

N° d'ordre :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

-----  
UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU

Faculté des Sciences  
Département de Chimie



*Domaine :* **Science de la matière**  
*Filière :* **Chimie**  
*Spécialité :* **Chimie Physique**

## Mémoire de Master

*Thème*

**Propriétés vibrationnelles d'une structure hexagonale à  
deux dimensions.**

*Présenté par :*

**SELLAH Syfax**

**MOULOUDJ Abderazak**

*Soutenu publiquement, le*      *14 / 07/ 2021,*      *devant le Jury composé de :*

<b>CHEKNOUN Salem</b>	<b>MCB</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Président</b>
<b>LEKADIR Fazia</b>	<b>MCB</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Examineur</b>
<b>DJEBALA Lila</b>	<b>MCB</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Encadreur</b>

Session 2020 / 2021

## 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 nos parents à nos frères et sœurs et à toute la famille. On vous remercie de votre soutien indéfectible.*

*A notre encadreur Mme Lila DJEBALA, maître de conférence classe B à l'UMMTO, nous tenons à lui exprimer notre profonde reconnaissance d'avoir accepté de diriger notre mémoire de fin d'étude, et pour l'efficacité et la bienveillance avec lesquelles elle nous a constamment guidé et encouragé.*

*A Mr CHEKNOUN Salem Maître de conférence B à l'UMMTO, reconnaissant d'avoir accepté d'examiner notre travail de nous avoir aidé et conseillé.*

*A Mr Boualem BOURAHLA professeur à l'UMMTO, qui a toujours su nous orienté et nous proposé les choix scientifiques les plus adapter à la résolution des problèmes que nous avons rencontré.*

*Veillez trouver ici le témoignage de notre plus profond respect et reconnaissance.*

*A Mr Smail SAIT maître de conférence classe B à l'UMMTO, on lui adresse nos plus vifs remerciements pour avoir apporté ces conseils les plus précieux durant notre travail.*

*A Mme Fazia LEKADIR maître de conférence classe B à l'UMMTO, on lui adresse notre reconnaissance pour avoir accepté d'examiné notre travail de fin d'étude.*

*A Mr Aghiles KHALEF notre confrère et à tous ceux qui nous connaient de près ou de loin on vous remercie pour votre aide et précieux conseils.*

## *Dédicaces*

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

*À mes parents et à mes frères et sœurs que j'aime tant.*

*Que dieu les gardent et les protègent.*

*Toute ma famille*

*Touts mes amis sans cité de noms pour éviter l'oublié et une page ne suffira pas aussi.*

*A mon binôme ABDON*

**SELLAH**

## *Dédicaces*

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

*- Ma très chère mère et mes frères et mes sœurs pour leurs affections, amour, encouragements,*

*Que dieu les gardent et les protègent.*

*- Toute ma famille.*

*- Mes amis Aghilas, Sofiane, Major, Ahmed, Malik, Lhadi, et tout mes amis.*

*- Aussi à mon binôme Syfax.*

*Enfin,*

*Je dédie ce travail aussi à la mémoire de mes très chères regrettés mon père et ma sœur malheureusement ils ne sont pas de ce monde pour partager avec moi cette réussite, reposent en paix.*

**MOULOUDJ**

**"CEUX QUI SAVENT NE PARLENT PAS, CEUX QUI PARLENT NE SAVENT PAS. LE SAGE ENSEIGNE PAR SES ACTES, NON PAR SES PARLES"**

**-LAO TSEU-**

## Table des matières

<b>Introduction Générale</b>	03
<b>Chapitre I : Généralités sur les réseaux bidimensionnels</b>	
I. Introduction	05
II. Réseau de bravais bidimensionnels	06
III. Les phonons	07
IV. Les différents types de phonons	08
IV.1. Les phonons acoustique	08
IV.2. Les phonons optique	08
V. Dynamique des réseaux	09
VI. Description de la structure hexagonale à 2D	09
VII. Equations de mouvement	10
VII.1. Les facteur de phases	12
VIII. Matrice dynamique	13
IX. Courbes de dispersion	14
IX.1. Courbe à 2D	14
IX.2. Courbe à 3 D	15
X. Vitesse de groupe	15
<b>Chapitre II : Transport de phonons via un joint atomique dans une structure</b>	
<b>Hexagonale</b>	
I. Introduction	18
II. Description du système modèle	18
III. Matrice dynamique du système perturbé	19
IV. Matrice de raccordement	24
V. Méthode de raccordement	25
VI. Principe de la méthode de raccordement	26

VI.1. Zone parfaite	26
VI.2. Zone de défaut	26
VI.3. Zone de raccordement	26
VII. Calcul des grandeurs vibrationnelles	27
VII.1. Détermination de coefficient de transmission et de réflexion	27
VII.2. Conductance phononique	27
VIII. Résultat des simulations et discussions	27
VIII.1. Transmission et réflexion	27
VIII.2. Conductance phononique	30
VIII.3. Les états localisés	31
VIII.3.a. Cas homogène	32
VIII.3.b. Cas de durcissement	32
VIII.3.c. Cas d'adoucissement	33
<b>Conclusion Générale</b>	<b>35</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>36</b>



# Introduction générale



- **Introduction Générale**

Le développement des nanotechnologies a permis de maîtriser de la matière à l'échelle atomique [1]. Au début du vingtième siècle, plusieurs révolutions scientifiques ont bouleversé notre vision de la matière. L'année 1912 fut la grande découverte qui stipule que les électrons tournent autour du noyau de l'atome selon des orbites de rayon défini comme étant tous identiques et contenus dans le même plan a permis de comprendre la structure des atomes et le comportement de la matière ainsi celui de ces composants élémentaire (électron et noyau).

De nouvelles méthodes de fabrication virent le jour [2] dans le but de construire des matériaux de plus en plus petits et fiables. Lorsqu'on diminue la taille d'un objet pour atteindre une taille nanométrique, les propriétés physiques de ces objets seront fortement modifiées. Ces matériaux contiennent toujours des défauts, soit présent à l'équilibre thermique, soit introduit lors de la fabrication ou encore lors de leurs utilisations.

Les structures atomiques peuvent être perturbées par la présence des surfaces atomiques et/ou l'existence de défaut qui peuvent être ponctuels, linéaires ou volumiques tel que : les ad-atomes, les ad-lacunes, les joint de grains, atomes de substitution, ...


Les propriétés de ces surfaces varient selon ces structures atomiques et de ces interactions avec les particules de son entourage.

Le travail présenté dans ce manuscrit consiste à comprendre le comportement dynamique de ces surfaces, en utilisant la simulation numérique, basée sur la dynamique vibrationnelle classique de Newton, dans le cadre d'approximation harmonique et force centrale [3], décrivant les interactions entre premiers proches voisins. La méthode utilisée pour l'étude de la dynamique des excitations élastiques (phonon) est la méthode de raccordement [4,5].


Le premier chapitre débute par un rappel des notions de base essentielles de la physique des solides, suivi d'une étude dynamique d'un réseau parfait d'une structure hexagonale à deux dimensions. Ce modèle nous permettra de déterminer la courbe de dispersion et ses modes de propagations et d'introduire les vitesses de groupes qui seront utilisées pour la normalisation des grandeurs physiques, formant la matrice de diffusion

Le deuxième chapitre est consacré à la description de la méthode utilisée pour l'étude de la dynamique d'excitations élastiques (phonon) dans un système hexagonal à deux dimensions perturbé. Cette dernière s'appuie principalement sur la méthode de raccordement, elle nous permet de retrouver certaines grandeurs vibrationnelles.

Enfin nous présentons une conclusion générale qui résumera les principaux résultats obtenus.



**Chapitre I**  
**Généralités sur les réseaux**  
**bidimensionnels**



- **I. Introduction**

La matière existe sous trois formes essentielles, solides, liquides ou gazeuses. On distingue deux formes différentes de solide : solides cristallisés et solides amorphes. La différence entre ces deux types de solides provient du fait qu'un cristal est constitué par la répétition périodique dans un, deux ou trois dimension d'un motif toujours identique.

Les phonons ne sont présents que dans des matériaux cristallins où une périodicité de la structure existe. Cependant la vraie définition des phonons se trouve dans le monde quantique ou un phonon est un quantum d'énergie de vibration d'un réseau cristallin. Dans notre travail les phonons ne seront pris en compte dans le domaine quantique mais dans le classique.

Avant de nous focaliser sur les caractéristiques des phonons, il nous apparaît primordial de parler des réseaux cristallins, la présence d'une périodicité dans leurs structures et propriétés.

Un réseau cristallin est un ensemble de points ou nœuds en un, deux ou trois dimensions caractérisé par au moins une périodicité de translation dans sa structure. La figure (I.1) schématise un réseau cristallin bidimensionnel composé de deux types d'atome différents.

Un réseau de Bravais est une construction purement géométrique qui donne une périodicité de la structure à partir d'un ensemble de vecteurs. Les vecteurs ( $\vec{a}_i$ ) permettent de définir par exemple un réseau sur la figure (I.1).

Nous appelons une maille d'un réseau, le volume défini par cet ensemble de vecteurs. Les nœuds du réseau correspondent aux points géométriques générés par la translation des vecteur de réseau de Bravais, il est mentionné par des croix sur la figure (I.1).

A chaque nœud du réseau est associé un motif, qui est répété à chaque translation, le motif du réseau de Bravais défini par les vecteurs ( $\vec{a}_i$ ) est indiqué par le rectangle rouge, il contient donc 4 atomes.

