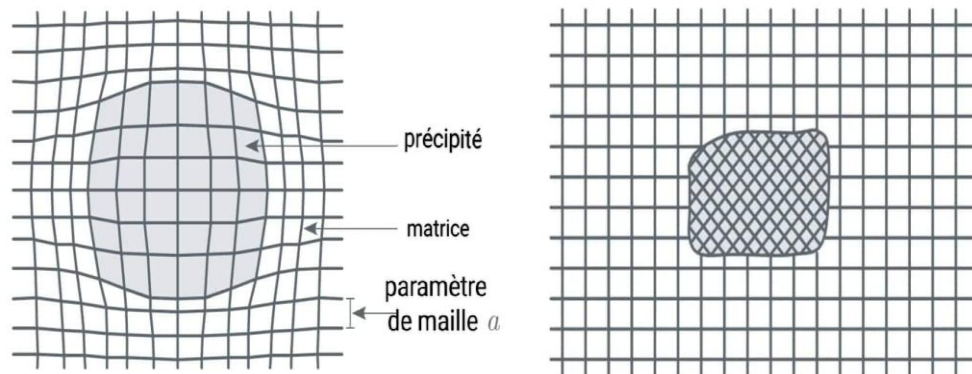


Figure II.6 : Illustration de défauts tridimensionnels.

II.3. Les phonons

Le terme « phonon » fut introduit par Fränkel [42]. En 1932 en associant les travaux de Planck sur le rayonnement thermique puis ceux de Debye. Fränkel a observé une analogie quasi parfaite entre le rayonnement thermique associé aux ondes électromagnétiques et le transport thermique associé à l'onde mécanique. Ainsi par analogie avec un quanta d'énergie de vibration lumineuse appelé photon. On associe le terme phonon à un quanta d'énergie de vibration ionique. Le phonon est une quasi-particule qui est associée à une onde élastique sinusoïdale progressive [43]. Le déplacement des ondes élastique est favorisé en milieu solide cristallin. Lorsqu'un cristal en vibration perd ou gagne de l'énergie, quant à la valeur est proportionnelle à la fréquence de vibration. C'est cette quantité d'énergie qui porte le nom « phonon ».

II.3.1. Les différents types de phonons

Dans un solide réel, il y a plusieurs types de phonons des phonons acoustiques et optiques. les phonons acoustiques correspondant à une oscillation des atomes en phase. Les phonons acoustiques longitudinaux et transverses sont souvent notés de manières abrégées LA et TA. Les phonons optiques correspondant à une oscillation en opposition de phase Les phonons optiques sont présents, généralement, dans les solides qui comportent plusieurs atomes par maille.

2) Les phonons acoustiques

Le son est une onde produite par la vibration mécanique d'un matériau et qui traverse l'air ou l'eau. Ces ondes dites acoustique sont particulièrement facile à utiliser et ajuster ou à

moduler si l'on parle, crie ou chuchote dans une direction ou une autre chaque changement modifiera la longueur, l'amplitude de l'onde et la fréquence de son émis.

3) Les phonons optiques

Ils sont présents dans les matériaux solides qui se composent de plus de deux atomes par maille unitaire. Ils sont appelés optiques du fait que dans les cristaux ioniques, ils sont très facilement excités par des ondes lumineuses (dans le domaine de l'infrarouge). Ils correspondent à des modes de vibration pour lesquels les ions positifs et négatifs situés sur des sites adjacents du réseau se rapprochent et s'éloignent les uns des autres en créant un moment dipolaire électrique oscillant avec le temps.

Les phonons optiques qui interagissent de cette manière avec la lumière sont dits actifs dans l'infrarouge. Les phonons optiques qui sont actifs en Spectrométrie Raman peuvent aussi interagir avec la lumière au travers de la diffusion Raman. Les phonons optiques de type longitudinaux et transverses sont notés, respectivement de façon abrégée LO et TO.

Chapitre III : Dynamique des systèmes parfaits de type CFC

Introduction

Les matériaux à structure cubique à faces centrées font l'objet d'une recherche très intense [44-47]. Cela est dû à leurs grandes gammes d'utilisation. En effet ces matériaux sont à la base de la fabrication de plusieurs composants industriels qui sont utilisés dans différents domaines, vu leur forte conductivité électrique et thermique (Cuivre par exemple), et leur réflectivité, (Silicium par exemple), ainsi que d'autres caractéristiques comme la ductilité et la malléabilité qui les rendent faciles et utiles à manipuler pour les adapter aux différents besoins en mécanique et en électronique, c'est pour cela que les chercheurs s'investissent davantage dans ce domaine. La figure III.1 montre la structure cristalline cubique à faces centrées dans différentes directions [100], [110] et [111]. Notons que la structure étudiée est un système cubique à faces centrées suivant la direction [110] à trois dimensions.

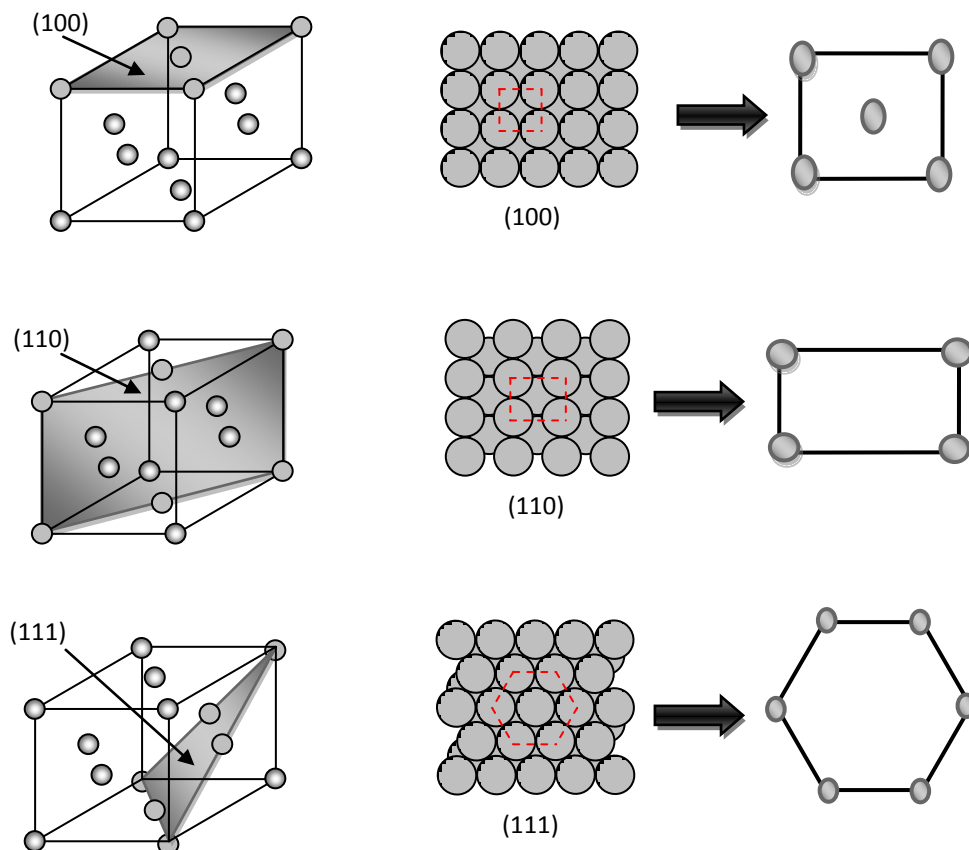


Figure III.1: Les trois structures cubiques à faces centrées dans les directions (100), (110), et (111).

La simulation numérique n'est pas seulement une loi de comportement (dynamique) mais aussi une modélisation des systèmes réels à étudier. Alors dans ce chapitre, on présente le système modèle faisant l'objet de notre étude, puis par la suite on détermine sa matrice dynamique en volume dont les valeurs propres conduisent aux courbes de dispersion en fonction du vecteur d'ondes \vec{q} ou aux facteurs de phase en fonction de la fréquence Ω réduite.

III.2. Dynamique du guide d'onde CFC parfait

Sur la figure III.2 ci-dessous on représente la maille unitaire correspondante à la structure CFC suivant la direction [110]. Cette structure est représentée par deux vecteurs orthogonaux de longueurs $a/\sqrt{2}$ suivant la direction $[1\bar{1}0]$ et a suivant la direction $[001]$.

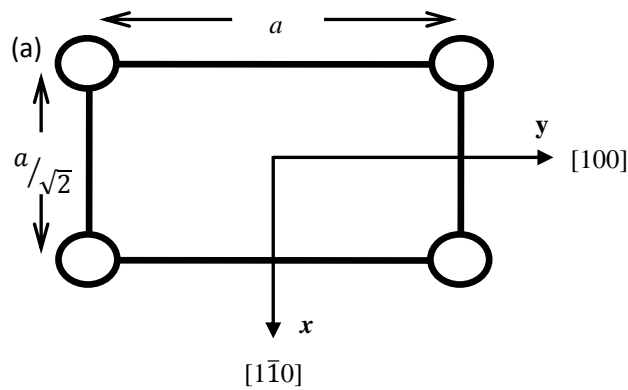


Figure III.2 : Cellule élémentaire d'un CFC suivant (110).

III.2.1. Calcul des limites de la zone de Brillouin d'une structure CFC

Considérons un atome i dans un réseau à trois dimensions semi infini, ses coordonnées sont :

$$\vec{R} = x_i \vec{i} + y_i \vec{j} + z_i \vec{k} \text{ dans la base du réseau direct } (\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}).$$

Soit une maille élémentaire du réseau direct définie par les vecteurs \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , avec :

$$\vec{a} = a_x \vec{i} + a_y \vec{j} + a_z \vec{k},$$

$$\vec{b} = b_x \vec{i} + b_y \vec{j} + b_z \vec{k},$$

$$\vec{c} = c_x \vec{i} + c_y \vec{j} + c_z \vec{k},$$

Le volume de cette maille est donné par: $V = \vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})$.

Cette même maille du réseau réciproque correspondant défini par les vecteurs \vec{A} , \vec{B} , \vec{C} avec :

$$\vec{A} = 2\pi \frac{(\vec{b} \wedge \vec{c})}{V}, \vec{B} = 2\pi \frac{(\vec{c} \wedge \vec{a})}{V}, \vec{C} = 2\pi \frac{(\vec{a} \wedge \vec{b})}{V}.$$

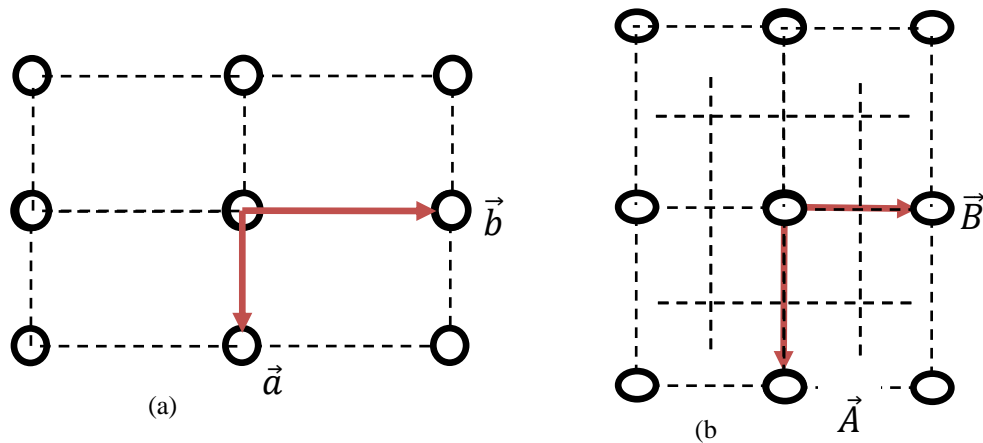


Figure III.3 : Représentation du réseau direct en (a), réseau réciproque en (b) du CFC suivant [110].

➤ **Réseau direct**

La structure du réseau direct du cristal CFC suivant la direction [110] est un rectangle illustré sur la figure III.3 (a), il est représenté par deux vecteurs de base \vec{a} et \vec{b}

Avec : $\vec{a} \begin{pmatrix} a \\ \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\vec{b} \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}$

➤ **Réseau réciproque**

Le réseau réciproque du réseau direct du cristal CFC suivant la direction [110] est représenté sur a figure III.3 (b), il est formé par deux vecteurs de base \vec{A} et \vec{B} .

