

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI DE TIZI OUZOU



FACULTE : DES SCIENCES

DEPARTEMENT : DE PHYSIQUE

MEMOIRE DE MASTER

SPECIALITE : PHYSIQUE

OPTION : PHYSIQUE DE LA MATIERE DE DIMENSIONALITE REDUITE

Présenté par :

Ghania BELKACEMI

Sujet :

***Effet de positionnement d'un îlot atomique sur la
dynamique d'une surface***

Soutenu le : **02/09 / 2012**

Devant la commission d'examen composée de :

Pr Rachid Tigrine	Professeur (Université M. Mammeri)	Président
Dr Boualem Bourahla	Maître de Conférences (Université M. Mammeri)	Rapporteur
Dr Rabah Chadli	Maître de recherche (Université M. Mammeri)	Examineur
Dr Leila Messad	Maître de recherche (Université M. Mammeri)	Examinatrice

Remerciements

A mon promoteur Mr Boualem Bourahla

Maître de Conférences (Université M. Mammeri)

Pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de diriger ce mémoire, pour vos précieux conseils, votre disponibilité et votre enseignement.

Veuillez trouver ici le témoignage de mon plus profond respect, et ma plus vive reconnaissance.

A Mr Rachid Tigrine

Professeur (Université M. Mammeri)

Pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury, j'exprime mes profonds remerciements.

A Melle Leila Messad et Mr Rabah Chadli.

2^{es} J'adresse toute ma reconnaissance pour avoir accepté de faire partie de mon jury.

A mes parents.

Je voudrais exprimer ma gratitude la plus profonde pour leur soutien et leur encouragement.

A toute ma famille.

Je dédie ce modeste travail.

Une attention particulière a mon mari, à ma petite Sandra et a mes deux petits bouts de chou Nor et Yani que je remercie pour leurs preuves d'amour et de patience.

Ghania Belkacemi

TABLE DES MATIERES

Introduction	4
Chapitre I : Etude dynamique des surfaces atomiques	7
Partie I : Generalités sur les surfaces atomiques	7
Introduction.....	7
I.1. Classification des surfaces	7
I.2. Réseaux à deux dimensions	8
I.3. Cristal semi infini	9
a. La relaxation	9
b. La reconstruction	10
I.4. Notation pour les structures de surfaces	10
I.5. Techniques de caractérisation structurales.....	11
1. Microscopie a effet tunnel.....	11
2. Microscopie à force atomique	12
3. Autres techniques de caractérisation des surfaces.....	12
Partie II : Dynamiques des surfaces atomiques	13
Introduction	13
II.1. Dynamique des vibrations cristallines dans les systèmes ordonnés	13
II.2. Méthodes théoriques utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle	16
1. Méthode de diagonalisation directe (Slab method).....	16
2. Méthode des fonctions de Green	17
3. La méthode de raccordement	17
II.3. Calcul des grandeurs physiques.....	20
1. Probabilités de transmission et de réflexion	20
2. La conductance phononique.....	21
Chapitre II : Impact des îlots atomiques sur la diffusion d'ondes elastiques dans une surface	22
Introduction.....	22
II.1. Description du modèle parfait	22
a. Equations de mouvement	23
b. Courbe de dispersion.....	24
c. Discussion	25
II.2. Les vitesses de groupe	26
II.3. Calcul des facteurs de phase.....	27
II.4. Etude de la diffusion dans le système perturbé	28
a. Description du modèle.....	28
b. Matrice dynamique du système	29
c. Matrice de raccordement	29
A/ La pointe est au dessus d'un atome de la surface : position Top	31
- Courbes des coefficients de transmission, réflexion et de la conductance.....	31
1/ Masse légère.....	32
2/ Masse homogène.....	33
3/ Masse lourde	35
4/ Discussion des résultats.....	36
B/ La pointe est entre deux atomes proches voisins de la surface : position Bridge.....	37
- Courbes des coefficients de transmission, réflexion et de la conductance	37
1/ Masse légère.....	37
2/ Masse homogène	39