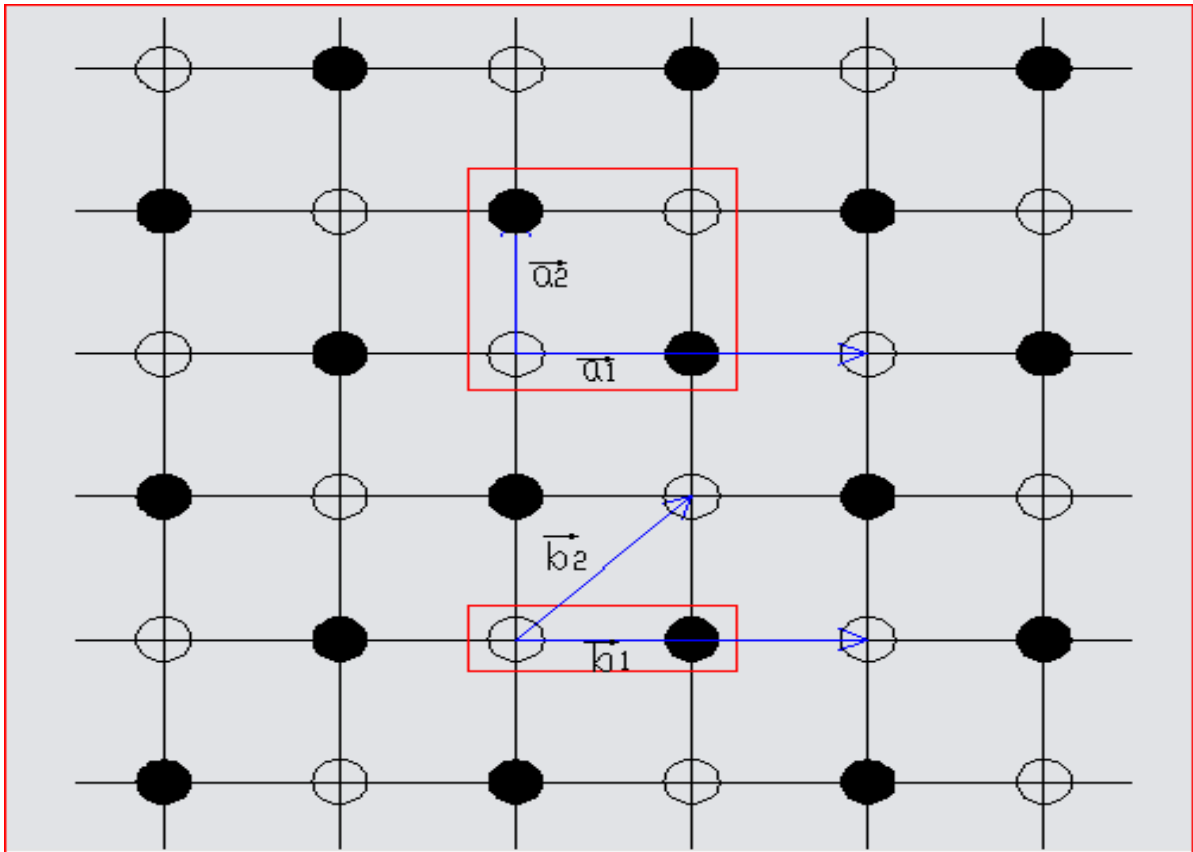
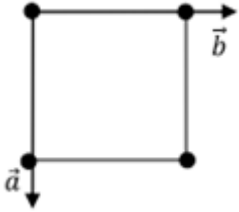
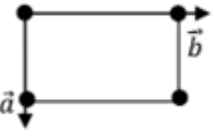
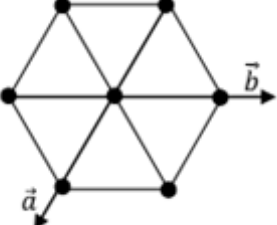
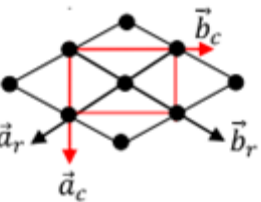



Figure (I.1) : Schéma d'un réseau cristallin bidimensionnel

## • II. Réseaux de Bravais bidimensionnels

Chaque surface bidimensionnelle (deux dimensions) ne peut avoir comme réseau que l'un des cinq réseaux de Bravais possibles : le réseau carré, rectangulaire, hexagonal rectangulaire centré et oblique, représentés dans le tableau ci-dessous. Ces réseaux peuvent être décrits par un choix de deux vecteurs non colinéaires qui sont caractérisés en particulier par leur longueur et par l'angle  $\theta$  entre leurs directions [6].

Réseau	Paramètre	Schéma
Réseau carré	$\vec{a} = \vec{b}$ $\alpha = 90^\circ$	
Réseau rectangulaire	$\vec{a} \neq \vec{b}$ $\alpha = 90^\circ$	
Réseau hexagonale	$\vec{a} = \vec{b}$ $\alpha = 120^\circ$	
Réseau rectangulaire centre	$\vec{a} \neq \vec{b}$ $\alpha = 90^\circ$	
Réseau oblique	$\vec{a} \neq \vec{b}$ $\alpha \neq 90^\circ$	

- III. Les phonons

Le terme « phonon » fut introduit par Fränkel [7]. 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 [8].

Le déplacement des ondes élastique est favorisé en milieu solide cristallin. Lorsqu'un cristal en vibration perd ou gagne de l'énergie, il le fait en grande quantité, dont la valeur est proportionnelle à la fréquence de vibration. C'est cette quantité d'énergie qui porte le nom « phonon ».

- **IV. Les différents types de phonons**

Dans un solide réel, il y a plusieurs types de phonons :

- **IV.1. Les phonons acoustiques**

Ils correspondent pratiquement aux ondes sonores dans le réseau atomique. Les phonons acoustiques longitudinaux et transverses sont souvent notés de manières abrégées LA et TA, respectivement.

- **IV.2. 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.

- **V. Dynamique des réseaux**

Dans notre travail on s'intéressera à une catégorie de vibration nommée en mécanique classique par les modes normaux de vibration, lesquels chaque élément d'un réseau vibre à la même fréquence, et leurs équivalents en mécanique quantique sont les phonons qui n'existent qu'au sein d'un réseau cristallin comportent un grand nombre de particules [9].

Grâce à des forces d'interactions, les atomes sont près de leurs positions d'équilibre où les atomes sont supposés interagir selon deux modèles de forces : les forces angulaires et les forces centrales qui suscitent l'intérêt de notre étude [10].

La force centrale d'un modèle est un ressort dont la force de rappel est dirigée le long de la distance entre deux atomes.

Nous appliquons les conditions aux limites périodiques de Born Von Karman pour analyser la dynamique vibrationnelle du solide [11], sans vibration, un cristal parfait peut être décrit en donnant son réseau de Bravais ainsi que la description de l'arrangement des atomes dans une cellule primitive.

Pour déterminer la dynamique vibrationnelle de ce système atomique, il faudrait connaître sa matrice dynamique [12], réalisée d'après les étapes suivantes :

- ✚ Description de la cellule unitaire du système,
- ✚ Réalisation de l'équation de mouvement de la cellule unitaire,
- ✚ Les équations doivent être suivies suivant les deux axes (Ox) et (Oy),
- ✚ La matrice dynamique est donnée à partir des équations de mouvement.

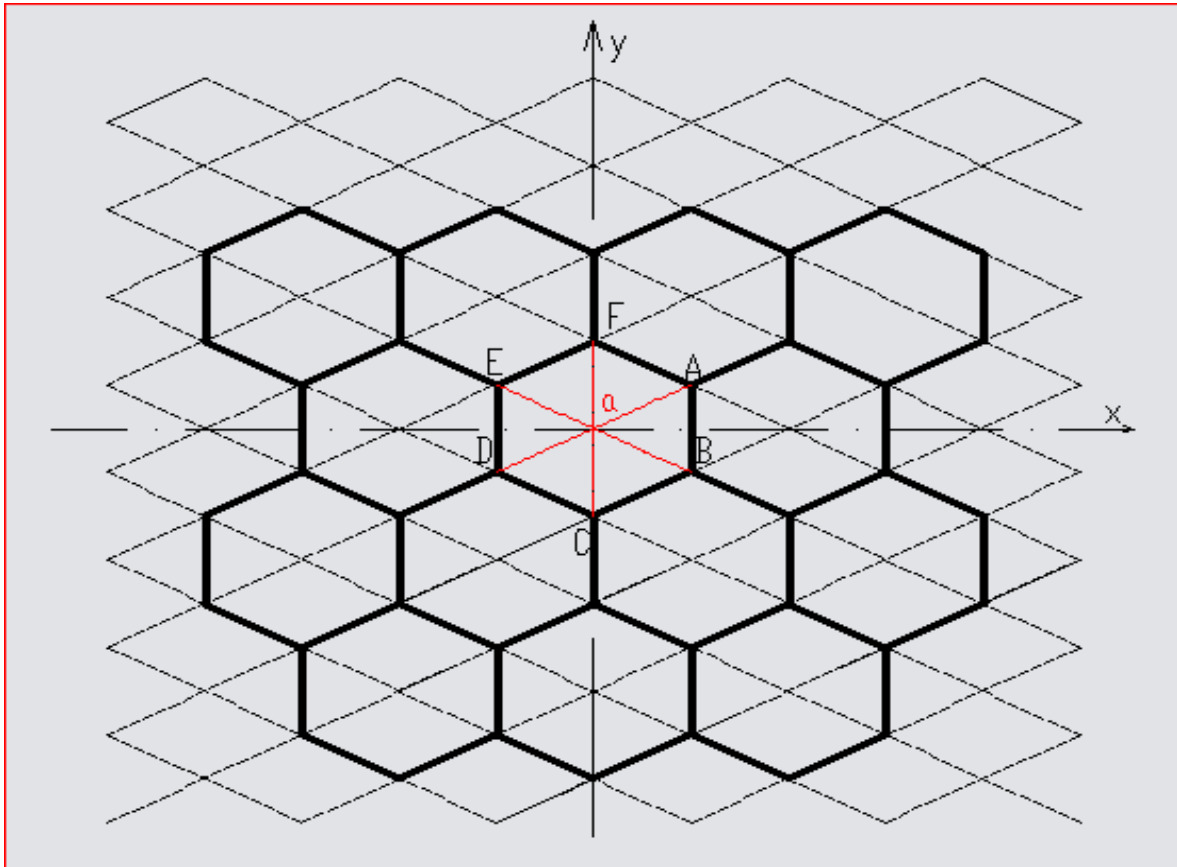
- **VI. Description de la structure hexagonale à 2D**

Le système modèle choisi dans notre étude est une structure hexagone à 2 dimensions infini formé d'atomes identiques qui peuvent se déplacer suivant les deux directions (Ox) et (Oy).

Les paramètres propres du système sont symbolisés par un assemblage de masse ponctuelles notées  $m$ , reliées par des constantes de forces entre premier voisin notée  $k_1$ .