Avec : $\vec{A} \cdot \vec{a} = 2\pi$ et $\vec{A} \cdot \vec{b} = 0$

$\vec{B} \cdot \vec{a} = 0$

$\vec{B} \cdot \vec{b} = 2\pi$

Après calcul on aura :

$\vec{A} \begin{pmatrix} 2\pi\sqrt{2} \\ a \\ 0 \end{pmatrix}$ et $\vec{B} \begin{pmatrix} 0 \\ 2\pi \\ a \end{pmatrix}$

- Le système modèle

Le système modèle est un cristal monoatomique infini de structure cubique à faces centrées suivant la direction $[110]$. La maille élémentaire de ce dernier est un réseau de paramètre $a/\sqrt{2}$ suivant les deux directions (ox) et (oz) et de paramètre a suivant la direction (oy) . Nous considérons les atomes comme un assemblage de masses ponctuelles m , reliés par des ressorts harmoniques, pour cela, on se place dans une région choisie suffisamment éloignée du défaut pour que les atomes constituant ce domaine aient un environnement du volume, à savoir 12 atomes premiers proches voisins situés à une distance $a/\sqrt{2}$ (a étant la distance interatomique), et 6 seconds proches voisins à une distance a , comme le montre la figure III.4 ci-dessous :

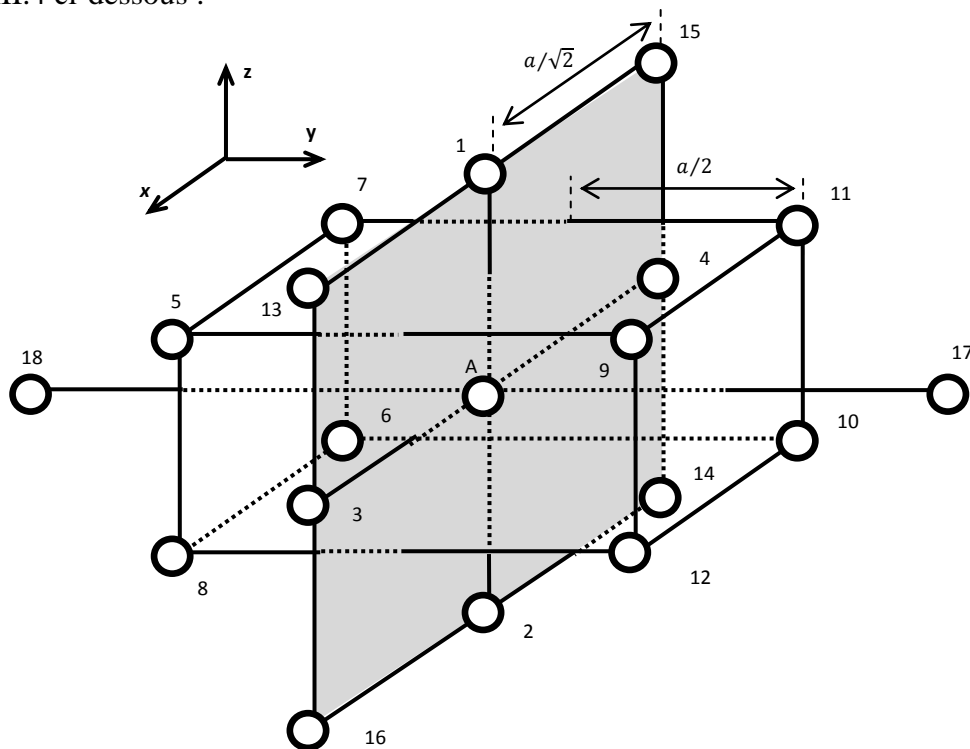


Figure III.4 : Représentation schématique d'une structure cristalline d'un réseau CFC suivant la direction $[110]$ [8].

- Les équations du mouvement

Notre but est de décrire le comportement du réseau hors d'équilibre. Pour cela, si on désigne par \vec{R}_i , la position d'équilibre de l'atome i , et on fait subir à ces atomes un petit déplacement, alors la nouvelle position de l'atome i est la suivante :

$$\vec{R}'_i = \vec{R}_i + \vec{u}_i \quad (3.1)$$

\vec{u}_i est le vecteur déplacement.

Pour étudier le mouvement de ces atomes, on applique la deuxième loi de Newton :

$$m \frac{d^2 \vec{u}}{dt^2} = \sum \vec{F} \quad (3.2) = (1.3)$$

Les formes explicites de l'accélération et de la force sont comme suit :

$$\begin{cases} \vec{F} = -k\vec{x} \\ \vec{y} = -\omega^2 \vec{x} \end{cases} \quad (3.3)$$

Avec : ω est la fréquence propre d'oscillation, k est la constante de force.

Dans le cadre de l'approximation harmonique associée au modèle des forces centrales [48-50], l'équation de mouvement d'un atome occupant le site i prendra la forme :

$$m_i \omega^2 u_\alpha(i) = \sum_{i \neq i'} \sum_\beta \left(\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) K(i, i') [u_\beta(i) - u_\alpha(i')] \quad (3.4) = (1.3)$$

α et β représentent les différentes directions de l'espace x , y et z .

$m(i)$ est la masse de l'atome i .

$u_\alpha(i)$ est le déplacement de l'atome i suivant la direction α .

r_α est la composante du vecteur position relative entre l'atome i et l'atome i' .

r est la distance entre l'atome i et i' .

$k(i, i')$ est la constante de force entre l'atome i et i' .

Considérons un réseau cubique à faces centrées suivant la direction [110] d'atomes identiques, le nombre de premiers proches voisins est de 12 atomes situés à une distance $a/\sqrt{2}$ avec une constante de force k_1 (a étant la distance interatomique), et 6 seconds voisins à une distance a avec une constante de force k_2 .

Si on considère l'atome n représenté sur la figure 3.4, de coordonnées (p, q, s) , la projection de l'équation (3.4) sur les axes, donne :

Sur l'axe (ox)

$$\begin{aligned}
& (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2)u_x(p, q, s) + k_1[u_x(p+2, q, s) + u_x(p-2, q, s)] + k_1/4[u_x(p+1, q+1, s+1) + u_x(p- \\
& 1, q+1, s+1) + u_x(p+1, q-1, s+1) + u_x(p+1, q+1, s-1) + u_x(p-1, q-1, s+1) + u_x(p-1, q+1, s-1) + u_x(p+1, q-1, s- \\
& 1) + u_x(p-1, q-1, s-1)] + k_2/2[u_x(p+2, q, s+2) + u_x(p-2, q, s+2) + u_x(p+2, q, s-2) + u_x(p-2, q, s-2) \\
&] + \frac{\sqrt{2}}{4}k_1[(u_y(p+1, q+1, s+1) - u_y(p-1, q+1, s+1) - u_y(p+1, q-1, s+1) + u_y(p+1, q+1, s-1) + u_y(p-1, q- \\
& 1, s+1) - u_y(p-1, q+1, s-1) - u_y(p+1, q-1, s-1) + u_y(p-1, q-1, s-1)] + k_1/4[u_z(p+1, q+1, s+1) - u_z(p- \\
& 1, q+1, s+1) + u_z(p+1, q-1, s+1) - u_z(p+1, q+1, s-1) - u_z(p-1, q-1, s+1) + u_z(p-1, q+1, s-1) - u_z \\
& (p+1, q-1, s-1) + u_z(p-1, q-1, s-1)] + k_2/2[u_z(p+2, q, s+2) - u_z(p-2, q, s+2) - u_z(p+2, q, s-2) + u_z(p- \\
& 2, q, s-2)] = 0
\end{aligned}$$

Sur l'axe (oy)

$$\begin{aligned}
& (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2) u_y(p, q, s) + k_1/2[u_y(p+1, q+1, s+1) + u_y(p-1, q+1, s+1) + u_y(p+1, q-1, s+1) + \\
& u_y(p+1, q+1, s-1) + u_y(p-1, q-1, s+1) + u_y(p-1, q+1, s-1) + u_y(p+1, q-1, s-1) + u_y(p-1, q-1, s-1)] + k_2 \\
& [u_x(p, q+2, s) + u_x(p, q-2, s)] + \frac{\sqrt{2}}{4}k_1 [(u_x(p+1, q+1, s+1) - u_x(p-1, q+1, s+1) - u_x(p+1, q- \\
& 1, s+1) + u_x(p+1, q+1, s-1) + u_x(p-1, q-1, s+1) - u_x(p-1, q+1, s-1) - u_x(p+1, q-1, s-1) + u_x(p-1, q- \\
& 1, s-1)] + \frac{\sqrt{2}}{4}k_1 [(u_z(p+1, q+1, s+1) + u_z(p-1, q+1, s+1) - \\
& u_z(p+1, q-1, s+1) - u_z(p+1, q+1, s-1) - u_z(p-1, q-1, s+1) - u_z(p-1, q+1, s-1) + u_z(p+1, q-1, s- \\
& 1) + u_z(p-1, q-1, s-1)] = 0
\end{aligned}$$

Sur l'axe (oz)

$$\begin{aligned}
& (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2) u_z(p, q, s) + k_1[u_z(p, q, s+2) + u_z(p, q, s-2)] + k_1/4[u_z(p+1, q+1, s+1) + \\
& u_z(p-1, q+1, s+1) + u_z(p+1, q-1, s+1) + u_z(p+1, q+1, s-1) + u_z(p-1, q-1, s+1) + u_z(p-1, q+1, s-1) + \\
& u_z(p+1, q-1, s-1) + u_z(p-1, q-1, s-1)] + k_2/2 [u_z(p+2, q, s+2) + u_z(p-2, q, s+2) + u_z(p+2, q, s-2) + \\
& u_z(p-2, q, s-2)] + k_1/4 [u_x(p+1, q+1, s+1) - u_x(p-1, q+1, s+1) + u_x(p+1, q-1, s+1) - u_x(p+ \\
& 1, q+1, s-1) - u_x(p-1, q-1, s+1) + u_x(p-1, q+1, s-1) - u_x(p+1, q-1, s-1) + u_x(p-1, q-1, s-1)] \\
& + k_2/2[u_x(p+2, q, s+2) - u_x(p-2, q, s+2) - u_x(p+2, q, s-2) + u_x(p-2, q, s-2)] + \frac{\sqrt{2}}{4}k_1 [(u_y(p+1, q+1, \\
& s+1) + u_y(p-1, q+1, s+1) - u_y(p+1, q-1, s+1) - u_y(p+1, q+1, s-1) - u_y(p-1, q-1, s+1) - \\
& u_y(p-1, q+1, s-1) + u_y(p+1, q-1, s-1) + u_y(p-1, q-1, s-1)] = 0
\end{aligned}$$

La relation de Bloch [51] permet d'écrire :

$$u_\alpha(p \pm 1, q, s) = e^{\pm q_x a} u_\alpha(p, q, s);$$

$$u_\alpha(p, q \pm 1, s) = e^{\pm q_y a} u_\alpha(p, q, s);$$

$$u_\alpha(p, q, s \pm 1) = e^{\pm q_z a} u_\alpha(p, q, s);$$

$$u_\alpha(p \pm 2, q, s) = e^{\pm 2q_x a} u_\alpha(p, q, s);$$

$$u_\alpha(p, q \pm 2, s) = e^{\pm 2q_y a} u_\alpha(p, q, s);$$

$$u_\alpha(p, q, s \pm 2) = e^{\pm 2q_z a} u_\alpha(p, q, s).$$

Avec : $\vec{q} (q_x, q_y, q_z)$ est le vecteur d'onde du réseau réciproque.

On pose

$$e^{\pm q_x a} = e^{\pm \varphi_x} = Z_1^{\pm 1};$$

$$e^{\pm q_y a} = e^{\pm \varphi_y} = Z^{\pm 1};$$

$$e^{\pm q_z a} = e^{\pm \varphi_z} = Z_2^{\pm 1};$$

$$e^{\pm 2q_x a} = e^{\pm 2\varphi_x} = Z_1^{\pm 2};$$

$$e^{\pm 2q_y a} = e^{\pm 2\varphi_y} = Z^{\pm 2};$$

$$e^{\pm 2q_z a} = e^{\pm 2\varphi_z} = Z_2^{\pm 2};$$

$$\text{et } \Omega^2 = \frac{m\omega^2}{k_1} = \frac{\omega^2}{\omega_0^2}.$$

Avec $\omega_0 = \sqrt{\frac{k_1}{m}}$ est la fréquence propre de vibration.

φ_α est le facteur de phase suivant la direction α .

Ω est la fréquence normalisée (réduite), elle est sans dimension.