3/ Masse lourde	40
4/ Discussion des résultats.....	41
C/ La pointe est au centre de quatre atomes de la surface : position Hollow.....	43
- Courbes des coefficients de transmission, réflexion et de la conductance.....	43
1/ Masse légère.....	43
2/ Masse homogène.....	45
3/ Masse lourde	46
4/ Discussion des résultats.....	47
Conclusion & perspectives.....	49
Références	50

Introduction

En 1959, Richard Feynman évoquait lors de l'un de ses discours [1], un domaine de recherche possible alors inexploré : l'infiniment petit.

Feynman envisagea un aspect de la physique « dans lequel peu de choses ont été faites, et dans lequel beaucoup reste à faire ». Se fondant sur la taille minuscule des atomes, il considère comme possible d'écrire de grandes quantités d'informations sur de très petites surfaces. Ces affirmations qui n'étaient pas alors spécifiquement relevées, sont de nos jours, parfaitement réalisables grâce aux progrès faramineux des nanotechnologies [2-4]. Celles-ci connurent un grand essor à partir des années quatre vingt avec l'invention du microscope à effet tunnel (en 1981), puis du microscope à force atomique, découvert en 1985.

La diminution de la taille des composants, issue essentiellement des progrès de la microélectronique puis de la nanoélectronique permet, la réduction de la consommation énergétique, l'augmentation des performances (capacité de stockage, transfert de l'information, rapidité de fonctionnement des dispositifs électroniques et systèmes physiques, ...), et conduit à l'apparition de nouvelles fonctionnalités qui s'observent pour des tailles critiques. Cette diminution de taille s'accompagne d'une réduction du volume des matériaux mis en jeu. Ainsi, des effets qui étaient considérés comme négligeables deviennent prépondérants, et la connaissance de plus en plus précise des propriétés surfaciques des matériaux devient un enjeu majeur [5].

La science des basses dimensionnalités et des Nanos, constitue le domaine de convergence de plusieurs disciplines scientifiques, dont la science des surfaces. Cette dernière joue un rôle capital, puisqu'elle permet l'élaboration de nanostructures à géométrie parfaitement contrôlée [6].

Toutefois, même lorsqu'elles sont bien préparées, les surfaces cristallines présentent plusieurs types de défauts [7] (ponctuels, structuraux, ...). L'état morphologique de la surface se présente donc généralement sous la forme d'une distribution de marches et de terrasses atomiques, de hauteurs variées, ainsi que de différents types de défauts localisés, tels que des adatoms, adlacunes et des puits atomiques, etc.

La caractérisation et l'étude expérimentale de ces nanostructures se font par des techniques expérimentales, qui diffèrent selon que les structures soient périodiques ou non. Dans le cas de structures périodiques, on a recours à la diffraction des photons ou d'électrons, tandis que dans le cas des structures apériodiques, l'EXAFS de surface, la microscopie à

effet tunnel (S.T.M), [8], et à force atomique (A.F.M), [9], permettent de recueillir des informations sur la structure locale, au voisinage d'un point particulier de la surface, ou au voisinage d'un type d'atomes particulier. Ce mode d'observation permet alors, de réaliser la cartographie locale des grandeurs physiques caractéristiques de l'échantillon sondé (force, capacité, intensité de rayonnement, courant,...). Mais la présence d'une pointe AFM, n'est pas sans conséquences sur les propriétés physiques de l'échantillon considéré. C'est ce que nous tenterons d'étudier dans ce mémoire, où l'on se penchera sur l'effet de positionnement d'une pointe, modélisée par des îlots atomiques, sur la dynamique d'une surface. Ces îlots sont traités comme des défauts atomiques. Leur présence sur la surface d'un matériau, induit une modification des propriétés physiques en général, et des propriétés dynamiques en particulier.