Pour étudier la dynamique du système, il est impératif d'écrire les équations de mouvement des atomes de la cellule unitaire, représentative de la structure.

Dans le cas présent, nous notons un seul atome par unité/celle, et son vecteur déplacement a les composantes  $u$  ( $u_x, u_y$ ) voir la figure (I.3).



**Figure (I.3) : Représentation schématique du réseau parfait de la structure hexagonal**

Tous les sites atomiques du réseau parfait sont identiques, ils sont donc équivalents. Les équations du mouvement ne seront écrites, par conséquent, que pour un seul atome.

Pour les autres atomes, une simple translation nous permettra de retrouver les équations de mouvements suivant les deux directions cartésiennes ( $Ox$  et  $Oy$ ). La distance interatomique est notée par  $a$ .

- **VII. Equations de mouvement**

Lorsqu'un atome est excité par une perturbation extérieure (électrique, mécanique, quantique ou classique, etc.), il se met à vibrer en entraînant avec lui tous les autres atomes qui lui sont voisins.

Pour décrire la dynamique de l'atome, on applique la deuxième loi de Newton [13]. Elle est donnée par l'équation suivante :

$$\sum \vec{F}_{\text{ext}} = m\vec{a} = m \left( \frac{d^2 \vec{U}_\alpha}{dt^2} \right) \dots \dots \dots (I.1)$$

En utilisant l'approximation harmonique l'équation (I.1) se mettra sous la forme :

$$m\omega^2 U_\alpha(n, t) = \sum_{n \neq n'} \sum_b \left[ \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right] k(n, n') \{U_b(n', t) - U_b(n, t)\} \dots \dots \dots (I.2)$$

Où :

$m_n$  : la masse de l'atome (n)

$U_\alpha(n, t)$  : l'amplitude de sa vibration suivant la direction ( $\alpha$ )

$k(n, n')$  : la constante de force entre les atomes n et n'

$r_\alpha, r_\beta$  : sont respectivement les composantes cartésiennes suivant  $\alpha$  et  $\beta$  du vecteur  $\vec{r}$

(n, n') joignant la position d'équilibre de l'atome n a l'atome n'

r : est son module.

Les solutions de ces équations de mouvements sont prises comme étant des ondes planes harmoniques [14] qui s'écrivent sous la forme :

$$U(n, t) = U(n, \omega) e^{i\omega t} \dots \dots \dots (I.3)$$

On injectant cette solution dans l'équation (I.2) on obtient :

$$m\omega^2 U_\alpha(n, \omega) = \sum_{n \neq n'} \sum_b \left[ \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right] k(n, n') \{U_b(n', \omega) - U_b(n, \omega)\} \dots \dots \dots (I.4)$$

La projection de cette dernière suivent (Ox) nous donne :

$$m\omega^2 U_x(0, 0) = 3k_1 U_x(0, 0) + \frac{3}{4} k_1 [U_x(A) + U_x(C) + U_x(D) + U_x(F)] + \frac{\sqrt{3}}{4} k_1 [U_y(A) - U_y(C) + U_y(D) - U_y(F)] = 0 \dots \dots \dots (I.5)$$

La projection suivant (Oy) nous donne :

$$(mw^2 + 3k_1)U_y(0,0) = \frac{1}{4} k_1 [U_y(A) + U_y(C) + U_y(D) + U_y(F)] + k_1 U_y(0,0)$$

$$[U_y(B) + U_y(E)] + \frac{\sqrt{3}}{4} k_1 U_x(0, [U_x(A) - U_x(C) + U_x(D) - U_x(F)] = 0 \dots\dots\dots$$

(I.6)

• **VII.1. Les facteurs de phases**

Comme l'onde propageant est une onde harmonique [15], on introduit la notation suivante :

$$U_\alpha(i \pm 1, j) = e^{\pm q_x a} U_\alpha(i, j)$$

$$U_\alpha(i, j \pm 1) = e^{\pm q_y a} U_\alpha(i, j)$$

On pose :

$$Z_1 = e^{\pm q_x a}$$

$$Z_2 = e^{\pm q_y a}$$

Dans notre cas :

$$\begin{cases} Z_1 = e^{i \varphi_x} ; \varphi_x = q_x \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ Z_2 = e^{i \varphi_y} ; \varphi_y = q_y \frac{a}{2} \end{cases}$$

Z : est le facteur de phase satisfaisant la condition de propagation suivant l'axe des x.

Si on reporte les facteurs de phase dans les deux équations (I.5) et (I.6) elles seront, respectivement, comme suit :

Selon (Ox) :

$$[(mw^2 - 3k_1) + \frac{3}{4} k_1 \{(Z_1 + Z_1^{-1})(Z_2 + Z_2^{-1})\}] U_x(0,0) + \left[ \frac{\sqrt{3}}{4} k_1 \{(Z_1 - Z_1^{-1})(Z_2 - Z_2^{-1})\} \right] U_y(0,0) = 0 \dots\dots\dots (I.7)$$

Selon (Oy) :

$$[(mw^2 - 3k_1) + \frac{1}{4} k_1 \{(Z_1 + Z_1^{-1})(Z_2 + Z_2^{-1})\} + k_1(Z_2^2 + Z_2^{-2})] U_y(0,0)$$

$$+ \left[ \frac{\sqrt{3}}{4} k_1 \{(Z_1 - Z_1^{-1})(Z_2 - Z_2^{-1})\} \right] U_x(0,0) = 0 \dots\dots\dots (I.8)$$

- **VIII. Matrice dynamique**

L'ensemble des équations peut être reportée sous forme d'une matrice dynamique notée (M) de dimension  $(2 \times 2)$ , elle est dite matrice dynamique du système parfait. Elle s'écrit par :

$$\begin{bmatrix} mw^2 - 3k_1 + \frac{3}{4}k_1(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1}) & \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(z_1 - z_1^{-1})(z_2 - z_2^{-1}) \\ \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(z_1 - z_1^{-1})(z_2 - z_2^{-1}) & mw^2 - 3k_1 + \frac{1}{4}k_1(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1}) + k_1(z_2^2 + z_2^{-1}) \end{bmatrix} \quad (\text{I.9})$$

Ce système d'équations peut se mettre sous la forme matricielle suivante :

$$[\Omega^2 I - M(\vec{k})|u] = 0 \quad (\text{I.10})$$

Où :

$\Omega^2 = \frac{mw^2}{k_1}$  : Fréquence normalisée de vibration,

$M(\vec{k})$ : La matrice dynamique  $(2 \times 2)$ ,

$\vec{k}$  : Le vecteur d'onde,

I : la matrice d'identité  $(2 \times 2)$ ,

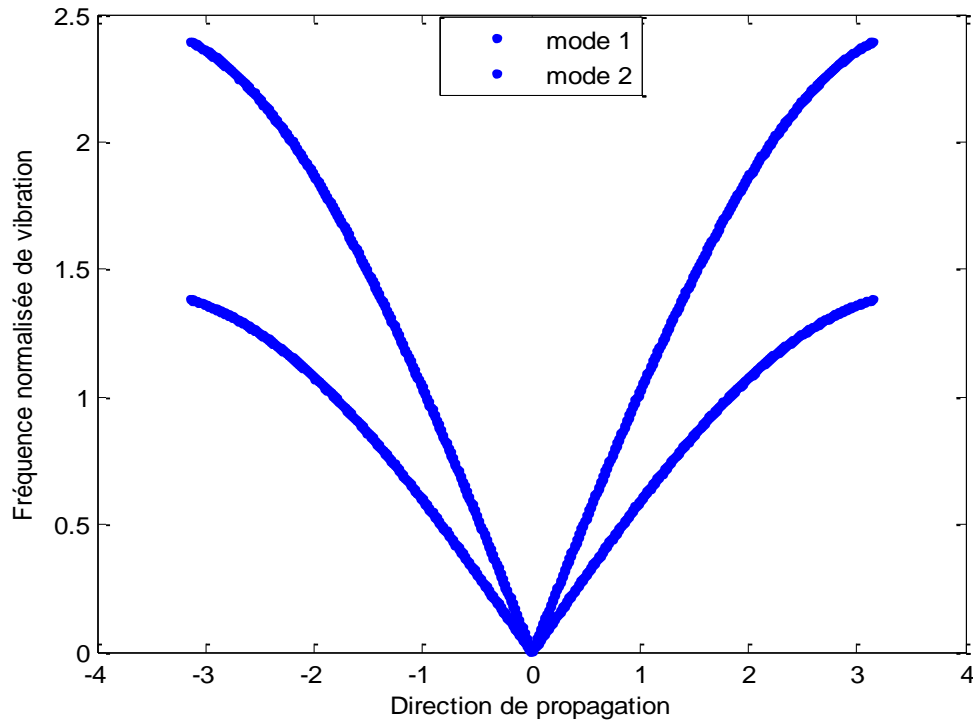
$|u\rangle$  : Le vecteur propre du déplacement atomique a 2 directions.

La résolution du problème aux valeurs propre de la matrice dynamique permet d'avoir les modes propres de propagations. Ce qui permet de tracer la courbe de dispersion.

- **IX. Courbes de dispersions**
- **IX.1. Courbe a deux dimensions**

La relation de dispersion est une fonction périodique de période  $2\pi/a$  toutes les informations des modes de vibrations sont contenues dans l'intervalle  $(-\pi/a, \pi/a)$ , on peut donc toujours se limiter à cet intervalle appelé première zone de Brillouin, le vecteur d'onde nulle  $k = 0$  correspond aux centre de la zone et les vecteur d'ondes  $k = \pm \pi/a$  correspond aux bords de la zone de Brillouin [16].

Nous présentons la dispersion au niveau d'un guide d'onde parfait dans une structure hexagonale à 2D.