En remplaçant dans les équations précédentes, on obtient :

$$[\Omega^2 - 4 - 2\lambda + (Z_1^2 + Z_1^{-2}) + \frac{1}{4}(Z_1 + Z_1^{-1})(Z_2 + Z_2^{-1})(Z + Z^{-1})$$

$$+ \frac{1}{2}\lambda(Z_1^2 + Z_1^{-2})(Z_2^2 + Z_2^{-2})]u_x(p, q, s) +$$

$$\frac{\sqrt{2}}{4}(Z_1 - Z_1^{-1})(Z_2 + Z_2^{-1})(Z - Z^{-1})u_y(p, q, s) +$$

(3.5)

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} (Z_1 - Z_1^{-1}) (Z_2 - Z_2^{-1}) (Z + Z^{-1}) + \frac{1}{2} \lambda (Z_1^2 - Z_1^{-2}) (Z_2^2 - Z_2^{-2}) u_z(p, q, s) = 0 \\ & [\Omega^2 - 4 - 2\lambda + \lambda(Z^2 + Z^{-2}) + \frac{1}{2} (Z_1 + Z_1^{-1}) (Z_2 + Z_2^{-1}) (Z + Z^{-1})] u_y(p, q, s) + \\ & \frac{\sqrt{2}}{4} (Z_1 - Z_1^{-1}) (Z_2 + Z_2^{-1}) (Z - Z^{-1}) u_x(p, q, s) + \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\sqrt{2}}{4} (Z_1 + Z_1^{-1}) (Z_2 - Z_2^{-1}) (Z - Z^{-1}) u_z(p, q, s) = 0 \\ & [\Omega^2 - 4 - 2r + (Z_2^2 + Z_2^{-2}) + \frac{1}{4} (Z_1 + Z_1^{-1}) (Z_2 + Z_2^{-1}) (Z + Z^{-1}) \\ & + \frac{1}{2} \lambda (Z_1^2 + Z_1^{-2}) (Z_2^2 + Z_2^{-2})] u_z(p, q, s) + \\ & \frac{1}{4} (Z_1 - Z_1^{-1}) (Z_2 - Z_2^{-1}) (Z + Z^{-1}) + \frac{1}{2} \lambda (Z_1^2 - Z_1^{-2}) (Z_2^2 - Z_2^{-2}) u_x(p, q, s) \\ & \frac{\sqrt{2}}{4} (Z_1 + Z_1^{-1}) (Z_2 - Z_2^{-1}) (Z - Z^{-1}) u_y(p, q, s) = 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\text{Avec } \lambda = \frac{k_2}{k_1}.$$

On peut écrire les équations (3.5), (3.6) et (3.7) sous la forme matricielle suivante :

$$[\Omega^2 I - D(Z, e^{i\varphi_x}, e^{i\varphi_z}, \lambda)] |u\rangle = 0 \quad (3.8)$$

D représente la matrice dynamique en volume de taille (3x3), et I est une matrice identité de même rang que la matrice D .

$$\text{Avec } |u\rangle = \begin{pmatrix} u_x(p, q, s) \\ u_y(p, q, s) \\ u_z(p, q, s) \end{pmatrix} \text{ Et } D(Z_1, Z, Z_2) = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{bmatrix}$$

$D(Z_1, Z, Z_2)$ est appelée matrice dynamique du système CFC.

Avec

$$D_{11} = [\Omega^2 - 4 - 2\lambda + \cos(\varphi_x) \cos(\varphi_z) (Z + Z^{-1}) + 2 \cos(2\varphi_x) (\lambda \cos(2\varphi_z) + 1)];$$

$$D_{22} = [\Omega^2 - 4 - 2\lambda + 2 \cos(\varphi_x) \cos(\varphi_z) (Z + Z^{-1}) + \lambda (Z^2 + Z^{-2})];$$

$$D_{33} = [\Omega^2 - 4 - 2\lambda + \cos(\varphi_x) \cos(\varphi_z) (Z + Z^{-1}) + 2 \cos(2\varphi_z) ((\lambda \cos(2\varphi_x) + 1))];$$

$$D_{12} = D_{21} = [\sqrt{2}i(Z-Z^{-1})\sin(\varphi_x)\cos(\varphi_z)];$$

$$D_{13} = D_{31} = [-(Z+Z^{-1})\sin(\varphi_x)\sin(\varphi_z) + 2\lambda \sin(2\varphi_z) \sin(2\varphi_x)];$$

$$D_{32} = D_{23} = [\sqrt{2}i(Z-Z^{-1})\sin(\varphi_z)\cos(\varphi_x)].$$

Z est le facteur de phase générique pour l'interface, satisfaisant la condition d'évanescence suivant la direction cartésienne y . Les facteurs de phases suivant les directions x et z sont définis par $\varphi_x = \left(\frac{a}{\sqrt{2}}\right)q_x$ et $\varphi_z = \left(\frac{a}{\sqrt{2}}\right)q_z$, q_x et q_z étant les composantes suivant x et z du vecteur d'onde du réseau réciproque.

Le système des trois équations précédentes n'admet de solution que si le déterminant :

$$\text{Det} [\Omega^2 I - D(e^{i\varphi_x}, Z, e^{i\varphi_z}, \lambda)] = 0 \quad (3.9)$$

III.3. Propriétés vibrationnelles en volume

a) Courbe de dispersion

La figure (III.5) représente les courbes de dispersions suivant les directions de hautes symétries

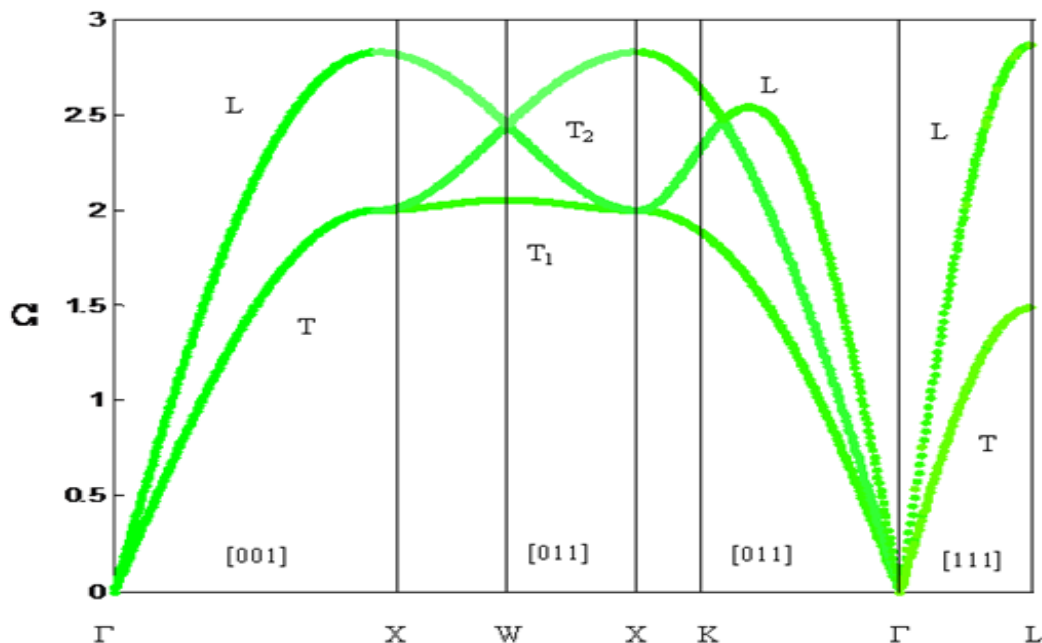


Figure III.5 : Courbe de dispersion des phonons en volume d'un cristal cubique à faces centrées suivant les directions de hautes symétries [8].

III.3.1. Interprétation des résultats

Sur la figure ci-dessus, nous avons présenté la dispersion au niveau d'un guide d'onde parfait dans une structure cubique à face centrées, la loi de dispersion a deux branches de Γ vers X : une branche transversale, notée T , où les vibrations se propagent perpendiculairement au mouvement des atomes, et une branche longitudinale, notée L , où les directions de propagation sont que les vibrations et les mouvements des atomes sont colinéaires. Dans ces directions, la loi est la même que Γ vers L . Au point X , on remarque que le mode acoustique transverse dégénère pour produire deux nouveaux modes. Le long de la direction X vers W , on remarque qu'il y a trois branches dont deux sont transversales et l'autre longitudinale, avec le même comportement dans les deux sens de W vers X et de X vers K . Cependant, il existe trois branches acoustiques dans l'intervalle $[K\Gamma]$, une longitudinale qu'on note L et les deux autres transversales que nous notons $T1$ et $T2$. L'ensemble des vibrations est décrit comme le vecteur d'onde de la première zone de Brillouin, donc il y a N modes propres par branche, ou N est le nombre d'atome formant le cristal CFC.

III.3.2. Calcul des facteurs de phase

Pour décrire le phénomène des phonons localisés dans les systèmes contenant des interfaces, en plus des modes de propagation définis dans les guides d'onde parfaits, il faut aussi calculer les modes évanescent du système ($Z < 1$), puisqu'il y a des défauts dans le système, constante de couplage fréquence Ω divers modes sous ; par conséquent, il doit être utilisé comme argument. Pour chaque fréquence Ω donnée, il faut considérer toutes les solutions $Z \leq 1$. Pour les deux méthodes de calcul, la solution peut être obtenue en utilisant la méthode des déterminants et la méthode d'augmentation de cardinalité. Dans ce travail, nous utilisons la première méthode.

- **Méthode du déterminant**

La méthode consiste à déterminer les racines caractéristiques du système d'équations linéaires (3.9), pour lequel une solution non triviale requiert que son déterminant soit nul. Il peut alors s'exprimer par le polynôme caractéristique de degré 8 en Z suivant :

$$A_0 + A_1Z + A_2Z^2 + A_3Z^3 + A_4Z^4 + A_5Z^5 + A_6Z^6 + A_7Z^7 + A_8Z^8 = 0 \quad (3.10)$$

Où les coefficients A_n sont des fonctions de Ω , φ_x , φ_z et λ . En outre, la symétrie de notre modèle en volume permet de constater que si Z est solution de l'équation (3.9), le facteur de phase Z^{-1} l'est aussi.

Afin de satisfaire la condition d'évanescence qui est, $Z < 1$, on ne doit prendre que les 4 valeurs physiquement acceptable pour Z parmi les racines de l'équation (3.10). Le champ d'évanescence est alors rigoureusement déterminé en volume pour le système considéré, puisque ces solutions constituent dans l'espace $\{\Omega, \varphi_x, \varphi_z\}$ la base des modes évanescents.

Nous représentons sur la figure (III.6) l'évolution du module des facteurs de phase en fonction de la fréquence Ω .

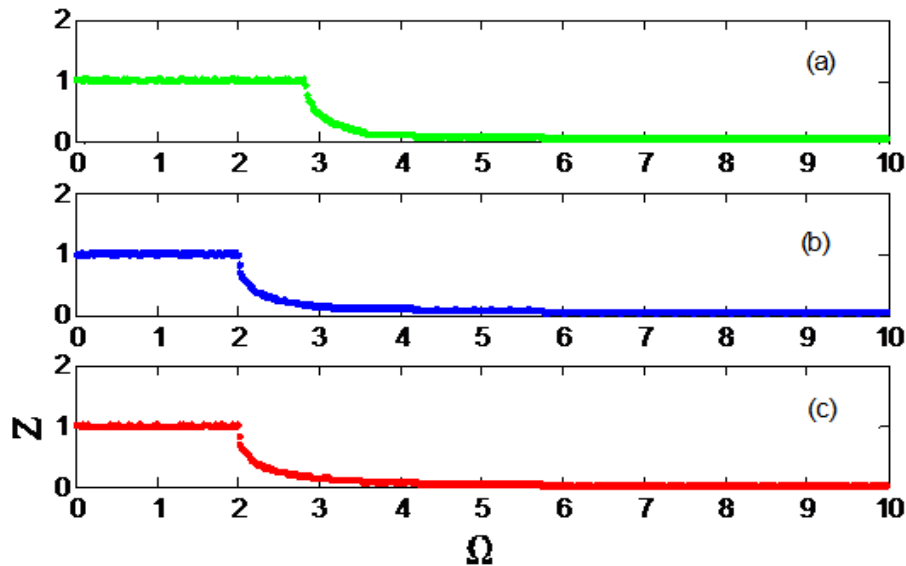


Figure III.6 : La représentation des facteurs de phase. [8].

- **Discussion des résultats**

Sur les figures (III.6.a), (III.6.b) et (III.6.c), on remarque que les plages de propagations et les plages d'évanescence sont différentes.

La figure (III.6.a) : le mode est propageant sur l'intervalle $\Omega \in [0, 2.81]$ et quand $\Omega > 2.81$ le mode devient évanescent.

La figure (III.6.b) et (III.6.c) : le mode est propageant sur l'intervalle $\Omega \in [0, 2]$ et le mode devient évanescent partout ailleurs.

Physiquement ceci signifie que plus la fréquence excitatrice est importante, plus l'atténuation des modes évanescents est grande.

On remarque l'existence d'une bonne complémentarité entre les états évanescents et les modes propageant constituant la bande permise du système étudié. Ainsi, on peut distinguer facilement les bandes de fréquences évanescentes ($|Z| < 1$) et propageantes ($|Z| = 1$) pour toute les fréquences Ω données.

Chapitre IV : Propriétés vibrationnelles d'une interface entre deux systèmes CFC

Introduction

L'interface entre deux cristaux différents présente un intérêt technologique bien connu : c'est le cas des jonctions métaux/semi-conducteur (diodes) et des hétérojonctions (jonction entre deux semi-conducteurs différents).