Pour comprendre le comportement dynamique de ces surfaces en présence des îlots atomiques, on utilisera la simulation numérique. L'approche quantique étant très couteuse en temps de calcul, et réservée à des systèmes contenant un nombre réduit d'atomes, on utilisera par conséquent l'approche basée sur la dynamique vibrationnelle classique de Newton, dans l'approximation des vibrations harmoniques [10]. Le système considéré est un plan carré infini, où les atomes sont supposés interagir entre-eux selon le modèle des forces centrales, s'étendant aux premiers et seconds voisins.

Pour rendre compte de notre démarche théorique dans notre manuscrit, nous avons opté pour la présentation suivante :

La première partie du premier chapitre est réservée à un bref aperçu sur les définitions des surfaces, les techniques de leur caractérisation et une description globale des phénomènes vibratoires des cristaux ordonnés ; nous décrirons, dans la deuxième partie, la méthode exploitée dans notre modélisation, pour l'étude de la diffusion d'ondes élastiques de faible amplitudes par les îlots atomiques, à savoir la méthode de raccordement. Pour terminer ce chapitre, on étudiera la dynamique d'une surface parfaite à maillage carré. Nous tracerons les courbes de dispersion des phonons, ainsi que les vitesses de groupes qui seront utilisées dans le chapitre suivant pour la normalisation des grandeurs physiques qui seront calculées.

Dans le deuxième chapitre, nous avons calculé la conductance phononique et la diffusion d'ondes élastiques dans une surface, en fonction de la position de l'atome qui assure le contact ponctuel entre l'îlot (déposé) et les sites atomiques de la surface.

Nous avons examiné trois différentes possibilités de positionnement du point contact en surface. La première correspond à la situation où la pointe de l'îlot est au-dessus d'un site de la surface (Top) ; dans le deuxième cas, la pointe est placée entre deux atomes successifs (Bridge). Le troisième cas décrit la situation où la pointe est placée au centre de quatre atomes de la surface (Hollow).

Pour chaque configuration, on déterminera les parties transmise et réfléchie de l'onde incidente, la conductance phononique dans la région perturbée et leur évolution en fonction de la masse des atomes de l'îlot, et des constantes de force qui les relie au réseau carré. Les discussions et les interprétations des résultats sont également données au fur et à mesure.

Au terme de ce mémoire, nous présenterons une conclusion générale qui résumera les principaux résultats obtenus, ainsi que les perspectives offertes dans le domaine.

Chapitre I

Etude dynamique des surfaces atomiques

Partie I : Généralités sur les surfaces atomiques

Introduction

Une surface cristalline est obtenue en coupant un cristal suivant un plan cristallographique bien défini (nommé par ses indices de Miller) [11], ce qui fixe son orientation macroscopique. C'est une région s'étendant sur quelques distances atomiques qui sépare l'intérieur du matériau du milieu extérieur : en général, le vide ou un gaz. Si le milieu extérieur est une autre phase dense, liquide ou solide, on parle plutôt d'interface entre les deux milieux. Les propriétés physiques et chimiques, structurales et électroniques des surfaces diffèrent notablement de celles du matériau massif : elles évoluent plus ou moins rapidement vers celles du volume, lorsqu'on s'éloigne de la surface vers l'intérieur du matériau. La région frontière est le lieu de phénomènes spécifiques dont l'étude remonte au XIX^e siècle, avec l'introduction de la notion de tension superficielle par Laplace.

I.1. Classification des surfaces

Le cristal parfait est un modèle idéal, dans lequel les motifs atomiques ou moléculaires sont empilés de manière régulière et infinie formant un réseau tri-périodique.

Dans la réalité, tout cristal présente des défauts par rapport à ce modèle idéal, le premier étant la surface extérieure de ce cristal.