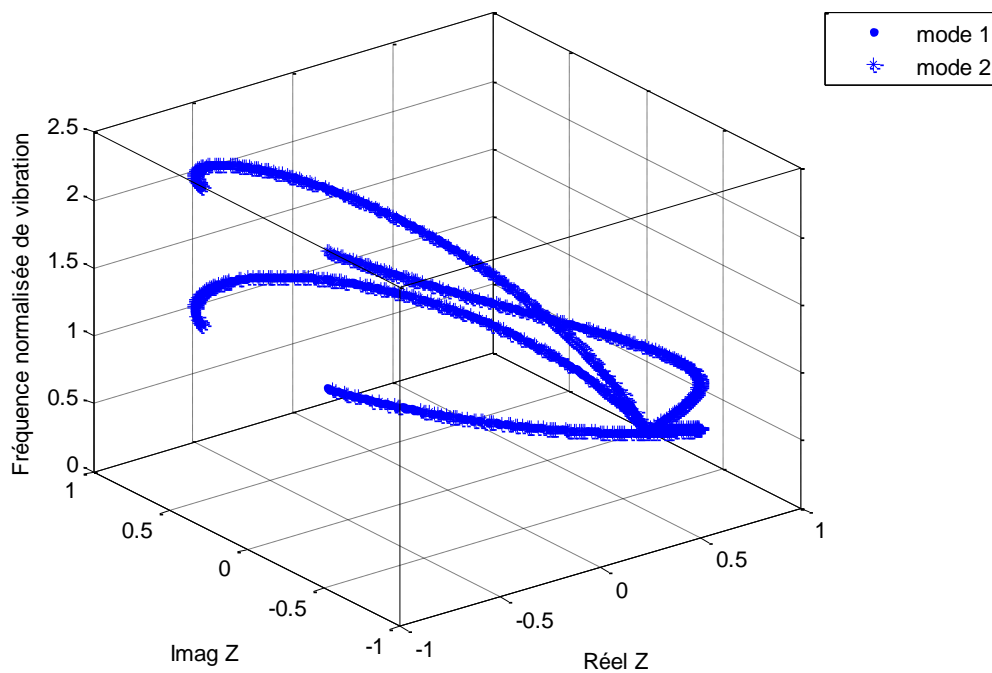


**Figure (I.4) : Coubre de dispersion en 2D.**

Dans le cas présent, la relation de dispersion possède deux branches distinctes, une branche transversale pour laquelle la vibration se propage perpendiculairement au mouvement des atomes et une branche longitudinale pour laquelle la direction de propagation de la vibration et les atomes sont colinéaire.

- **IX.2. Courbes à trois dimensions**

La représentation en 3D des trajectoires des facteurs de phases ( $Z$ ) en fonction de la fréquence permet d'avoir une vision plus complète des courbes de dispersion, on voit bien sur la figure (I.5) que la projection des courbes des solutions propageantes sur le plan complexe donne lieu à des cercles de rayon unitaire égale au module de ( $Z$ ).



**Figure (I.5) : courbe de dispersion en 3D.**

- **X. Vitesse de groupe**

La vitesse de groupe d'une onde de vibration est la vitesse du paquet d'ondes : elle correspond à la vitesse pour laquelle l'énergie ou l'information est transportée dans un milieu dispersif, sa formule globale est donnée par la relation :

$$\vec{V}_g = \overrightarrow{grad} [w(k)] \text{ soit : } V_g = \frac{\partial \Omega}{\partial k} \dots\dots\dots (I.11)$$

Ou :

$V_g$  : est la vitesse du groupe.

$\partial \Omega$ : la première dérivée de l'équation de mouvement.

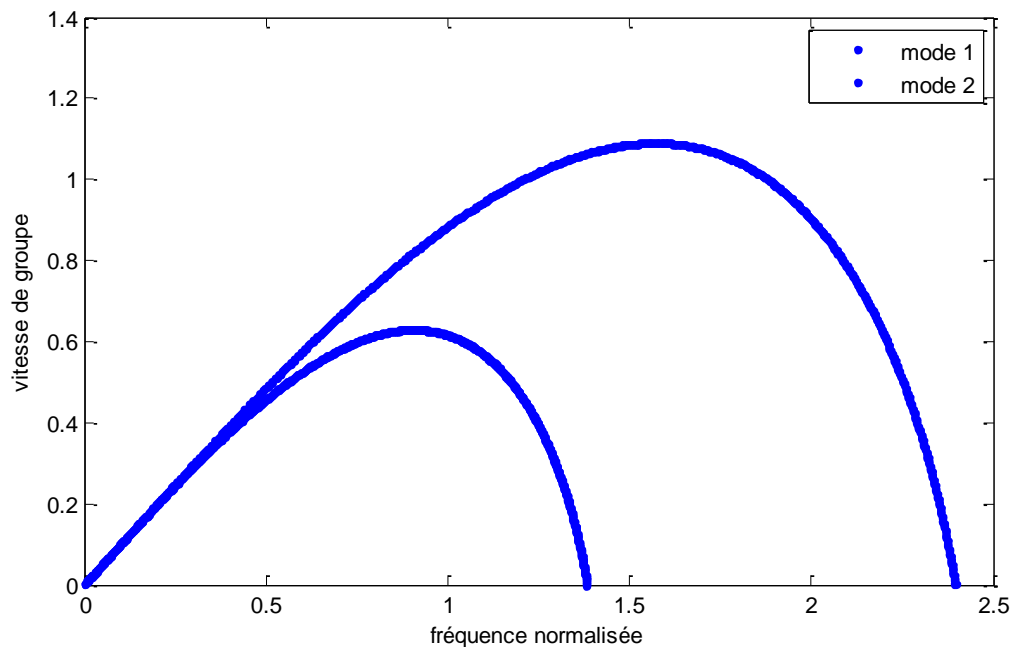
$\partial k$  : la dérivée de la constante de force.

Dans le cas où  $\vec{k}$  est complexe nous imposant une annulation de la vitesse de groupe, une valeur nulle ou négative de la vitesse signifie que dans certains cas que les ondes propagées sont devenues stationnaires (nulle) ou inverse à leur sens de propagation quand on change leur vecteur d'onde.

La forme matricielle de la vitesse de groupe est donnée comme suit :

$$\begin{bmatrix} \frac{3}{4} k_1 (Z_1 - Z_1^{-1})(Z_2 + Z_2^{-1}) & \frac{\sqrt{3}}{4} k_1 (Z_1 + Z_1^{-1})(Z_2 - Z_2^{-1}) \\ \frac{\sqrt{3}}{4} k_1 (Z_1 + Z_1^{-1})(Z_2 - Z_2^{-1}) & \frac{1}{4} k_1 (Z_1 - Z_1^{-1})(Z_2 + Z_2^{-1}) \end{bmatrix} \dots\dots\dots (I.12)$$

La vitesse du groupe  $\frac{\partial \Omega}{\partial k}$  de mode longitudinale pour le réseau parfait en fonction de la fréquence  $\Omega$  est représentée sur la figure (I.6).




**Figure (I.6) : Courbe de la vitesse de groupe.**

La vitesse de groupe est non nulle. Elle se reporte bien à celle des modes propageant conformément à la courbe de dispersion, et vitesse de groupe évoluant de la même manière. L'intervalle où  $V_g \neq 0$  se reporte bien à celui des modes propageant.



## Chapitre II

Transport de phonons via  
un joint atomique dans une  
structure hexagonale



- **I. Introduction**

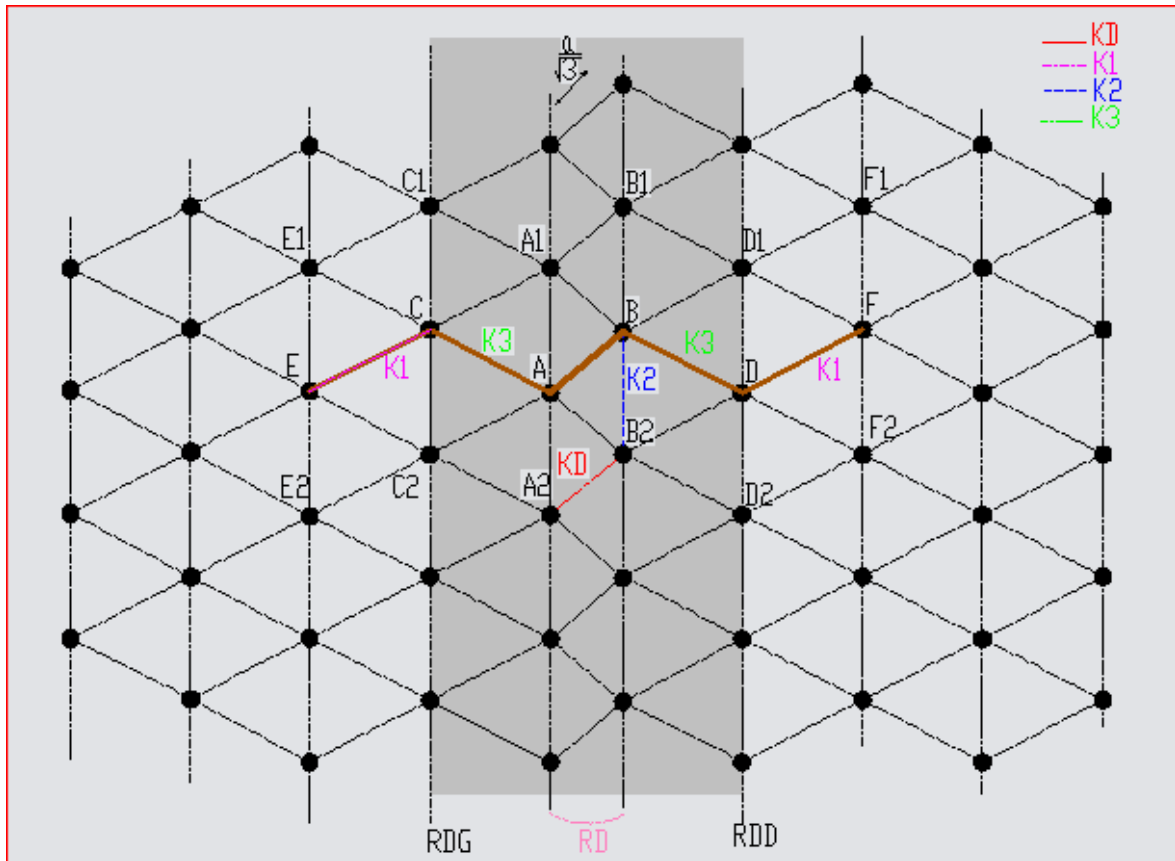
Le système complexe est caractérisé par le fait que sa dynamique résulte des interactions entre les composants élémentaires qui constituent un système. Ces interactions impliquent une modification de la fonction d'onde des niveaux énergétique permis. Il apparaît des niveaux d'énergie qui n'existent pas en volume et qui sont localisés au voisinage de l'interface.