Les interfaces entre deux matériaux différents sont obtenues par la technique d'épitaxie par jet moléculaires (MBE). Les structures vibrationnelles spécifiques d'une interface peuvent jouer un rôle important dans plusieurs propriétés physiques. L'étude des propriétés d'interfaces est un domaine de recherche en plein développement. Le but est de comprendre le comportement des phonons dans une structure CFC, le long de la direction de haute symétrie [110] en présence d'une interface métallique, nous avons calculé et représenté les états localisés et les densités d'états vibrationnelles locales (LDOS) de la zone perturbée.

IV.1. Dynamique vibrationnelle de l'interface

IV.1.1. Description du modèle perturbé

Le système modèle que nous avons choisi est représenté sur la figure (IV. 1), ce cristal est obtenu par la juxtaposition de deux systèmes semi-infinis A et B à structure cubique à faces centrées suivant la direction [110]. Ce système peut être divisé en trois régions :

Région A : représente la région parfaite, de paramètre de maille $a/\sqrt{2}$ suivant l'axe (ox) et (oz) et de paramètre a suivant l'axe (oy), d'atomes de masse m_1 et de constantes de force k_1 entre premiers proches voisins, et k'_1 entre seconds proches voisins.

Région B : représente la région parfaite, de paramètre de maille $a/\sqrt{2}$ suivant l'axe (ox) et (oz) et de paramètre a suivant l'axe (oy), d'atomes de masse m_2 et de constantes de force k_2 entre premiers proches voisins, et k'_2 entre second proches voisins.

Région couplant A et B : qui est la zone perturbée, et le joint atomique entre les deux régions semi-infinis, avec k_{11} et k_{12} comme constante de force entre l'atome m_1 et m_2 , premiers et seconds voisins

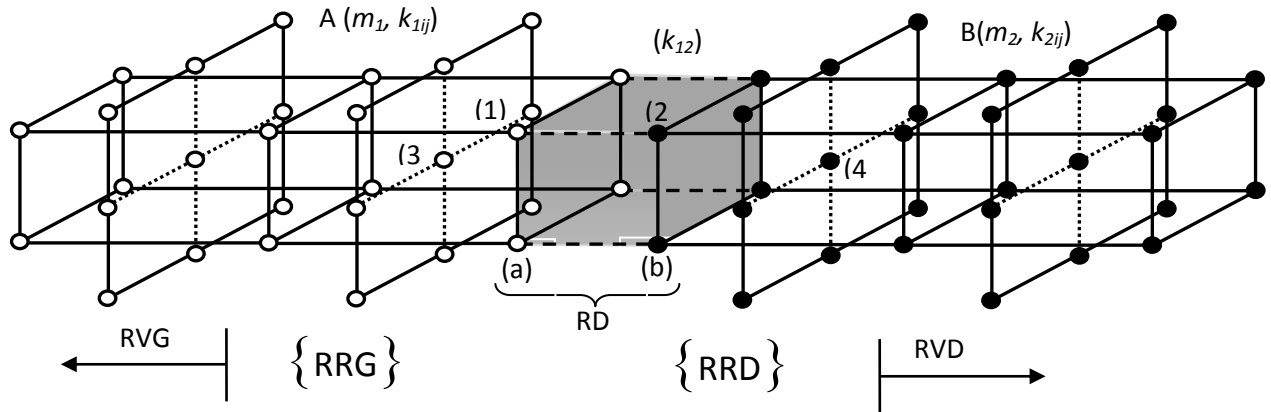


Figure. IV.1. Représentation schématique d'une interface séparant deux systèmes de type CFC suivant la direction [110], de type A/B [8].

IV.1.2. Matrice dynamique du système perturbé

La matrice dynamique D du système trouve son origine dans l'écriture des équations du mouvement des atomes que nous avons numéroté de 1 à 4. Ces atomes sont choisis de sorte que la région qui les contient, comprenne aussi bien des atomes appartenant à la région du défaut (l'interface), ainsi que ceux qui appartiennent à la région de raccordement présentant un environnement de la région du volume.

L'ensemble de ces équations du mouvement constituent un système linéaire homogène qu'on peut mettre sous forme d'une matrice rectangulaire D . La taille de cette matrice dépend du nombre d'atomes de la zone perturbée, sachant bien qu'il y a trois degrés de liberté par site.

$$\text{Avec } \dim(D) = (m \times n) \quad (4.1)$$

m = le nombre d'atomes dans la zone du défaut (interface) plus ceux de raccordement multipliés par trois degrés de liberté $((2 + 2) \times 3 = 12)$.

n = m + le nombre d'atomes qui sont reliés directement aux atomes de raccordement multipliés par trois degrés de liberté $(12 + 4 \times 3 = 24)$. \times est le produit matriciel.

$$[D].|u\rangle = |0\rangle$$

$$\text{Avec : } \dim[D] = 12 \times 24,$$

$$\dim|u\rangle = 24 \times 1,$$

$$\dim|0\rangle = 12 \times 1.$$

Le $|u\rangle$ constitue un vecteur colonne décrivant les déplacements vibrationnels de tous les atomes d'une maille élémentaire de la zone considérée.

IV.1.3. Matrice de raccordement

Le but de cette matrice est d'établir les relations qui permettent de raccorder les déplacements atomiques des sites qui appartiennent à la zone de raccordement aux champs vibrationnels des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits ; nous allons représenter les déplacements atomiques des sites appartenant à la région de raccordement par une combinaison linéaire des vecteurs $\{R_1, R_2\}$ définissant un espace fini dans l'espace des phases. La connaissance des facteurs de phase $[Z, 1/Z]$, caractérisant les modes évanescents dus à la présence de l'interface, et déterminés à partir de l'étude précédente en volume, nous permet de faire cet état de raccordement.

Dans ce travail, il y a deux régions de raccordement, une région située à droite et une autre à gauche, nous devons pour cela définir deux bases distinctes $\{R_1\}$ et $\{R_2\}$, la première est utilisée pour l'étude du mouvement des atomes qui se trouvent à gauche de l'interface, et la deuxième est utilisée pour l'étude du mouvement des atomes se trouvant à droite du défaut. La dimension des vecteurs $\{R_1\}$ et $\{R_2\}$ est de trois.

Pour un atome appartenant à la région de raccordement à droite, on peut décrire ses déplacements vibrationnels à l'aide de la relation suivante :

$$u'_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_j^{i=3} Z_j^{-n_z} A'(\alpha, j) R_{1j} \quad (4.2)$$

Pour un atome appartenant à la région de raccordement à gauche, ses déplacements vibrationnels sont caractérisés à l'aide de la relation suivante :

$$(n_x, n_y, n_z) = \sum_i^{i=3} Z_i^{-n_z} A(\alpha, i) R_{2i} \quad (4.3)$$

α représente les trois directions cartésiennes (ox), (oy) et (oz). A et A' sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des cofacteurs de la matrice dynamique en volume D définie auparavant.

R_{1j} est le vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent j dans la base $\{R_1\}$ de l'espace des phases. R_{2i} est le vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent i dans la base $\{R_2\}$ de l'espace des phases.

Le vecteur $|u\rangle$, décrivant les déplacements vibrationnels de tous les atomes d'une maille élémentaire de la zone considérée, peut se décomposer en deux parties : la première est notée par $|irr\rangle$, elle est constituée par les déplacements atomiques des deux sites irréductibles formant la région de l'interface se sont les atomes (1) et (2) représentés sur la figure (IV. 1). Quand à la seconde notée par $|rac\rangle$, elle est composée des déplacements des deux zones de raccordement (gauche et droite).

On peut alors écrire :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

- $\text{Dim}|irr\rangle$ = nombre d'atomes de l'interface fois trois degrés de liberté par chaque atome.
- $\text{Dim}|rac\rangle$ = nombre d'atomes de raccordement fois trois degrés de liberté par chaque atome.

On peut écrire la matrice de raccordement des atomes à l'aide de l'expression suivante :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R_1\rangle \\ |R_2\rangle \end{pmatrix} = R_c \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R_1\rangle \\ |R_2\rangle \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

Où I_d est une matrice identité, sa taille dépend du nombre d'atomes des sites irréductibles multipliés par trois degrés de liberté par site (6×6).

R_1, R_2, R_3 et R_4 sont des sous matrices, elles dépendent du nombre de modes propageant du système parfait, leurs dimensions sont (3×3).

La matrice D_r de dimension (24×12) est appelée matrice de raccordement.

Le produit de la matrice D par la matrice D_r donne lieu à une matrice carrée D_s (12 × 12).

$$[D(12 \times 24)] \cdot [D_r(24 \times 12)] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R_1\rangle \\ |R_2\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (4.6)$$

Et encore ;

$$[D_s(12 \times 12)] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R_1\rangle \\ |R_2\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (4.7)$$

Les états vibrationnels induits par l'existence de l'interface sont déterminés à l'aide de la relation de compatibilité suivante :

$$\det[D_s(12 \times 12)] = 0 \quad (4.8)$$

IV.2. Résultats et discussions

IV.2.1. Les états localisés

a) Cas de durcissement

Sur les figure ci-dessous, nous avons représenté les états localisés au niveau d'une interface séparant deux systèmes semi-infinis à structures cubique à faces centrées, suivant la direction [110], les résultats sont effectués dans le cas de durcissement des contraintes élastiques, en variant le rapport des mass $e=m_1/m_2$

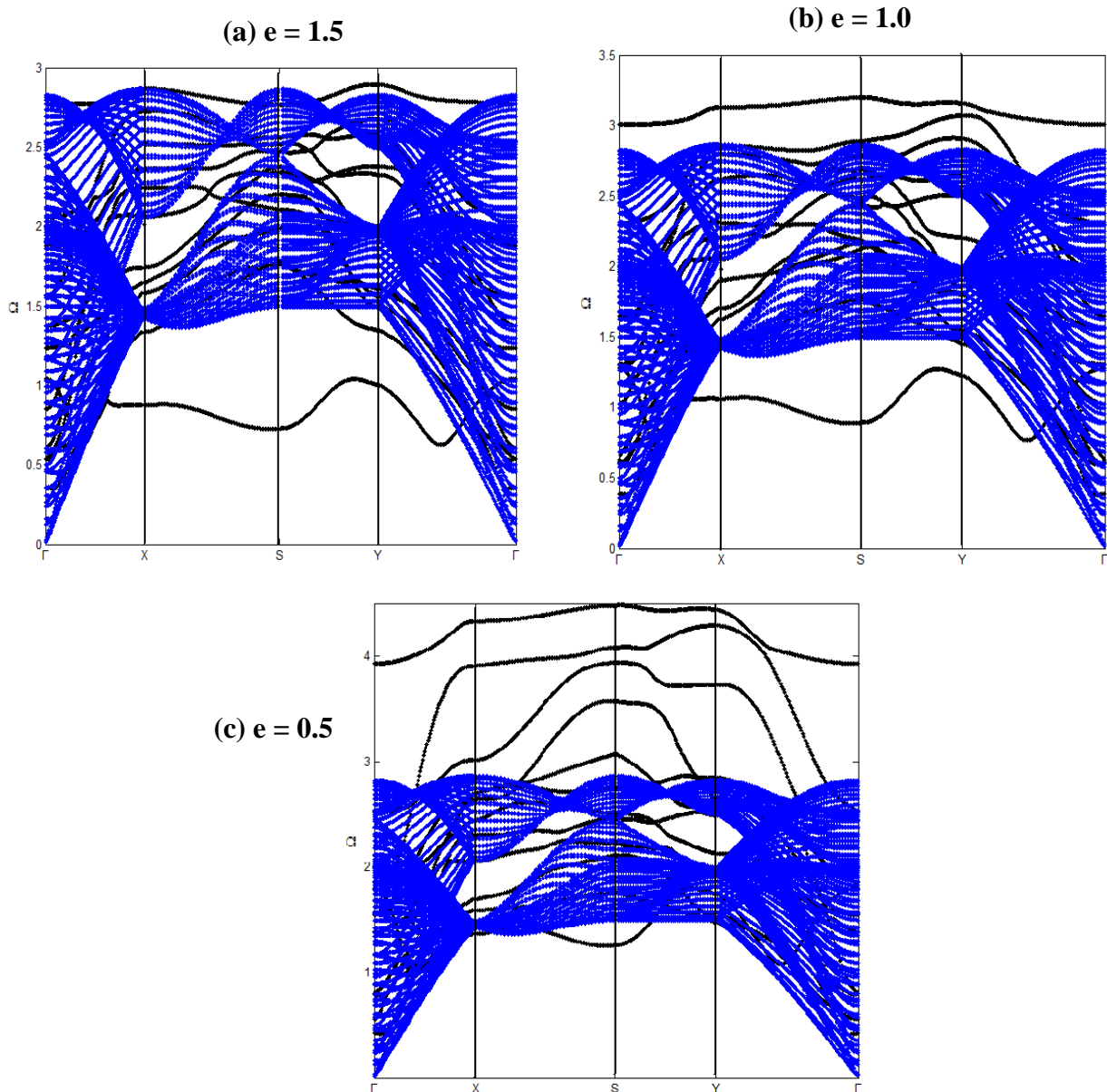


Figure IV.2 : Les états localisés au niveau d'une interface du type A/B dans une structure CFC suivant [110] dans le cas de durcissement. (a) le cas d'une masse lourde, (b) une masse homogène et (c) le cas d'une masse légère.