Cette modification de la surface extérieure est due au fait que les atomes au bord du cristal ne subissent pas les mêmes forces que les atomes au centre de la maille cristalline et du cristal lui-même, amenant une déformation de la surface extérieure par rapport au "modèle parfait". Lors de la croissance du cristal, les motifs passent de la phase vapeur (ou liquide) à la surface, ou ils sont incorporés de façon différentes selon le type de face. On distingue trois types de surfaces cristallines (figure (I.1)) selon leurs propriétés d'incorporation. Certaines faces sont plates à l'échelle atomique et ne possèdent pas de site d'incorporation facile. Ce sont les faces F (flat surfaces). D'autres faces sont formées de terrasses planes séparées par des marches de hauteur atomiques qui représentent des sites d'incorporation lors de la croissance. Elles sont appelées faces S (stepped surfaces). Le dernier type de

faces est le type K (kinked surfaces) qui sont des surfaces rugueuses comportant un grand nombre de crans, permettant une incorporation facile [7].

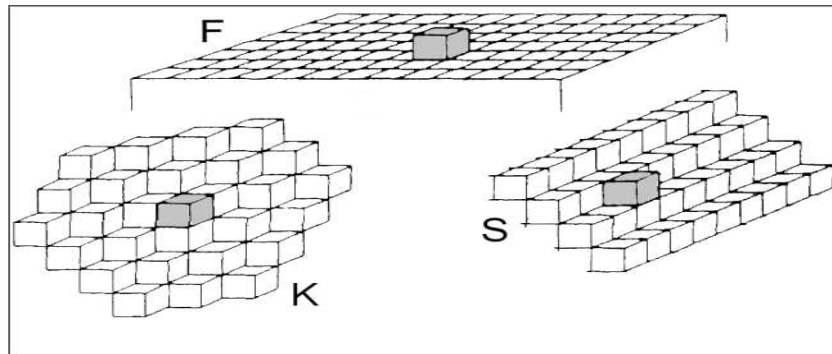


Figure (I.1) : Différents types de faces selon le modèle de Kossel [7].

Donc, à l'échelle microscopique, la surface présente une combinaison de ces différents types de faces, où l'on peut détecter la présence de divers défauts ponctuels. C'est le modèle TLK (Terasse, Ledge, Kink) comme le montre la figure (I.2).

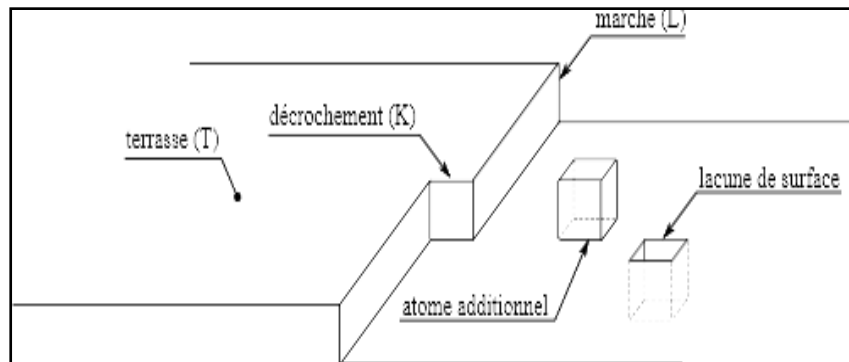


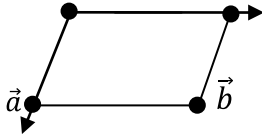
Figure (I.2) : Modèle de surface TLK.

En coupant le cristal selon un plan faisant un angle de quelques degrés avec le plan dense, on obtient une succession de terrasses et de marches de hauteur monoatomique connue sous le nom de surfaces vicinales.