L'étude dynamique d'un réseau perturbé permet d'avoir accès à un très grand nombre de ses propriétés élastiques et vibrationnelles.

Dans ce chapitre, nous décrivons la dynamique d'un réseau hexagonal à deux dimensions perturbé. Dans le but de déterminer certaines grandeurs vibrationnelle, une méthode dite de raccordement est utilisée.

- **II. Description du système modèle**

Un système perturbé est un système comportant un défaut, ce qui signifie que la symétrie du réseau est rompue, et que les conditions de Born Von Kerman ne sont plus applicables, autrement dit la brisure de symétrie rend difficile la résolution des équations du mouvement d'où la nécessité de faire appel à une méthode appropriée pour limiter le nombre d'inconnues et remédier au problème rencontré [17], le système modèle étudié est représenté sur la figure suivante :



**Figure (II.1) : Représentation schématique d'un joint atomique dans une structure hexagonale à deux D**

En utilisant la méthode de raccordement pour étudier ce système, qui va nous aider à décrire le mouvement de vibration des atomes par un nombre fini d'équations

- **III. Matrice dynamique du système perturbé**

La matrice dynamique d'un système perturbé est obtenue à partir des équations de mouvements des atomes situés dans la zone perturbée, ainsi que les atomes de raccordement. L'équation (I.4) donnée au chapitre I nous permet d'écrire les équations de mouvement suivant ( $ox$ ) et ( $Oy$ ) des atomes A, B, C et D qui se trouvent dans la zone de défaut représentés sur la figure (II.1).

**Site A**Suivant l'axe (ox):

$$\left(mw^2 - \frac{1}{2}k_d - \frac{3}{2}k_3\right)U_x(A) + \frac{1}{4}k_d(1 + z_2^{-1})U_x(B) + \frac{3}{4}k_3(1 + z_2^{-1})U_x(C) + \frac{3}{4\sqrt{3}}k_d(1 - z_2^{-1})U_y(B) - \frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2^{-1})U_y(C) = 0 \quad \dots\dots\dots (II.1)$$

Suivant l'axe (oy) :

$$\left(mw^2 - \frac{3}{2}k_d(z_2 + z_2^{-1} - 2)k_2 - \frac{1}{2}k_3\right)U_y(A) + \frac{3}{4}k_d(1 + z_2^{-1})U_y(B) + \frac{1}{4}k_3(1 + z_2^{-1})U_y(C) + \frac{3}{4\sqrt{3}}k_d(1 - z_2^{-1})U_x(B) - \frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2^{-1})U_x(C) = 0 \quad \dots\dots\dots (II.2)$$

**Site B**Suivant l'axe (ox):

$$\left(mw^2 - \frac{3}{2}k_3 - \frac{1}{2}k_d\right)U_x(B) + \frac{3}{4}k_3(1 + z_2)U_x(D) + \frac{1}{4}k_d(1 + z_2)U_x(A) - \frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2)U_y(D) + \frac{3}{4\sqrt{3}}k_d(1 - z_2)U_y(A) = 0 \quad \dots\dots\dots (II.3)$$

Suivant l'axe (oy):

$$\left(mw^2 - \frac{1}{2}k_3 + (z_2 + z_2^{-1} - 2)k_2 - \frac{3}{2}k_d\right)U_y(B) + \frac{1}{4}k_3(1 + z_2)U_y(D) + \frac{3}{4}k_d(1 + z_2)U_y(A) - \frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2)U_x(D) + \frac{3}{4\sqrt{3}}k_d(1 - z_2)U_x(A) = 0 \quad \dots\dots\dots (II.4)$$

**Site C**Suivant l'axe (ox):

$$\left(mw^2 - \frac{3}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3\right)U_x(C) + \frac{3}{4}k_3(1 + z_2)U_x(A) + \frac{3}{4}k_1(1 + z_2)U_x(E) - \frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2)U_y(A) + \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(1 - z_2)U_y(E) = 0 \quad \dots\dots\dots (II.5)$$

Suivant l'axe (oy) :

$$\left(mw^2 - \frac{1}{2}k_1 - \frac{1}{2}k_3 + (z_2 + z_2^{-1} - 2)k_2\right)U_y(C) + \frac{1}{4}k_3(1 + z_2)U_y(A) + \frac{1}{4}k_1(1 + z_2)U_y(E) - \frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2)U_x(A) + \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(1 + z_2)U_x(E) = 0 \quad \text{..... (II.6)}$$

### Site D

Suivant l'axe (ox):

$$\left(mw^2 - \frac{3}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3\right)U_x(D) + \frac{3}{4}k_3(1 + z_2^{-1})U_x(B) + \frac{3}{4}k_1(1 + z_2^{-1})U_x(F) - \frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2^{-1})U_y(B) + \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(1 - z_2^{-1})U_y(F) = 0 \quad \text{..... (II.7)}$$

Suivant l'axe (oy) :

$$\left(mw^2 - \frac{1}{2}k_1 - \frac{1}{2}k_3 + (z_2 + z_2^{-1} - 2)k_2\right)U_y(D) + \frac{1}{4}k_3(1 + z_2^{-1})U_y(B) + \frac{1}{4}k_1(1 + z_2^{-1})U_y(F) - \frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2^{-1})U_x(B) + \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(1 - z_2^{-1})U_x(F) = 0 \quad \text{..... (II.8)}$$

L'ensemble de ces équations de mouvements consistent à un système linéaire homogène qu'on peut mettre sous forme d'une matrice rectangulaire notée  $h$  :

$h =$

$$\begin{pmatrix} h(1,1) & 0 & h(1,3) & h(1,4) & 0 & 0 & h(1,7) & h(1,8) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h(2,2) & h(2,3) & h(2,4) & 0 & 0 & h(2,7) & h(2,8) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h(3,1) & h(3,2) & h(3,3) & 0 & h(3,5) & h(3,6) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h(4,1) & h(4,2) & 0 & h(4,4) & h(4,5) & h(4,6) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h(5,3) & h(5,4) & h(5,5) & 0 & 0 & 0 & h(5,9) & h(5,10) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h(6,3) & h(6,4) & 0 & h(6,6) & 0 & 0 & h(6,9) & h(6,10) & 0 & 0 \\ h(7,1) & h(7,2) & 0 & 0 & 0 & 0 & h(7,7) & 0 & 0 & 0 & h(7,11) & h(7,12) \\ h(8,1) & h(8,2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h(8,8) & 0 & 0 & h(8,11) & h(8,12) \end{pmatrix}$$

Les éléments de cette matrice sont :

$$h(1,1) : mw^2 - \frac{1}{2}k_d - \frac{3}{2}k_3$$

$$h(1,3) : \frac{1}{4}k_d(1 + z_2^{-1})$$

$$h(1,4) : \frac{3}{4\sqrt{3}}k_d(1 - z_2^{-1})$$

$$h(1,7) : \frac{3}{4}k_3(1 + z_2^{-1})$$

$$h(1,8) : -\frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2^{-1})$$

$$h(2,2) : mw^2 - \frac{3}{2}k_d + (z_2 + z_2^{-1} - 2)k_2 - \frac{1}{2}k_2$$

$$h(2,3) : \frac{3}{4\sqrt{3}}k_d(1 - z_2^{-1})$$

$$h(2,4) : \frac{3}{4}k_d(1 + z_2^{-1})$$

$$h(2,7) : -\frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2^{-1})$$

$$h(2,8) : \frac{1}{4}k_3(1 + z_2^{-1})$$

$$h(3,1) : \frac{1}{4}k_d(1 + z_2)$$

$$h(3,2) : \frac{3}{4\sqrt{3}}k_d(1 - z_2)$$

$$h(3,3) : mw^2 - \frac{3}{2}k_3 - \frac{1}{2}k_d$$

$$h(3,5) : \frac{3}{4}k_3(1 + z_2)$$

$$h(3,6) : -\frac{\sqrt{3}}{4}k_d(1 - z_2)$$

$$h(4,1): \frac{3}{4\sqrt{3}}k_d(1 - z_2)$$

$$h(4,2): \frac{3}{4}k_d(1 + z_2)$$

$$h(4,4): mw^2 - \frac{1}{2}k_3 + (z_2 + z_2^{-1} - 2)k_2 - \frac{3}{2}k_d$$

$$h(4,5): -\frac{\sqrt{3}}{4}k_d(1 - z_2)$$

$$h(4,6): \frac{1}{4}k_3(1 + z_2)$$

$$h(5,3): \frac{3}{4}k_3(1 + z_2^{-1})$$

$$h(5,4): -\frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2^{-1})$$

$$h(5,5): mw^2 - \frac{3}{2}k_3 - \frac{3}{2}k_1$$

$$h(5,9): \frac{3}{4}k_1(1 + z_2^{-1})$$

$$h(5,10): \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(1 - z_2^{-1})$$

$$h(6,3): -\frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2^{-1})$$

$$h(6,4): \frac{1}{4}k_3(1 + z_2^{-1})$$

$$h(6,6): mw^2 - \frac{1}{2}k_1 - \frac{1}{2}k_3 + (z_2 + z_2^{-1} - 2)k_2$$

$$h(6,9): \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(1 - z_2^{-1})$$

$$h(6,10): \frac{1}{4}k_1(1 + z_2^{-1})$$

$$h(7,1): \frac{3}{4}k_3(1 + z_2)$$

$$h(7,2): -\frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2)$$

$$h(7,7): mw^2 - \frac{3}{2}k_3 - \frac{3}{2}k_1$$

$$h(7,11): \frac{3}{4}k_1(1 + z_2)$$

$$h(7,12): \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(1 - z_2)$$

$$h(8,1): -\frac{\sqrt{3}}{4}k_3(1 - z_2)$$

$$h(8,2): \frac{1}{4}k_3(1 + z_2)$$

$$h(8,8): mw^2 - \frac{1}{2}k_1 - \frac{1}{2}k_3 + (z_2 + z_2^{-1} - 2)k_2$$

$$h(8,11): \frac{\sqrt{3}}{4}k_1(1 - z_2)$$

$$h(8,12): \frac{1}{4}k_1(1 + z_2)$$

La matrice dynamique H du système perturbé est une matrice rectangulaire pour laquelle on ne peut pas déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres.