b) Cas d'homogénéité

Nous avons représenté sur les figure ci-dessous, les états localisés au niveau d'une interface séparant deux systèmes semi-infinis à structures cubique à faces centrées, suivant la direction [110], les résultats sont effectués dans le cas d'homogénéité $r = 1$, en faisant varier le rapport des masses $e = m_1/m_2$

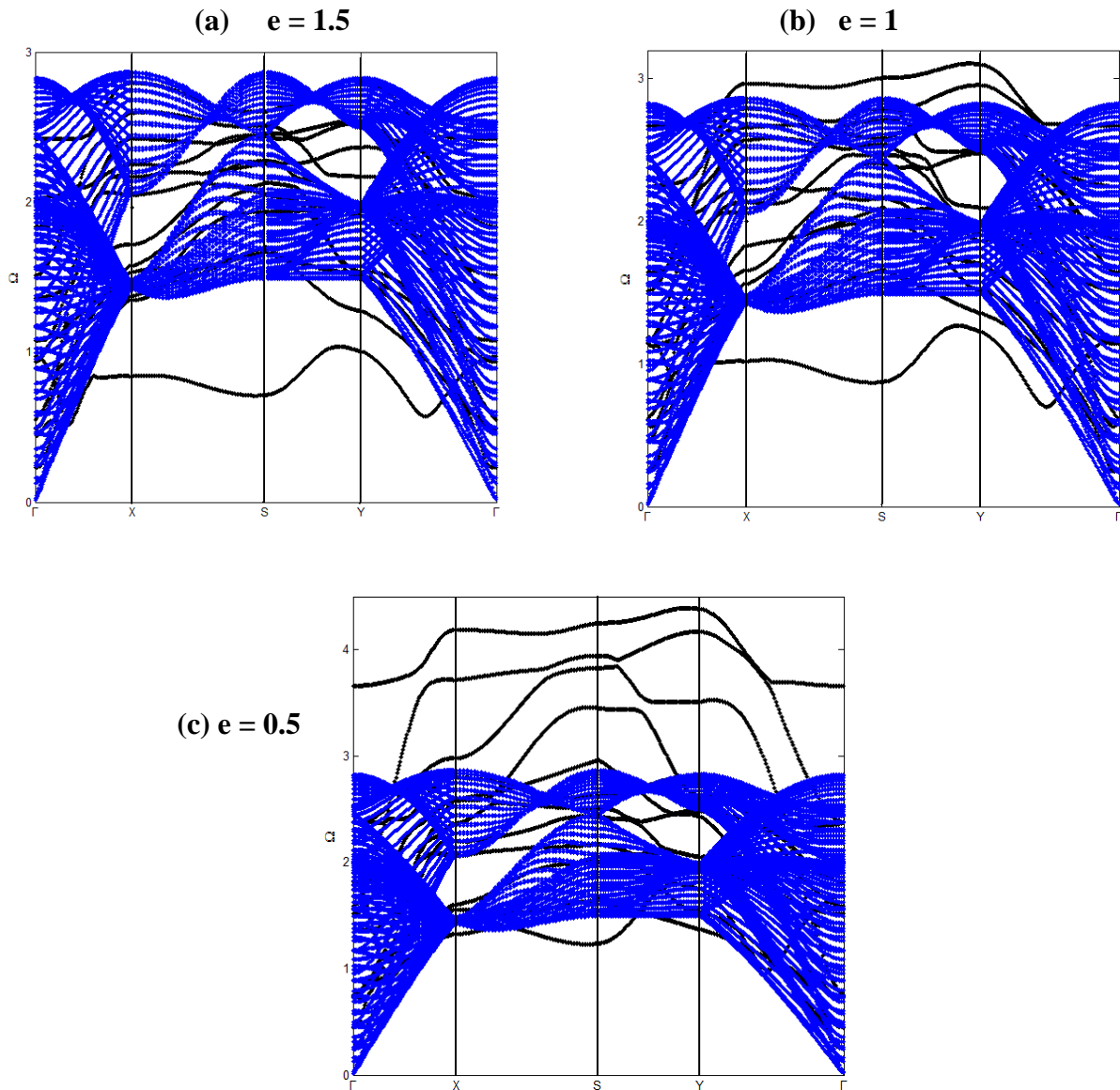


Figure IV.3 : Les états localisés au niveau d'une interface du type A/B dans une structure CFC [110] dans le cas d'homogénéité. (a) le cas d'une masse lourde, (b) une masse homogène et (c) le cas d'une masse légère.

c) Cas des contraintes

Sur les figure ci-dessous, nous représentons les états localisés au niveau d'une interface de type A/B reliant deux structures CFC suivant [110]. Les résultats obtenus sont donnés dans le cas d'adoucissement, avec la variation du rapport des masses m_1/m_2 .

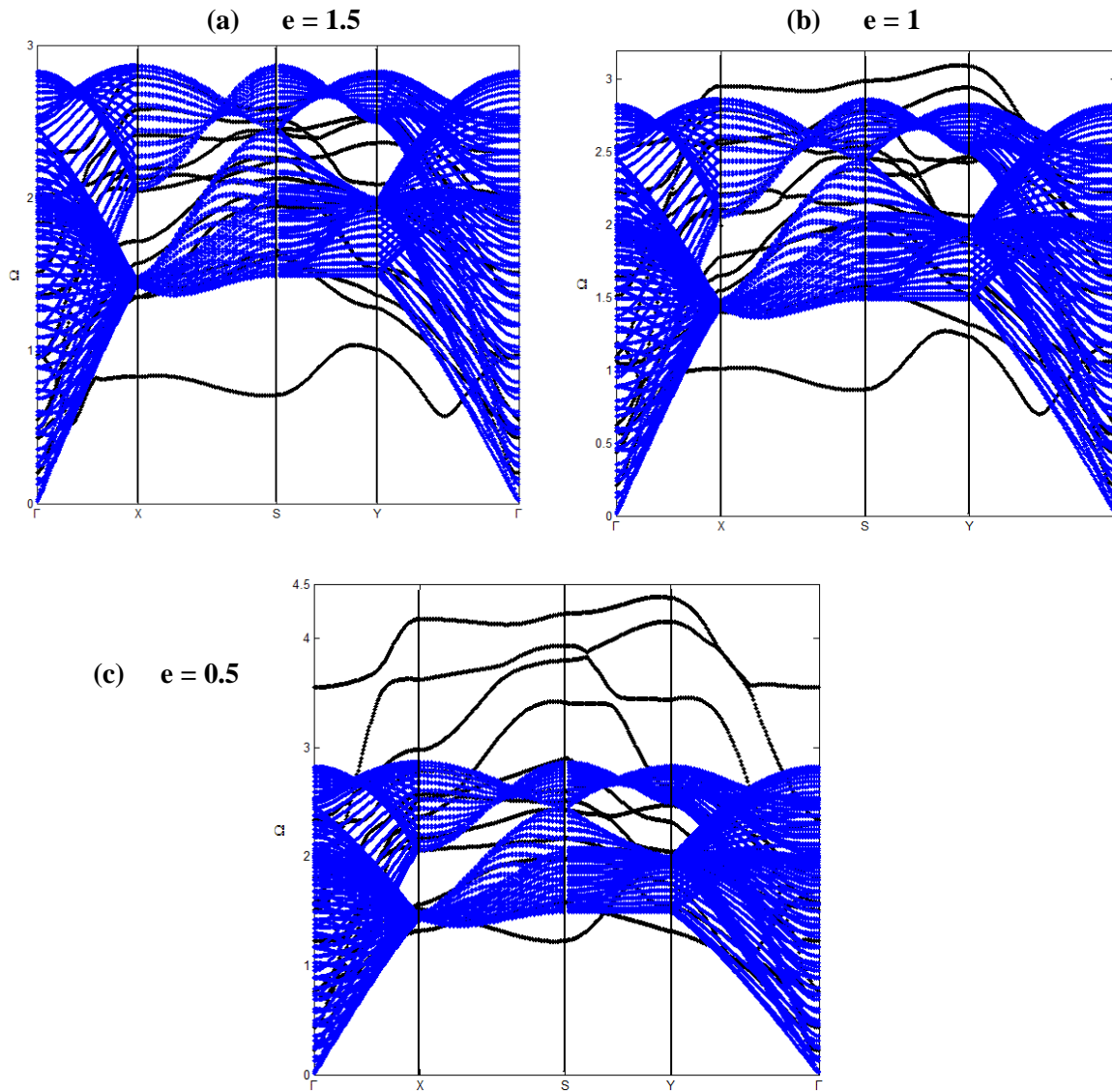


Figure IV.4 : Les états localisés au niveau d'une interface du type A/B dans une structure CFC [110] dans le cas d'adoucissement. (a) le cas d'une masse lourde, (b) une masse homogène et (c) le cas d'une masse légère.

IV.2.2. Interprétation des résultats

Les résultats sont donnés sur la figure (IV. 5). (Ce qui correspond au cas où $r = 0.5$) ; les courbes présentent une branche de phonons localisés au-dessus de la bande de phonons du volume. Nous constatons que la branche optique est plus énergétique que les phonons du volume et cinq autres branches plus énergétiques dans la région du gap du volume, et une autre branche à des faibles énergies au-dessous de la bande de volume sont observées dans le cas où $e = 1.5$.

Par contre, dans le cas d'une masse homogène, nous remarquons l'apparition d'une autre branche au-dessus de la bande du volume dont l'énergie est supérieure à celle des phonons du volume, et cinq branches plus énergétiques, nous notons toujours la présence d'une seule branche de phonons localisés moins énergétiques au niveau de l'interface et au-dessous de la bande du volume. Dans le cas d'une masse légère, nous observons l'apparition de cinq branches de phonons localisés au-dessus de la bande de volume qui possèdent des énergies plus élevées, et juste trois branches au niveau du gap, ainsi une seule branche au-dessous de la bande de volume.

La figure (IV. 6) (cas d'homogénéité), ne montre aucune branche optique de phonons localisés au-dessus de la bande du volume, cependant nous observons, quatre branches de phonons localisés à des énergies plus élevées dans la région du gap du volume dans le cas d'une masse lourde, ainsi deux autres branches au-dessous de la bande passante. Dans le cas d'une masse homogène, nous observons deux branches de phonons localisés à faibles énergies et deux autres à des énergies plus élevées, par contre, nous remarquons l'existence de cinq branches de phonons localisés au niveau de gap l'interface. Dans le cas $e = 0.5$, nous distinguons cinq branches au-dessus de la bande de volume, aussi trois autres branches de phonons localisés à l'intérieur du gap, ainsi une seule branche au-dessous de la bande de volume.

Sur la figure (IV.7), nous remarquons la présence de sept branches à l'intérieur du gap à gauche et quatre à l'intérieur du gap de droite, aussi trois branches de phonons localisés à des faibles énergies dans le cas $e = 1.5$. Dans le cas d'une masse légère, nous observons l'existence de deux branches de phonons localisés avec des énergies élevées, et deux autres avec des énergies plus faibles, et dans le gap du volume il y'a l'existence de cinq branches de phonons du volume. Nous remarquons l'apparition de quatre autres branches de phonons au-dessus de la bande de volume dans le cas d'une masse légère.

IV.2.3. Les densités d'états vibrationnelles locales

Pour obtenir les densités d'états des différents sites au voisinage d'une interface, nous avons utilisé la même méthode basée sur les fonctions de Green. Cela nous a permis de tracer les courbes suivantes.