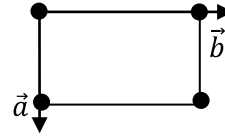
I.2. Réseaux à deux dimensions

La périodicité engendre un groupe de symétrie constitué des opérations de translation et de rotation laissant le réseau de Bravais invariant. Si le nombre de réseaux est infini, puisqu'à chaque valeur des paramètres il correspond un réseau différent, le nombre de « types » de réseaux est fini. Le type d'un réseau étant défini par son groupe de symétrie bidimensionnelle, la surface peut appartenir à cinq types de réseaux de Bravais (figure (I.3)) : carré, rectangulaire, rectangulaire centré ou losange, hexagonal, ou oblique

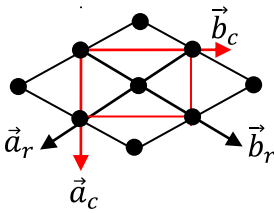
(quelconque). Les modes de réseau possibles sont les modes primitif (p) et centré (c). Ces réseaux peuvent être décrits par un choix de deux vecteurs $(\vec{a}, \vec{b})$ faisant un angle α entre eux.



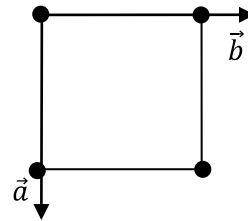
- Réseau oblique : $a \neq b, \alpha \neq 90^\circ$



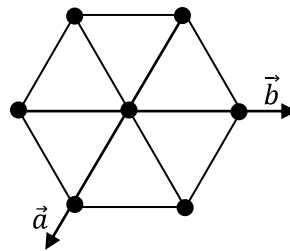
- Réseau rectangulaire : $a \neq b, \alpha = 90^\circ$



- Réseau rectangle centré : $a \neq b, \alpha = 90^\circ$



- Réseau carré : $a = b, \alpha = 90^\circ$



Réseau hexagonal : $a = b, \alpha = 120^\circ$.

Figure (I.3) : Les cinq réseaux de Bravais à 2D.

I.3. Cristal semi infini

La nécessité de minimiser l'excès d'énergie superficielle produit par la coupure de liaisons, lors de la création de la surface, conduit au réarrangement géométrique des atomes à la surface d'un solide cristallin. Ce réarrangement peut être des relaxations ou des reconstructions.

a. La relaxation

Elle est caractérisée par une modification de la distance interplan de surface. Elle se manifeste par un léger déplacement des atomes perpendiculairement à la surface. Cette relaxation de surface est soit positive (augmentation de la distance), soit négative (diminution de la distance), selon le matériau et le type de face du cristal. Il peut s'agir aussi d'un déplacement latéral ou d'une rotation de toute la couche. Ce phénomène est illustré sur la figure (1.4).

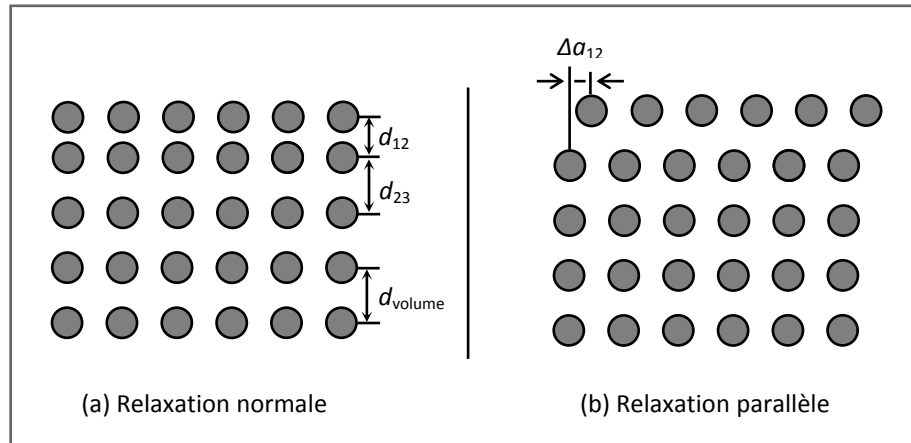


Figure (1.4) : Illustration schématique de la relaxation :
 (a) normale,
 (b) parallèle dans la couche atomique extérieure d'un cristal semi- infini.

b. La reconstruction

On rencontre aussi de nombreux cas où le réarrangement se produit dans la direction parallèle à la surface .On dit que la surface est reconstruite. La reconstruction conservative est le cas où la densité du nombre d'atomes en surface est conservée, la reconstruction non-conservative [12], est le cas où la densité du nombre d'atomes en surface n'est pas conservée comme le montre la figure (1.5).