#### • IV. Matrice de raccordement

Cette matrice nous permet de raccorder les déplacements atomique des sites qui appartenant à la zone de raccordement, au champ vibrationnel des deux guides d'ondes parfait [18].

Dans ce travail, Il ya deux régions de raccordement, une région située à droite et la seconde à gauche.

$R_1$ : utilisé pour l'étude du mouvement à gauche de l'interface.

$R_2$ : utilisé pour l'étude du mouvement à droite de l'interface.

Le vecteur  $|u\rangle$  constitue un vecteur de colonne décrivant les déplacements

vibrationnelles de tous les atomes d'une maille élémentaire de la zone considérée, elle peut se décomposer en deux parties :

- ✚ La première est notée par  $|irr\rangle$  : elle est constituée par les déplacements atomiques des 4 sites irréductibles (A, B, C et D) formant la région défaut (interface) uniquement
- ✚ La deuxième est  $|rac\rangle$  : est formée par les déplacements associés aux sites de raccordement (E, F) des deux zones de raccordement (gauche et droite).

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix}$$

$Dim |irr\rangle$  : Nombre d'atomes de l'interface fois deux degrés de liberté par chaque atome.

$Dim |rac\rangle$  : Nombre d'atomes de raccordement fois deux degrés de liberté par chaque atome.

On peut écrire la matrice dynamique comme suite :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} Id & 0 & 0 \\ 0 & R1 & 0 \\ 0 & 0 & R2 \\ 0 & R3 & 0 \\ 0 & 0 & R4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R_1\rangle \\ |R_2\rangle \end{pmatrix}$$

Avec :

$Id$ ,  $R1$ ,  $R2$ ,  $R3$  et  $R4$  sont des sous-matrices.

$Id$  : est une matrice identique, sa taille est  $(4 \times 4)$  elle dépend du nombre d'atomes des sites irréductibles  $\times$  degrés de liberté.

$R1$ ,  $R2$ ,  $R3$  et  $R4$  sont des sous-matrices, elles dépendent du nombre de mode de propagation du système parfait leur dimension est  $(2 \times 2)$ .

La matrice  $Rc$  de dimension  $(8 \times 12)$  est appelée matrice de raccordement.

### • V. Méthode de raccordement

Cette méthode a été introduite par Feutchwang lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini à 3D [10]. Elle a été reprise en 1987 par



- **VII. Calcul des grandeurs vibrationnelles**
- **VII.1. Détermination des coefficients de transmission et de réflexion**

A partir des équations de mouvement, on peut tirer facilement les informations concernant les probabilités de réflexion et de transmission [20]. En normalisant les coefficients de réflexion et de transmission notés  $r_{ii}$ ,  $T_{ij}$ , respectivement, on peut les calculer en utilisant les vitesses des groupes

$$r_{ii} = \frac{v'_i}{v_i} |R_{ii}|^2$$

$$T_{ij} = \frac{v_j}{v_i} |T_{ij}|^2$$

$V_i$  : la vitesse de groupe du mode propre  $i$ .

$R, T$  : facteurs complexes qui représentent la transmission et la réflexion.

La relation d'unitarité :  $\sum_i (t_i + r_i) = 1$ .

- **VII.2. Conductance phononique**

La conductance phononique noté  $\sigma(\Omega)$  est définie par :  $\sigma(\Omega) = \sum_{v,v'} (t_{vv'})$ .

La somme est effectuée sur tous les modes se propageant à la fréquence ( $\Omega$ ).

( $\Omega$ ) permet de regrouper les contributions de tous les modes en une seule courbe[6].

- **VIII. Résultat des simulations et discussions**
- **VIII.1. Transmission et réflexion**

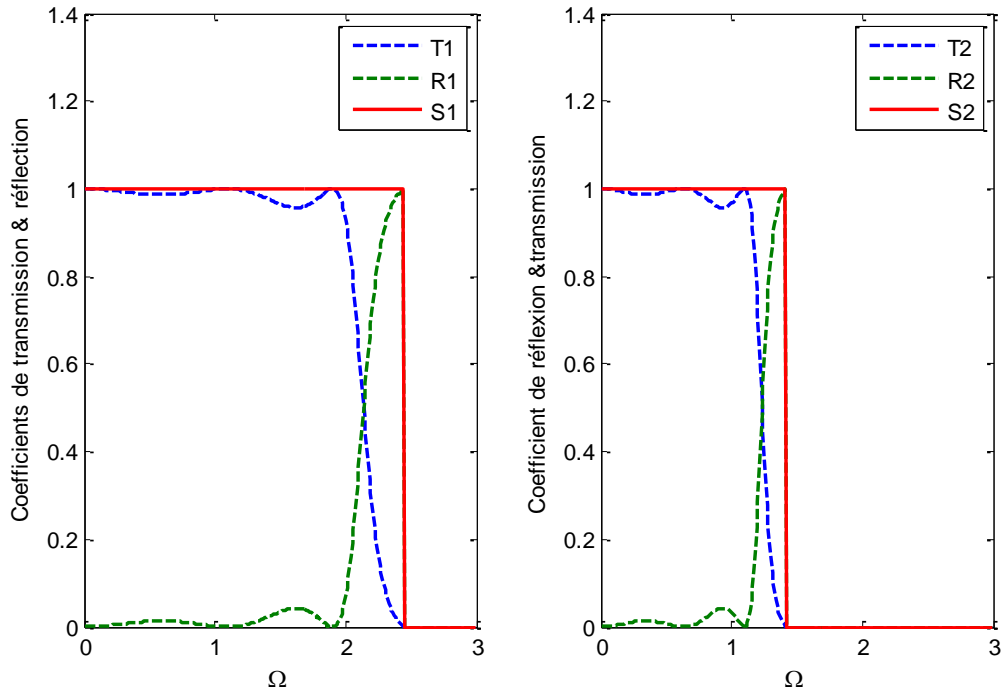
Les résultats de simulation des différentes valeurs de la constante de force  $k_d$  correspondant aux trois cas :

$k_d < k_1$  : adoucissement,

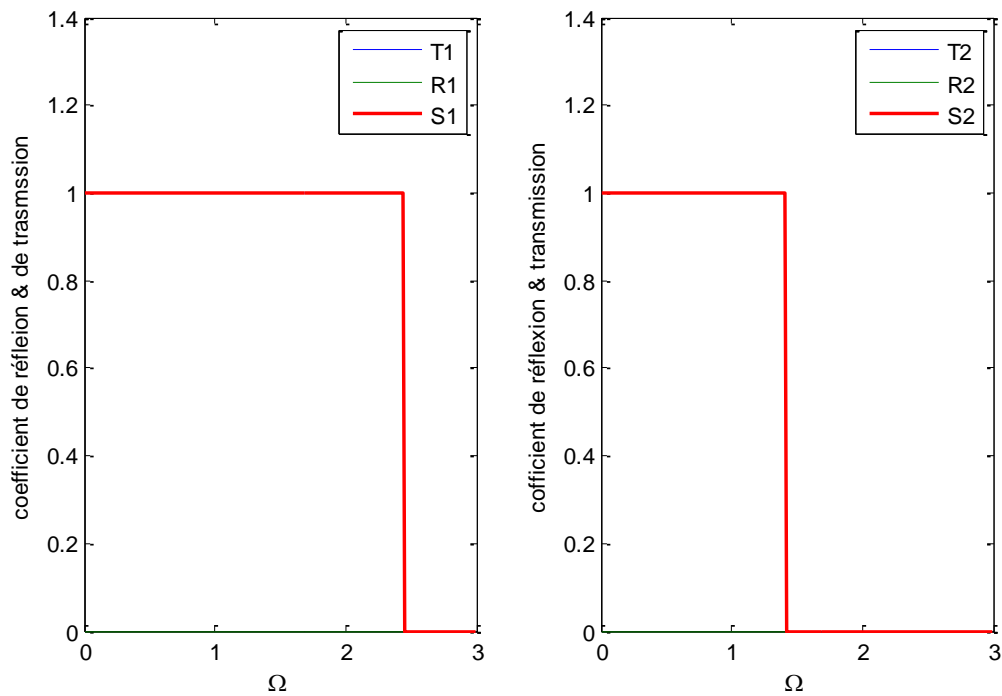
$k_d = k_1$  : homogène,

$k_d > k_1$  : durcissement.

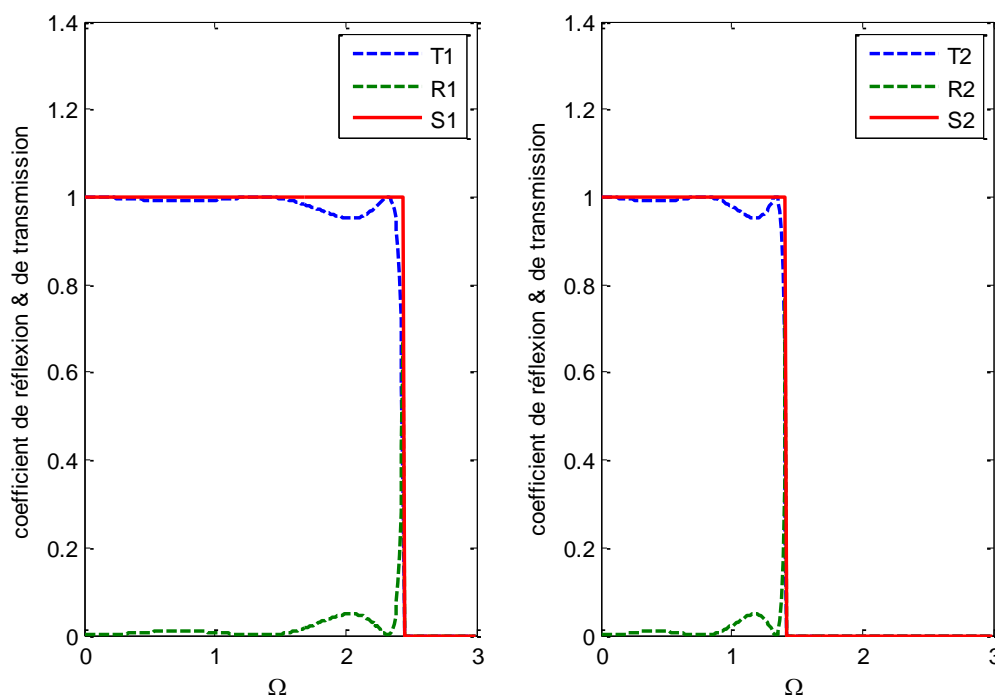
Ils sont illustrés sur la figure (II.3). Les courbes des coefficients de transmission et de réflexion en fonction de la fréquence normalisée  $\Omega$  sont données ci-après.