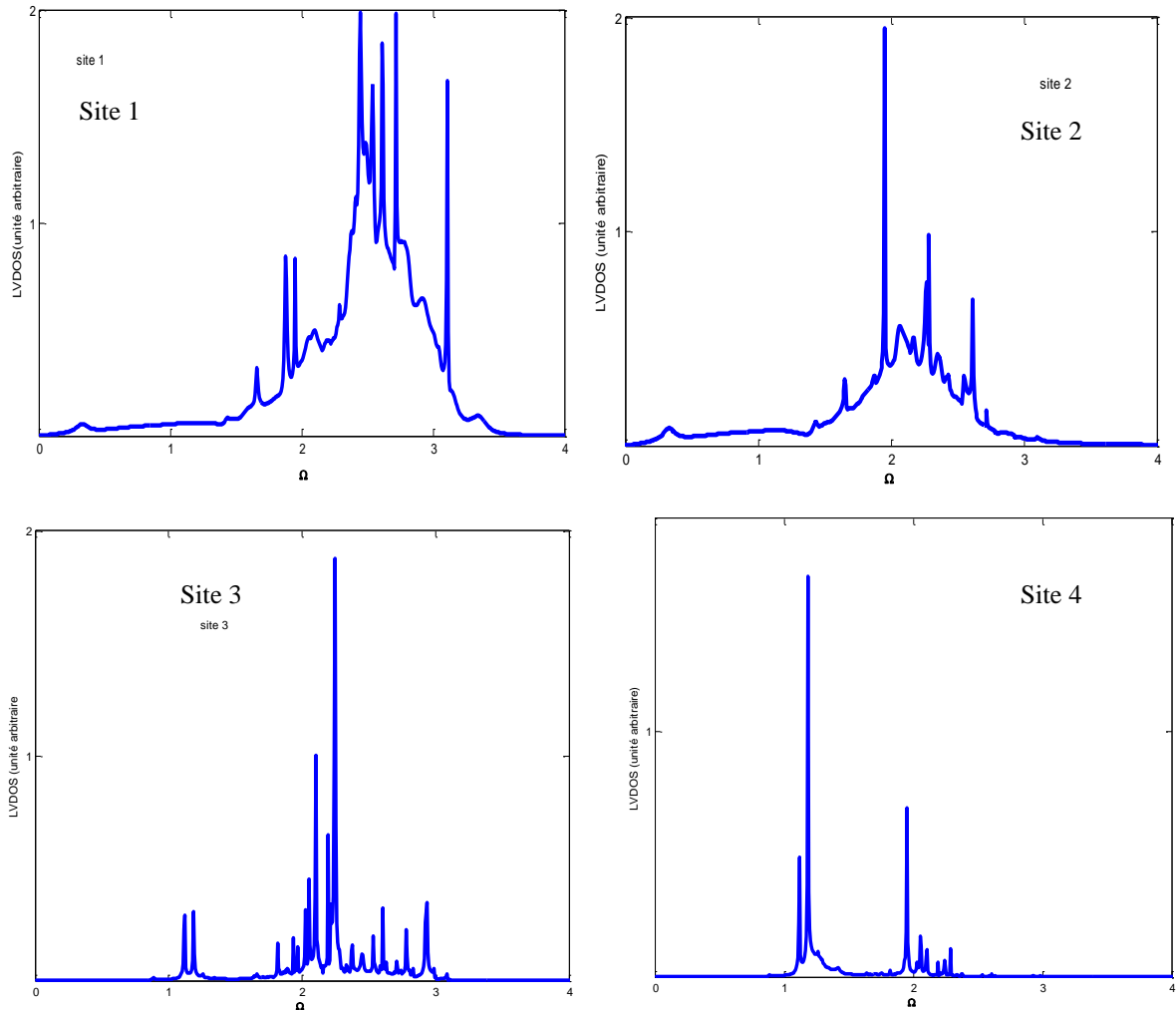


Figure IV.5 : Densités d'états vibrationnelles des sites appartenant à l'interface.

Sur la figure (IV.5), nous avons représenté, l'évolution des densités d'états des phonons en fonction de la fréquence normalisée, dans la première zone de Brillouin, pour l'ensemble des sites irréductibles de la région constituant la zone inter faciale.

Les spectres montrent plusieurs pics d'oscillations qui s'étalent sur une plage de fréquence $[0, 3.5]$, qui sont les limites correspondantes au continuum. Nous remarquons que les pics ont des hauteurs et des largeurs qui dépendent fortement des paramètres du système. D'une manière générale, nous remarquons que le spectre correspondant aux deux atomes (1) et (2) présentent beaucoup plus d'oscillations que celui des autres sites, et cela est dû à leurs

position qui est juste aux limites de l'interface (on peut constater l'influence des vecteurs de k et de m sur les DOS. Par contre les sites (3) et (4) qui se situent juste après le défaut présentent moins de richesse en pics d'oscillations car ils ressentent moins le défaut.

IV.3. Application aux cas réels

Pour faire une application numérique pour un cas réel comme le système Cu/Pd, il faut d'abord calculer les constantes de forces élastiques, et cela bien sûr, en utilisant les résultats numériques donnés par les calculs de Wu et al [52], où ils ont calculé les constantes de forces pour certains alliages avec de liaisons métal-métal dans des structures cubiques à faces centrées, et on trouve parmi ces alliages du Cu-Cu et Cu-Pd. Les résultats sont donnés dans le tableau ci-dessous.

Type de paire	Longueur de liaison (Å)	Constantes de force ($J.m^{-2}$)
(Cu-Cu) ¹	2.566	27.5
(Cu-Cu) ²	3.615	01.4
(Pd-Pd) ¹	2.750	44.4
(Pd-Pd) ²	3.890	03.6
(Cu-Pd) ¹	2.653	32.8
(Cu-Pd) ²	3.752	01.3

Tableau IV. 1 : Les constantes de forces premières et seconds voisins calculées à partir de la référence [52], en fonction des longueurs de liaisons atomiques.

Type de paire	Longueur de liaison (Å)	Constantes de force ($J.m^{-2}$)
(Cu-Cu) ¹	2.566	27.5
(Cu-Cu) ²	3.615	01.4
(Pt-Pt) ¹	3.28	35.24
(Pt-Pt) ²	3.77	1.203
(Cu-Pt) ¹	2.67	28.64
(Cu-Pt) ²	3.77	1.02

Tableau IV. 2 : Les constantes de forces premières et seconds voisins calculées en fonction des longueurs de liaisons atomiques [8].

IV.3.1. Etats localisés

IV.3.1.1. Cas du système Cu/Pt

Les figure ci-dessous, présentent les états localisés au niveau d'une interface séparant deux systèmes semi-infinis de structures CFC suivant [110], les résultats sont effectués dans le cas d'un système réel Cu/Pt, et son inverse Pt/Cu.

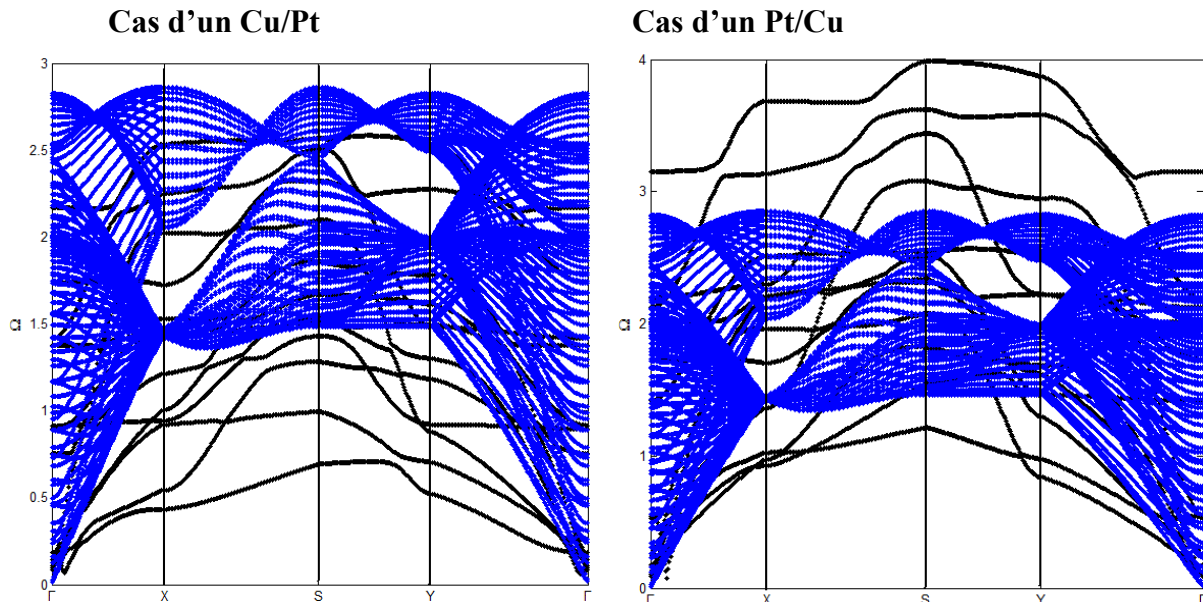


Figure IV.6 : Les états localisés au niveau d'une interface métallique : Cu/Pt et Pt/Cu.

Sur la figure (IV.6), nous avons représenté les états localisés aux voisinages de deux interfaces métalliques Cu/Pt et Pt/Cu, la bande passante est en bleu, et les traits noirs désignent les branches de phonons localisées aux niveaux des interfaces. Nous remarquons deux types de modes localisés, le premier type se situe au-dessus de la bande de volume qui a des énergies plus élevées, le second type se localise au-dessous de la bande passante qui a des énergies plus basses.

Dans le cas d'une interface Cu/Pt, nous distinguons la plupart des branches de phonons localisées (6 branches) se situent au-dessous de la bande de volume, et à l'intérieur du gap énergétique nous remarquons l'apparition de trois autres branches de phonons localisés. Par contre, dans le cas de l'interface Pt/Cu, nous observons quatre branches optiques de phonons localisés situées au-dessus de la bande passante, nous remarquons aussi quatre autres branches de phonons localisés à l'intérieur du gap, et seulement trois branches de phonons localisés à des basses fréquences situées au-dessous de la bande de volume.

IV.3.1.2. Cas du système Au/Pd

Sur la figure (IV.7), nous représentons nos calculs pour deux interfaces métalliques Au/Pd et Pd/Au. Ce calcul est obtenu après avoir déterminé les constantes élastiques qui relient les différents atomes (Au, Pd), puis le résultat sera inséré dans nos programmes et nous avons obtenu les états localisés des systèmes métalliques considérés.

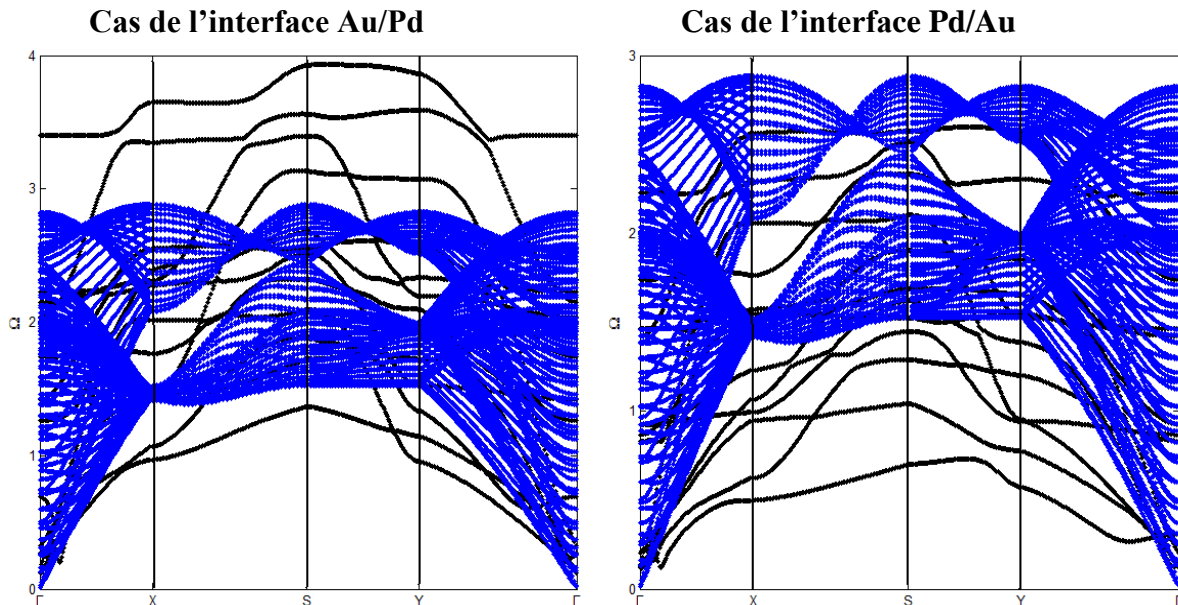


Figure IV.7 : Les états localisés au niveau d'une interface métallique : Au/Pd et Pd/Au.

Sur la figure ci-dessus, nous avons représenté les états localisés au niveau d'une interface métallique Au/Pd à gauche et une interface métallique Pd/Au à droite. D'une manière générale, nous remarquons l'apparition de plusieurs branches de phonons localisés, la majorité de ces branches se situe au-dessus de la bande de phonons (5 branches optiques) à des énergies plus élevées dans le cas d'une interface Au/Pd, aussi, nous remarquons quatre autres branches de phonons à l'intérieur du gap énergétique, et seulement deux branches situées au-dessous de la bande passante. Contrairement au cas d'une interface métallique Pd/Au, nous constatons l'apparition de six branches de phonons localisés au-dessous de la bande de volume à des énergies très faibles, et à l'intérieur du gap, nous observons trois branches de phonons localisés.

IV.3.1.3. Cas d'un alliage Cu/Pd

La fig. IV.8 représente le résultat similaire pour deux autres interfaces métalliques. La première interface est Pd/Cu sur la partie gauche et l'interface Cu/Pd sur la droite.