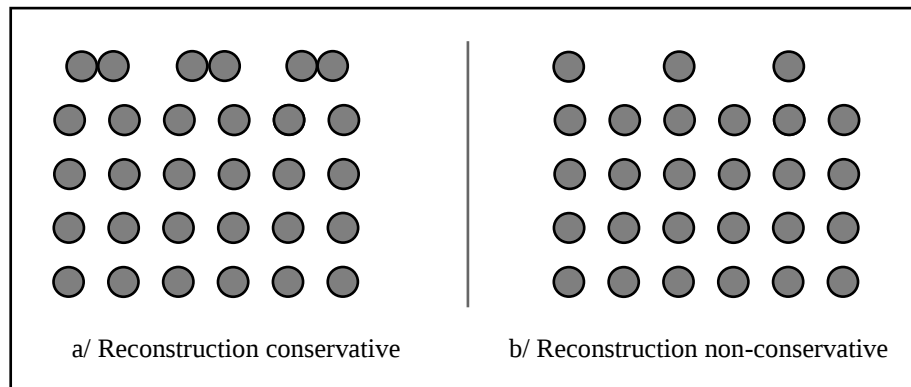


Figure (1.5) : Illustration schématique des types de reconstruction possibles.

I.4. Notations pour les structures de surfaces

Soumis à ces phénomènes, la structure du premier plan se trouve modifiée par rapport a celles des plans sous-jacents. De nouvelles notations sont utilisées pour designer de telles surstructures, et aussi des structures des couches ordonnées, adsorbées sur un substrat.

Ces notations servent à préciser les dimensions, la nature et l'orientation de la maille du premier plan par rapport a celle des plans suivants.

On commence par considérer la maille du réseau de Bravais de la surface non reconstruite.

Ainsi, si $(\vec{a}, \vec{b})$ est la maille du réseau initial, $(n\vec{a}, m\vec{b})$ la maille du réseau reconstruit (n, m sont des entiers), la surstructure est désignée par $p(n \times m)$, (p : primitive est parfois omis) [13]. Cette notation est valable dans le cas où les vecteurs de base de la maille primitive de surface sont parallèles à ceux de la maille du plan sous jacent.

Si la maille de surface est tournée par rapport à celle du plan sous jacent d'un angle θ , et que leurs dimensions ne sont pas dans un rapport entier, la surstructure est notée $(x \times y)R\theta$ (x et y ne sont pas entiers). D'autres notations sont utilisées dans des cas plus compliqués, telle que la notation matricielle proposée par Park et Madden [14] et la notation de Somorjai [15] dans le cas des surfaces vicinales.

I.5. Techniques de caractérisation structurales

La structure cristalline est habituellement déterminée par diffraction électronique. On utilise typiquement des électrons de longueur d'onde 1 Å pour avoir une bonne diffraction. Cette diffraction d'électrons de faible énergie est appelée LEED pour *Low Energy Electron Diffraction* : l'analyse des électrons émis donne accès, comme pour la diffraction en volume, à la forme du réseau réciproque de la surface [16]. Elle est aussi obtenue par diffraction d'électrons rapides RHEED pour *Reflection High Energy Electron Diffraction*, en incidence rasante [17], ou par diffraction d'électrons en mode transmission HEED pour *High Energy Electron Diffraction* où les électrons traversent le cristal aminci.

On compte aussi la diffraction de rayon X ou le faisceau de RX subit une diffusion élastique dans le cas où les éléments diffusants sont distribués de manière périodique.