**Figure (II.3.a) : Adoucissement.**



**Figure (II.3.b) : Homogène.**



**Figure (II.3.c) : Durcissement.**

**Figure (II.3) : coefficient de réflexion et de transmission.**

On sait qu'il existe deux modes de vibration transversale et longitudinale, et les courbes existent sur la totalité du domaine de la plage de propagation  $[0, 2,5]$  1<sup>er</sup> mode et  $[0, 1,5]$  pour le 2<sup>ème</sup> mode. C'est le domaine où la vitesse de groupe sont non nulles.

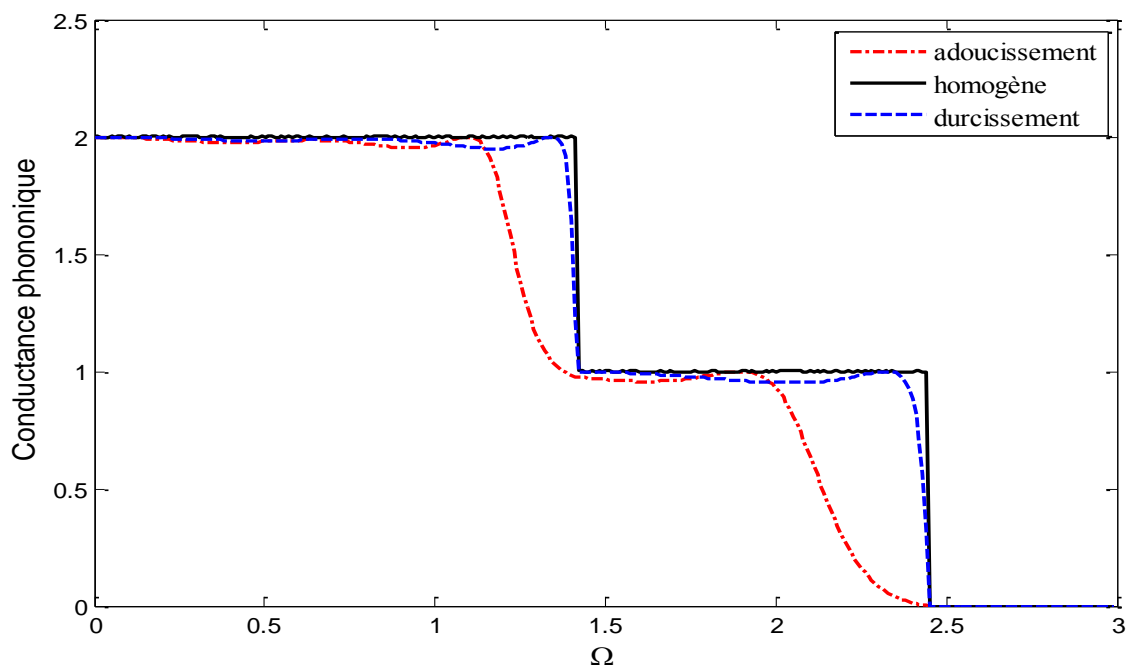
La condition (relation d'unitarité) sur les coefficients de transmission et de réflexion est vérifiée ( $t + r = 1$ ). Cette relation est utilisée pour contrôler la validité de nos résultats numériques. Nous constatons dans le cas d'adoucissement ( $k_d < k_1$ ) que la probabilité de transmission est maximale à ( $\Omega = 1,941$ ) pour le 1<sup>er</sup> mode et ( $\Omega = 1,121$ ) pour le 2<sup>ème</sup> mode. Pour le cas de durcissement ( $k_d > k_1$ ) la probabilité de transmission maximale est décalée vers les hautes fréquences, en comparant au cas d'adoucissement pour le 1<sup>er</sup> mode ( $\Omega = 2,331$ ) et pour le 2<sup>ème</sup> mode ( $\Omega = 1,341$ ). Dans le cas homogène, la transmission est totale sur tout l'intervalle de propagation. On conclut que c'est l'effet combiné des constantes qui provoque la diminution de la transmission. On constate que la probabilité de transmission est maximale aux basses fréquences, puis elle diminue avec l'augmentation de l'énergie de

diffusion. On peut dire que l'augmentation des valeurs des constantes de force consiste à repousser les oscillations vers des fréquences plus importantes.

### • VIII.2. Conductance phononique

La conductance phononique n'est autre que la somme des transmissions des modes de propagation à la fréquence ( $\Omega$ ). Elle est accessible expérimentalement puisqu'on est capable d'exciter et de détecter des vibrations à une fréquence donnée, l'inconvénient est qu'on ne peut avoir d'informations détaillées de l'origine du mode phononique. Pour les trois cas de la constante de force ( $k_d$ ), nous avons tracé la conductance phononique  $\sigma(\Omega)$  représenté en figure (II.4) dans le but de montrer les modifications induites par l'existence des inhomogénéités.

Nous avons tracé la conductance du guide d'onde parfait sur la même courbe.  $\sigma$  est un entier qui donne le nombre de modes propageant à la fréquence ( $\Omega$ ) considérée.



**Figure (II.4) : Conductance phononique du réseau perturbé à deux dimensions.**

Les trois courbes correspondantes aux trois environnements élastiques sont pratiquement confondues jusqu'à la valeur ( $\Omega = 1,4$ ). Les résultats numériques montrent

que le spectre de conductance commence par des valeurs maximales à basses fréquences et décroît avec l'augmentation de l'énergie de diffusion et devient alors nulle à la limite de la zone de Brillouin.

- **VIII.3 Les états localisés**

Le modèle est appliqué aussi pour calculer numériquement les énergies d'états vibratoires localisés au voisinage du domaine de nano-jonction entre deux réseaux à 2D hexagonaux. Ces états démontrent les caractéristiques essentielles des modes d'interface d'ondes élastiques et l'influence des paramètres d'interaction zone parfaite-interface sur les modes localisés des phonons à l'interface. Ces états représentent l'évolution des relations de dispersion des phonons localisés au niveau de l'interface. Les figures ci-dessous illustrent les états localisés de la structure hexagonale à 2D dans trois cas d'environnement relatif à la valeur de la constante de force :

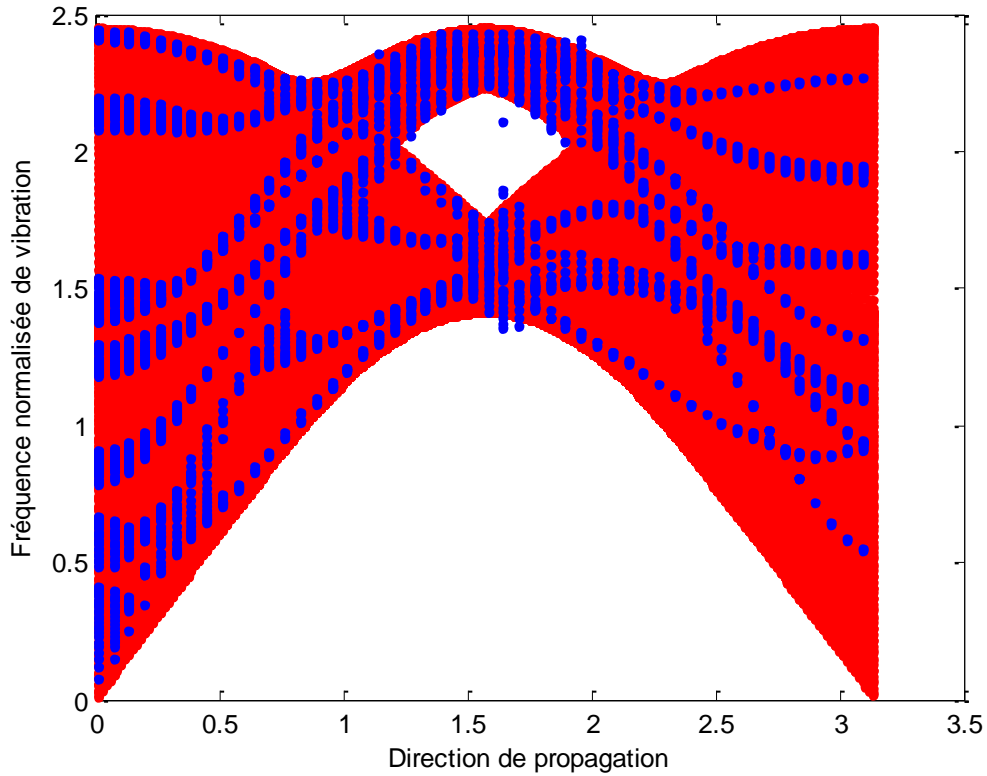
$k_d = k_1$ : cas homogène.

$k_d < k_1$ : cas d'adoucissement.

$k_d > k_1$ : cas de durcissement.