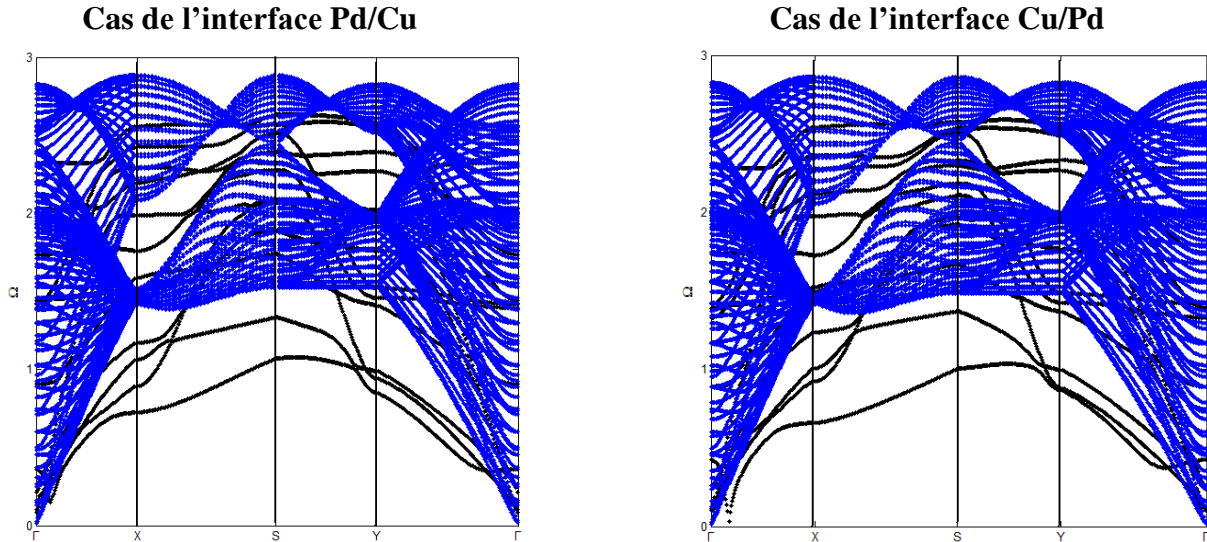


Figure IV.8 : Les états localisés au niveau d'une interface métallique : Pd/Cu et Cu/Pd.

Pour les deux interfaces Pd/Cu et Pd/Cu, nous remarquons l'apparition de cinq branches de phonons localisés à l'intérieur du gap qui ont des énergies plus élevées, et quatre autres branches de phonons à des faibles énergies au-dessous de la bande de volume. Sauf que, nous pouvons remarquer une légère différence sur les valeurs énergétiques des différentes branches de phonons localisés.

IV.3.2. Densités d'états vibrationnelles

IV.3.2. 1. Interfaces Cu/Pt et Pt/Cu

Nous avons également calculé les densités d'états pour les différents sites irréductibles des deux interfaces Cu/Pt et Pt/Cu. Les résultats sont représentés sur les figures IV.9 et IV.10. On note la présence de nombreux pics de résonances et des oscillations qui s'étalent sur une plage de fréquence $[0, 3.50]$. Cet intervalle correspond aux modes propageant. Les densités d'états sont le résultat de la somme des carrés des amplitudes des mouvements atomiques des sites irréductibles appartenant à la zone du défaut. On note une multitude de pics de résonance de formes variées pour les différents sites des deux interfaces.

Le résultat le plus remarquable c'est la diminution de nombre de pics de résonance pour les sites 3 et 4 (Pt et Cu) dans l'interface Pt/Cu, en comparaison avec ceux de l'interface Cu/Pt.

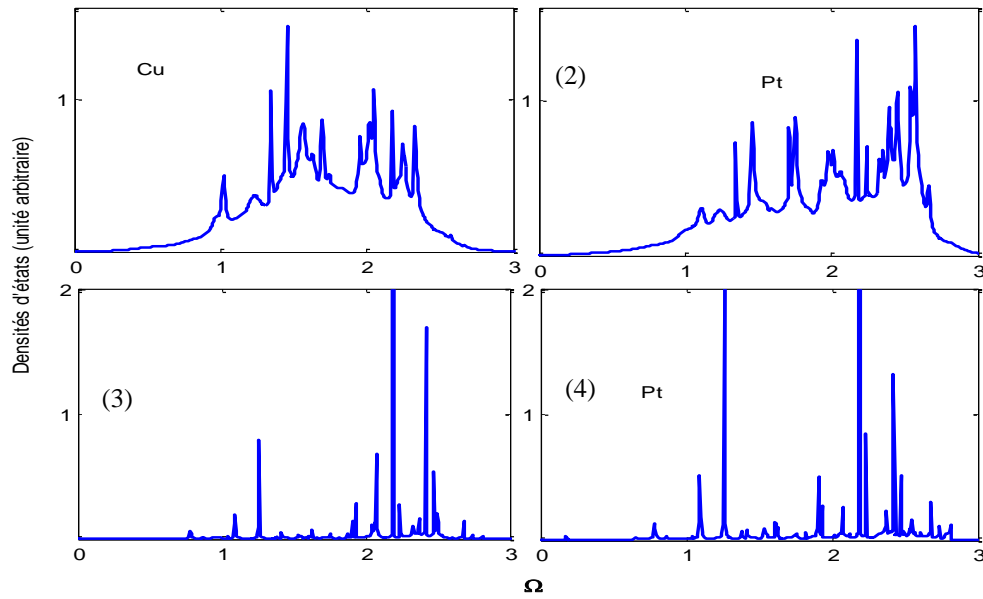


Figure IV.9 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Cu/ Pt.

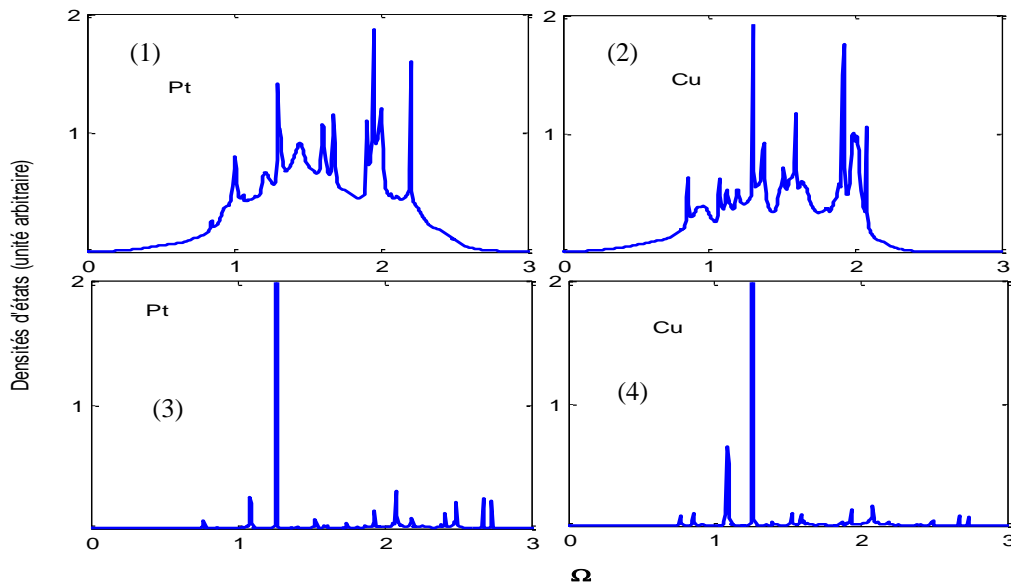


Figure IV.10 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Pt/ Cu.

IV.3.2.2. Interfaces Au/Pd et Pd/Au

Les courbes IV. 11et IV. 12 donnent les résultat des densités d'états vibrationnelles concernant les interfaces Au/Pd et Pd/Au. Les densités d'états sont exprimées en unités arbitraires et sont définies sur l'intervalle de fréquence $[0, 3.50]$ qui correspond à celui de la

dispersion de phonons de la structure CFC parfaite à 3D. Nous constatons sur le graphe la présence de plusieurs résonances de nature et de forme différentes à des fréquences variées.

Pour les sites de l'interface métallique Pd/Au, nous distinguons la présence de plusieurs pics de résonances par rapport à ceux de l'interface Au/Pd surtout pour le deuxième site. Ce dernier est l'atome de Pd à l'interface Au/Pd, nous remarquons la présence d'un seul pic plus intense qui se situe à la fréquence $\Omega = 2.41$, par contre, dans la deuxième interface Pd/Au, le site (2) est l'atome d'Au qui présente plusieurs pics de résonances.

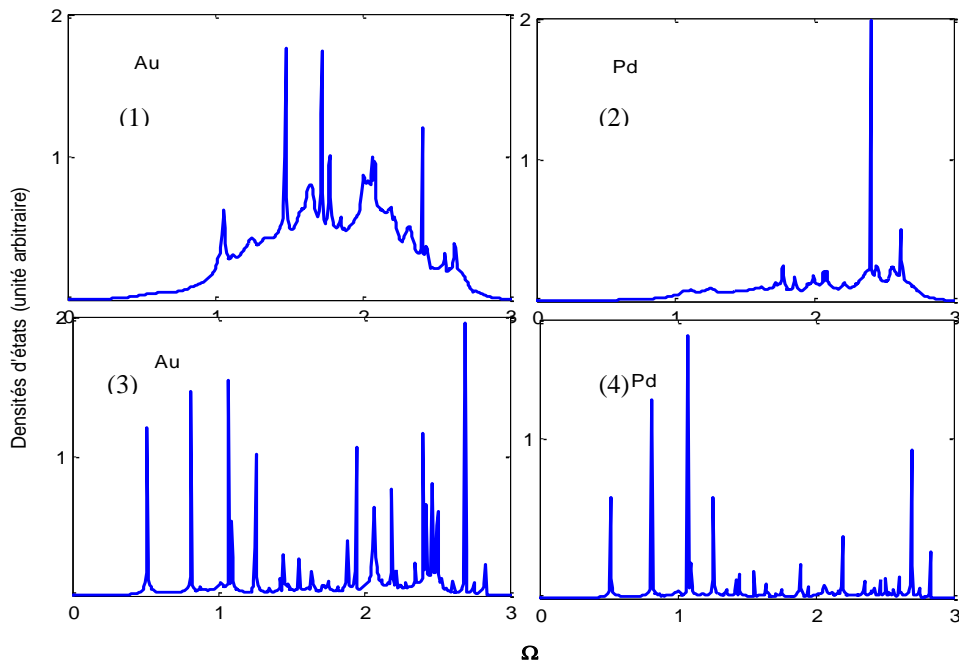


Figure IV.11 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Au/Pd.

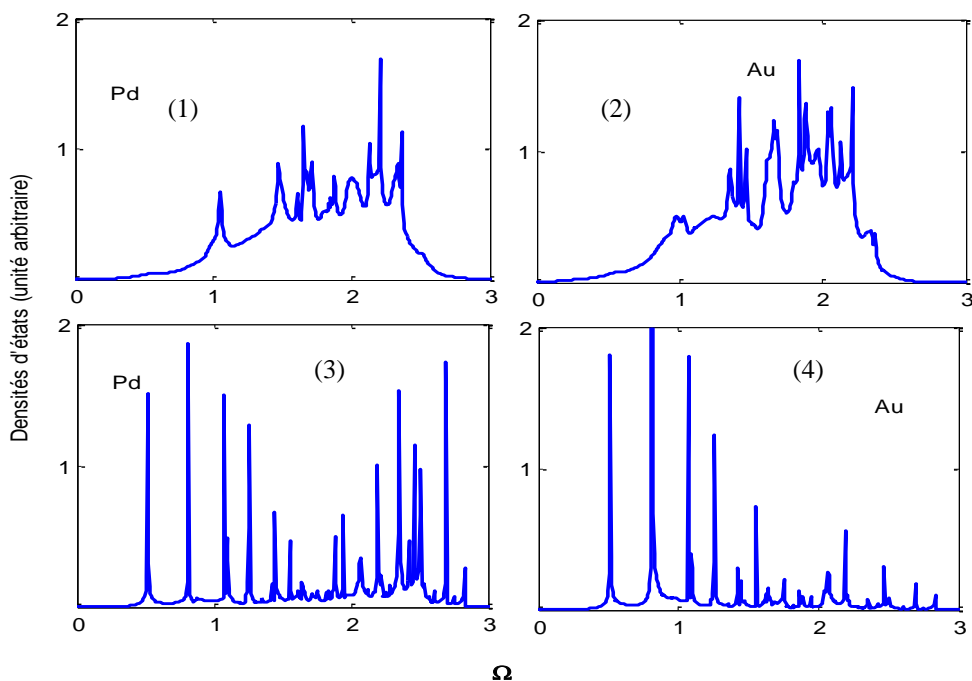


Figure IV.12 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Pd/Au.