Cependant, l'obtention de la structure de la surface ainsi que des distances interatomiques en utilisant la diffraction n'est pas tâche aisée. Leur détermination est plus simple via d'autres méthodes parmi lesquelles on citera à titre d'exemple, l'observation directe au microscope à effet tunnel ou à force atomique.

I.5.1. Microscopie à effet tunnel

Le microscope à effet tunnel fut inventé en 1981 par des chercheurs d'IBM, Gerd Binnig et Heinrich Rohrer, qui reçurent le prix Nobel de physique pour cette invention en 1986. Le microscope à effet tunnel est couramment prénommé *STM* pour *Scanning Tunneling Microscope* en anglais [8]. Il est basé sur un phénomène quantique, l'effet tunnel. Il permet de déterminer la morphologie et la densité d'états électroniques des

surfaces conductrices ou semi-conductrices avec une résolution spatiale pouvant être égale ou inférieure à la taille des atomes.

I.5.2. Microscopie à force atomique

La microscopie à force atomique a été découverte par G. Binning, F. Quate et C. Gerber en 1985. Elle est essentiellement basée sur l'analyse d'une surface point par point au moyen d'un balayage via une pointe très fine qui, en balayant la surface d'un matériau par simple effleurement, permet de mesurer les forces d'interactions entre la pointe du microscope et la surface explorée et de visualiser ainsi les reliefs de cette surface à l'échelle de l'atome [9].

I.5.3. Autres techniques de caractérisation des surfaces

Il existe bien d'autres techniques de caractérisation parmi lesquelles on citera les techniques spectroscopiques, où l'on s'intéresse aux électrons primaires (qui n'ont pas subi de collisions inélastiques) émis lors d'une excitation électronique ou optique de l'échantillon. Ces électrons correspondent aux structures fines dans le spectre, tandis que les électrons secondaires correspondent au fond continu du spectre. On en citera à titre d'exemple l'AES, l'XPS et l'UPS [18-19].

En spectroscopie des électrons Auger (AES), on utilise une source focalisée (faisceau d'électrons) on a donc une analyse ponctuelle de l'échantillon.

En spectroscopie des photoélectrons X et UV (XPS et EPS), on utilise une source non focalisée (rayonnement électromagnétique), on aura donc une analyse moyenne de l'échantillon. Ces techniques qui nécessitent de travailler en vide poussé (UHV) permettent une analyse physico-chimique de la surface de l'échantillon. Elles sont différentes mais complémentaires.

Partie II : Dynamique des surfaces atomiques

Introduction

Dans un solide, la conduction de l'énergie s'effectue de deux manières différentes : soit par voie électronique, soit par vibration atomique. Dans les matériaux conducteurs, les effets électroniques sont dominants. Mais, dans le cas des isolants et semi conducteurs, où les électrons sont fortement liés aux noyaux, l'énergie se transmet par vibrations du réseau cristallin, dont l'origine peut être l'effet d'une agitation thermique ou d'une excitation électromagnétique [20]. On s'intéressera à une catégorie particulière de vibrations connues en mécanique classique sous le nom de modes normaux de vibration. Un mode normal de vibration est un mode dans lequel chaque élément d'un réseau vibre à la même fréquence. Ces modes ont une grande importance, vu que tout mouvement vibrationnel dans un solide peut être représenté comme la superposition de vibrations élémentaires du réseau représentant un certain nombre de modes normaux de vibrations de fréquences différentes.

Leurs équivalents en mécanique quantique sont les phonons. Les phonons n'existent qu'au sein d'un réseau cristallin comportant un grand nombre de particules [20]. Lorsqu'un mode de vibration du cristal de fréquence définie ν cède ou gagne de l'énergie, il ne peut le faire que par paquets d'énergie $h\nu$, (h est la constante de Planck). Ce paquet est considéré comme une quasi-particule de spin zéro, à savoir une particule fictive connu sous le nom de phonon.