- **VIII.3.a. Cas homogène**

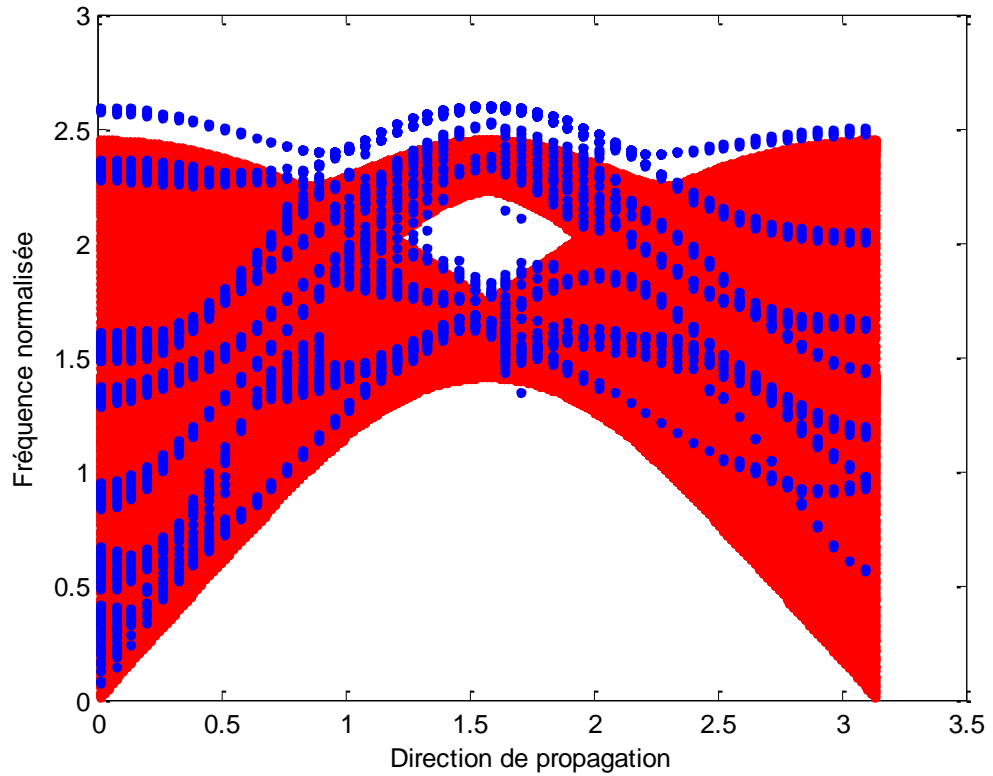
Notons que dans le cas homogène, il n'existe pas d'états localisés comparant à la bande de phonons en volume. Les interactions sont prises les mêmes partout.



**Figure (II.5) : Représente les états localisés dans le cas homogène.**

- **III.3.b. Cas de durcissement :**

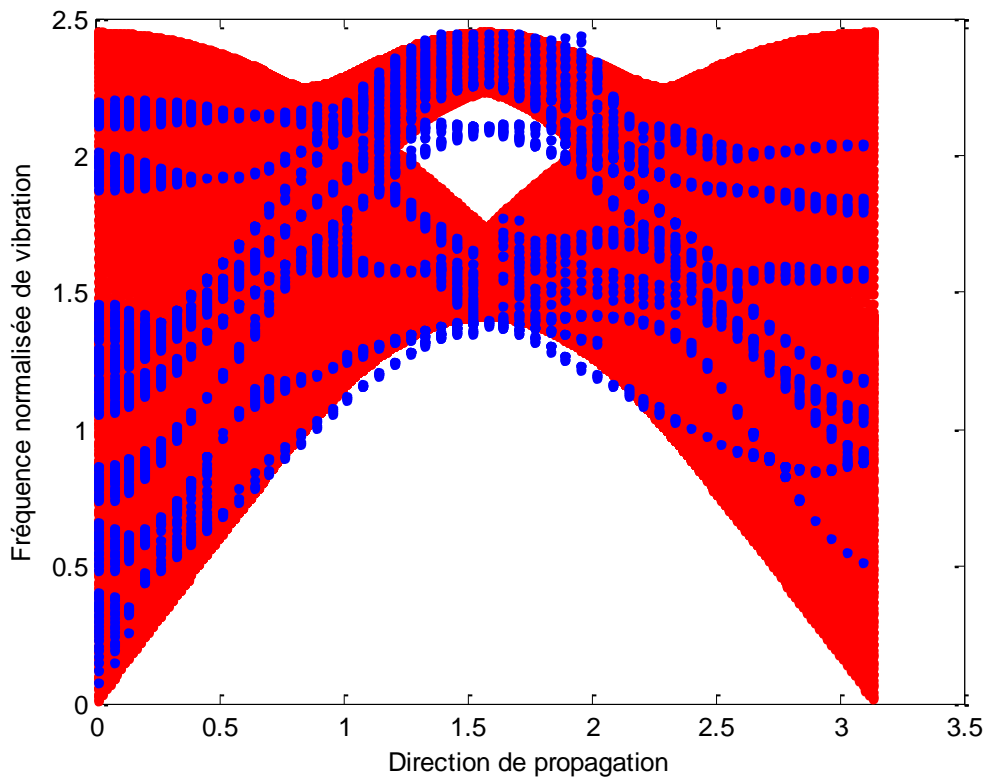
La courbe représenté en figure (II.6), nous montre l'apparition de deux branche de phonons localisés au dessus de la bande de phonon du volume ; les branches sont optiques et plus énergétique que les phonons du volume.



**Figure (II.6) : États localisés dans le cas de durcissement.**

- **VIII.3.c. Cas d'adoucissement**

Pour les basses fréquences situées au-dessous de la bande passante, nous remarquons une branche d'état localisé moins énergétique que celles de des phonons en volume. On distingue quelques états localisés dans au centre de la bande passante.



**Figure (II.7) : représente les états localisés dans le cas d'adoucissement.**

Motionnons que sur la figure (II.7) le cas où l'interaction de la constante de force au niveau du domaine d'interface est plus petite que les réseaux hexagonaux parfaits (cas d'adoucissement) alors que sur la figure (II.5), cas homogène, les interactions sont présentes et sont les mêmes partout. Dans le cas durcissement représenté sur la figure (II.6), l'interaction de force au niveau du domaine d'interface est plus grande que le cas parfait. Dans tous les cas de l'interaction de forces examinées, nous observons le déplacement des états de vibrations localisés vers des fréquences plus élevées avec l'augmentation de la constante élastique ( $k_d$ ).



# Conclusion générale



## Conclusion Générale

Nous avons expliqué la méthode qui permet de décrire le mouvement des atomes dans une structure hexagonale à deux dimensions en présence d'interface. Nous avons représenté en détails la façon d'obtenir une matrice dynamique dans le cas parfait et dans le cas perturbé. Ces matrices sont introduites dans un programme pour déterminer les différentes grandeurs vibrationnelles. L'étude de la dynamique du réseau parfait sert de base à la description du réseau perturbé.

Après la détermination des différents modes propres du système et la vitesse du groupe ; nous avons représenté les facteurs de réflexion et de transmission dus à la diffusion des phonons, cette étude est effectuée pour trois possibilités d'environnement, élastique à savoir : le cas d'adoucissement ( $k_d < k_1$ ) , le cas homogène globale du système ( $k_d = k_1$ ) et enfin le cas de durcissement ( $k_d > k_1$ ).

Les états localisés au niveau de l'interface pour les trois cas de différentes valeurs de la constante de force sont représentés. Notre objectif en faisant varier cet environnement est d'accéder aux effets nono-mécaniques sur la nano-contact. Enfin, la courbe de la conductance totale est tracée.



# Références bibliographiques



### Références bibliographiques

- [1] F. Lekadir, Thèse de Doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2017).
- [2] O. Nafa, B. Bourahla, Computational condensed matter 16.1-7 (2018).
- [3] T.E. Feucht wang. Phys. Rev. 155.731 (1967).
- [4] J. Szeftel and A. khater , J. phys. C : Solid st. Phys. 20.4725 (1987).
- [5] H. Grimech and A. Khater. Surf. Sei. 323 (1995).
- [6] M. Boucherrab, These doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2015).
- [7] Frenkel .J. Wave mechanics .ed T.i.s.o.m.o physics .1936 : oxford university press.
- [8] L.Richard, L. Weaver, I. O. Lobkis, J. Acoustical Society of America 113, 2611 (2003).
- [9] A. Micheal and Dutta Mitra, Phonons in Nanostructure, Cambrige(2004).
- [10] B. Bourahla, Thèse de Doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2007).
- [11] A. A. Maradudin, E. W. Montroll, and G. H. Weiss , Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation.(Academic Press New York and London, 1971).
- [12] A. Chikh, Mémoire de Master, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2016).
- [13] A. A. Maradudin, E. W. Montroll, and G. H. Weiss , Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation.(Academic Press New York and London, 1963).
- [14] B. Balosso, Thèse de Doctorat, Université de Toulouse, France (2014).
- [15] C.kittel, Introduction à La Physique de l'état Condensé, Dunot édition (1995).
- [16] R. Laundauer, J. phys. Condensed Matter, 1, 899 (1989).
- [17] O.Nafa, Memoire Magister, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2010).
- [18] G. Belkacemi, memoire de master, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2012).
- [19] A. Khater, N. Auby and R.F. Wallis, physica. B.168,273 (1991).
- [20] D. Zerirgui, R. Tigrine and B. Bourahla, J. appl. Phys. 111,044907 (2012).

## Résumé

Dans ce travail, un modèle simple a été présenté afin de déterminer certaines grandeurs vibrationnelles de la nano-jonction d'interface dans un réseau hexagonal à deux dimensions. Cette étude est basée sur l'application de la méthode théorique dite de raccordement dans le cadre de l'approximation harmonique en utilisant un modèle de forces centrales. Les résultats numériques ont permis de comprendre la relation entre la propagation de l'onde élastique et la forme géométrique du domaine d'interface dans le réseau à deux dimensions parfait. De plus, l'analyse des états localisés, des coefficients de transmission/réflexion et la conductance phononique de l'ensemble des sites irréductibles dans le domaine perturbé ont démontré les caractéristiques essentielles des modes d'interfaces d'ondes élastiques et l'influence des paramètres d'interaction, zone parfaite-interface sur les modes localisés des phonos à l'interface.

Mots clés : grandeur vibrationnelle, raccordement, réseau hexagonal, 2D, parfaite-interface, nano-jonction.

## Abstract

In this work, a simple model is presented to determine some vibrational quantities of the interface nano-junction in a two-dimensional hexagonal lattice. This study is based on the theoretical method application known as connection in the harmonic approximation using a model of central forces. The numerical results showed the relationship between elastic wave propagation and the geometric shape of the interface domain in the perfect two-dimensional lattice. In addition, the analysis of localized states, transmission/reflection coefficients and phononic conductance of all irreducible sites in the disturbed domain have demonstrated that the essential characteristics of the elastic wave interface modes and the influence of the parameters has perfect zone-interface interaction on the localized modes of the phonos at the interface.

**Keywords:** vibrational quantity, connection, hexagonal network, 2D, perfect-interface, nano-junction