IV.3.2.3. Interfaces Cu/Pd et Pd/Cu

Sur les figures IV.13 et IV.14, nous représentons l'évaluation des densités d'états des atomes de Cu et Pd pour les deux interfaces Cu/Pd et Pd/Cu.

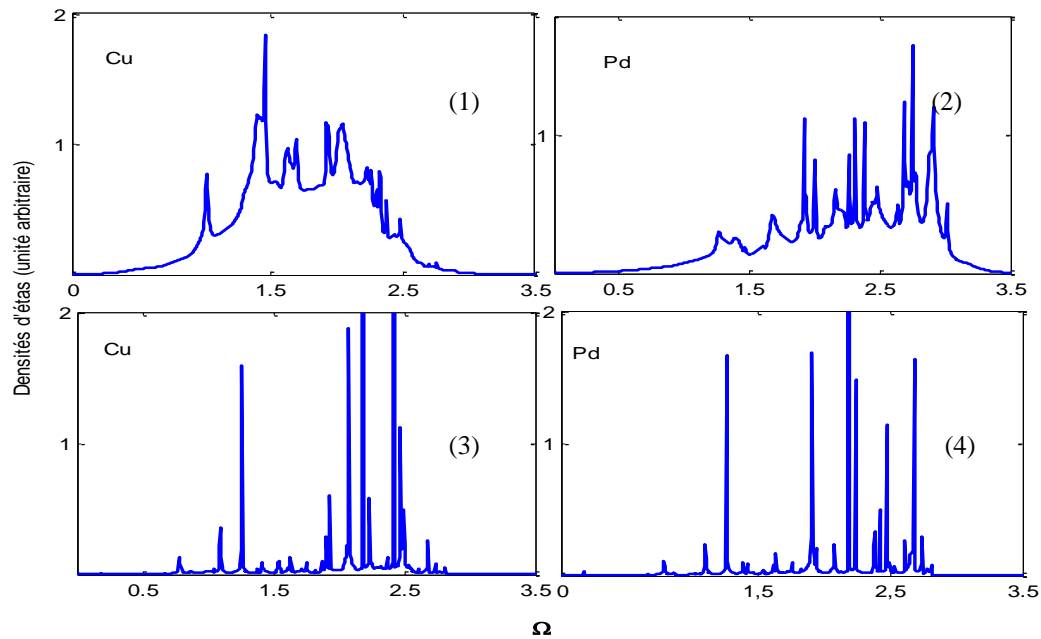


Figure IV.13 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Cu/Pd.

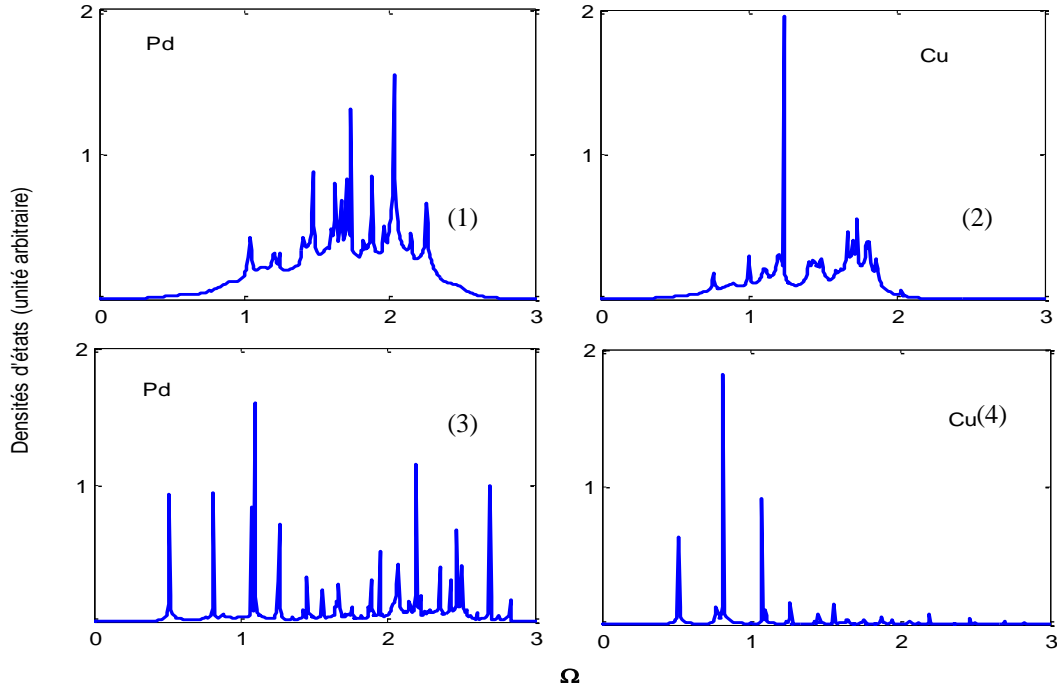


Figure IV.14 : Densité d'états vibrationnelle des sites de l'interface Pd/Cu.

D'une manière générale, nous remarquons l'apparition d'un ensemble de pics de résonances qui s'étend sur un domaine de fréquence $0 \leq \Omega \leq 3.50$. Dans le cas de l'interface Cu/Pd, on note pour le site 2 (Pd), que les pics de résonances sont concentrés du côté de hautes fréquences, dans le domaine optique. Tandis-que, nous remarquons plusieurs pics de résonances très intenses pour les sites 3 et 4 (Cu, Pd).

Contrairement au cas de l'interface Pd/Cu, nous remarquons que le site 2 (Cu) présente un seul pic de résonances qui se situe à une faible fréquence $\Omega = 1.24$, aussi que le site 3 (Cu) présente seulement trois pics de résonances situés à des basses fréquences, dans le domaine acoustique.

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons développé une approche théorique basée sur des simulations numériques permettant le traitement des phénomènes de localisation des ondes vibrationnelles dans les structures CFC suivant la direction [110]. L'étude est menée en utilisant la méthode de raccordement. Le développement de cette théorie dans l'approximation harmonique, décrivant les interactions des premiers et des seconds proches voisins, permet de décrire le mouvement de vibration des atomes d'un système donné par un nombre fini d'équations et de déterminer les modes vibrationnels localisés au voisinage des interfaces à partir des valeurs et des vecteurs propres de la matrice dynamique. Elle permet aussi de représenter les densités d'états phononiques locales associées.

Nous avons examiné les propriétés dynamiques d'interfaces dans des structures CFC suivant la direction [110] ; qui est de type A/B. A partir de la matrice dynamique des systèmes perturbés, nous avons tracé les états localisés au niveau des interfaces pour trois cas différents des masses atomiques : $m_2 < m_1$, $m_2 = m_1$, et $m_2 > m_1$ et dans chaque cas, nous avons considéré trois possibilités de l'environnement élastiques, à savoir : l'adoucissement, l'homogénéité et le durcissement des contraintes au niveau de zones d'interfaces. Par ailleurs, nous avons réalisé des applications sur des cas réels, nous citons : Cu/Pt, Au/Pd et Cu/Pd, après avoir calculé les constants élastiques qui relient les différents atomes dans chaque structure. Notre étude a montré que la présence d'interface dans une structure cristalline influe considérablement sur les propriétés vibrationnelles des systèmes. En effet, le défaut atomique crée toujours de nouveaux états localisés dans son voisinage.

La maîtrise parfaite des propriétés des systèmes en présence d'interfaces va contribuer à la fabrication et la production de matériaux de caractéristiques améliorées, multi fonctionnels moins coûteux, plus légers et plus fiables par la réalisation de revêtements atomiques.

Références bibliographiques :

- [1] H.Zhaoand, J.B.Freund, J.Appl.Phys. 97, 024903(2005).
- [2] Carolina Abs Da Cruz, Thèse de doctorat, Université de Lyon (2011).
- [3] S. HongandT.S.Rahman, Phys. Rev. B 72, 205424 (2005).
- [4] R. Chadli, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2012).
- [5] Liebfried, *in Handbuck der Physik*, edited by S. Flugge (Spinger-Velag,Berlin,1995),Vol VII, PartI, p.104.
- [6] M. Born and K.Huang, Dynamical Theory of Crystal Lattice (Oxford University Press, New York, 1954).
- [7] A. A Maradudin, E.W. Montrol, G. H.Weiss and I. P. Ipatova, *Theory of lattice Dynamics the Harmonic Approximation*, Solid State Physics, Suppl.3 (Academic Press, New York, 1971).
- [8]F.Lekadir,Thèse de Doctorat, Université M.Mammeri de Tizi-Ouzou (2017)
- [9]V. E.Marsico, Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique de Lausanne, Suisse (1995).
- [10]Y. Cheballah, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de TiziOuzou (2009).
- [11] S. Mokrani, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de TiziOuzou (2009).
- [12] R. E. Allen, G. P. Alidrege, et FW DE Wette, Phys. Rev, 4, 1648 (1971).
- [13] R. A. Allen, Surf. Sci 76,91 (1978).
- [14] R. E. Allen, G. P. Alldredge and F. W. De Wette, Phys. Rev.4, 1648 (1971).
- [15] B.Bourahla, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi ouzou (2007).
- [16] George Green, J. für die reine und angewandteMathematik n° 39 (1850).
- [17] J. C. Slater: *Quantum Theory of Molecules and Solids*, (M. C. Graw-Hill, New York, London, 1965).
- [18] L. Dobrzynski, Surf. Sci. Reports 6, 119 (1986).
- [19] A. Kara, C. S. Jayanthi, S. Y. Wu et F. Ercolessi, Phys. Rev. Lett. 72, 2223 (1994).
- [20] E. J. Mele and M. V. Pykhtin, Phys. Rev. Lett. 75, 3878 (1995).
- [21] A. Kara, S. Durukanoglu and T. Rahim, Phys. Rev. B 53, 15489 (1995).
- [22] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 323 (1995).
- [23] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 341 (1995).
- [24] A. Virlovet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennecand K.Maschke, J. Phys. Condens, Matter, 8, 7589 (1996).
- [25] R. Tigrine, Thèse de doctorat d'état, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2004).
- [26] T.E. Feuchtwang, Phy. Rev. 155, 731 (1967).
- [27] J. Szeftel and A. Khater, Phys. Rev.C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987).
- [28] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. D'Addatoet N. Auby, J. Phys. C: Solid State Phys. 21, 2113 (1988).
- [29] M. Belhadi, A. Khater, O. Rafil, J. Hardy, R.Tigrine, Phys. Stat. Sol. (b) 228, 685 (2001).
- [30] M. Bouatelli, Mémoire de magister, Université USTHB de Bab-Zouar (2007).
- [31] M. Rabia, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de TiziOuzou (2008).
- [32] B. Bourahla, A. Khater. R. Tigrine. O. Rafil. M. Abou Ghantous, J. Phys. Condens. Matter. 19. 266208 (2007).
- [33] M. Belhadi and R.Chadli, Surf.Rev. Lett. 11, 321(2004).
- [34] B. Bourahla, A. Khater. O. Rafil, R. Tigrine. J. Phys. Condens. Matter.18, 8683 (2006).
- [35] R. Tigrine, A. Khater, M. Belhadi. O. Rafil, Surf. Sci. 580,1 (2005).
- [36] M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, A.Virlovet and K. Maschke, Eur. Phys J. B 15, 435 (2000).
- [37] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. D'Addatoet N. Auby, J. Phys. C: Solid State Phys. 21, 2113 (1988).
- [38] E. J. Garboczi and M. F. Thorpe, Phy. Rev. B.32, 7 (1985).
- [39] H. Yildirim, A. Kara, S. Durukanoglu and T. S. Rahman, Surf. Sci. 600, 484 (2006).
- [40] N.N. Chen and M. G. Cottam, Phy. Rev. B. 44, 14 (1991).
- [41] A.Virlovet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec, and K. Maschke, J. Phys.: Condens. Mat. 8, 7589 (1996).
- [42] Frenkel .J. Wave mechanics .ed T.i.s.o.m.o physics .1936 : oxford university press.
- [43] L.Richard, L. Weaver, I. O. Lobkis, J. Acoustical Society of America 113, 2611 (2003).

- [44] H.Zhao and, J.B.Freund, J.Appl.Phys. 97, 024903(2005).
- [45] Carolina Abs Da Cruz, Thèse de doctorat, Université de Lyon (2011).
- [46] S. Hong and T.S.Rahman, Phys. Rev. B 72, 205424 (2005).
- [47] R. Chadli, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2012).
- [48] S. I. Bozhevolnyi, V. S. Volkov, E. Devaux, J. Y.Laluet, and T.W.Ebbesen. Nature 440, 508 (2006).
- [49] M.Rabia, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2008).
- [50] J.Szeftel and A.Khater, Phys.Rev.C: Solid State Phys.20,4725 (1987).
- [51] C.Kittel, *Introduction à la physique de l'Etat Condensé*, Dunod-Edition (1995).
- [52]] E. J. Wu, G. Ceder and A. Van de Walle, Phys. Rev. B 67, 134103 (2003).