II.1. Dynamique des vibrations cristallines dans les systèmes ordonnés

Les atomes dans un solide, sont maintenus près de leurs positions d'équilibre grâce à des forces d'interaction, ou les atomes sont supposés interagir selon deux modèles de forces : les forces angulaires, et les forces centrales lequel sera utilisé dans notre étude.

L'analogie mécanique du modèle de force centrale est un ressort dont la force de rappel est dirigée le long de la ligne joignant deux atomes. Par conséquent, si on déplace légèrement un atome de sa position initiale et qu'on le relâche, il se mettra à osciller, entraînant les atomes voisins dans son mouvement ; il y aura alors propagation d'une onde de déformation dans le solide, d'où la vibration du cristal [21].

Un solide est considéré comme une succession infinie de cellules élémentaire contenant un nombre irréductible de sites. Nous appliquons les conditions aux limites périodiques de

Born Von Karman pour analyser la dynamique vibrationnelle du solide [10]. Sans vibration, un cristal parfait peut être décrit en donnant son réseau de Bravais, ainsi que la description de l'arrangement des atomes (la base) dans une cellule primitive. Un réseau de Bravais est formé de tous les points décrits par les vecteurs X tel que :

$$\vec{x}(n) = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad (1.1)$$

Où $\vec{a}, \vec{b}$ et $\vec{c}$ sont les vecteurs primitifs et $n_i \in \mathbb{Z}$.

La position R_i d'un atome i de la base, dans la cellule primitive spécifiée par $\vec{x}$ est donnée par :

$$\vec{R}_i(x) = \vec{x} + \vec{d}_i \quad (1.2)$$

Où d_i est la position de l'atome i à l'équilibre à l'intérieur de la cellule primitive repérée par R_i

En présence des vibrations nous ferons l'hypothèse que la position d'équilibre moyenne d'un atome est encore donnée par cette même équation. On pourra donc écrire :

$$\vec{R}_i(x) = \vec{x} + \vec{d}_i + \overrightarrow{u_i(x, t)} \quad (1.3)$$

Où $u_i(x, t)$ représente le déplacement de l'atome i par rapport à sa position d'équilibre et t , la variable temps. Nous ferons d'autre part l'hypothèse que l'amplitude de déplacement $u(x)$ est faible, ceci permettra de faire l'approximation harmonique.

L'interaction entre chaque paire d'atomes peut être caractérisée par une fonction d'énergie potentielle v qui ne dépend que de la distance entre ces atomes, et qui est la même pour toutes les paires d'atomes.

$$v = v(R_1, \dots, R_i, \dots) \quad (1.4)$$

Dans l'hypothèse où les déplacements $u(x)$ sont faibles, on peut développer v en série de Taylor par rapport aux déplacements u_i où le premier terme correspondra au potentiel sans tenir compte des vibrations (réseau statique).

L'approximation harmonique revient à négliger dans le développement tous les termes d'ordre supérieur à deux, on aura donc :

$$v = v_{\text{stat}} + v_{\text{harm}} \quad (1.5)$$

L'équation du mouvement d'un atome j est donnée par :

$$m_n \frac{d^2 \vec{u}(n, t)}{dt^2} = \sum_j \vec{F}_{jn} \quad (1.6)$$

Vu que le modèle adopté est le modèle des forces centrales dans l'approximation des vibrations harmoniques, l'équation du mouvement peut se mettre sous la forme [22-24] :

$$m_n \frac{d^2 \vec{u}(n, t)}{dt^2} = - \sum_{n' \neq n} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} \right) k(n, n') [\vec{u}_{\beta}(n, t) - \vec{u}_{\beta}(n', t)] \quad (1.7)$$

α et β sont les directions cartésiennes, m_n est la masse de l'atome n , $\vec{u}_{\alpha}(n, t)$ l'amplitude de vibration. r_{α} est la composante cartésienne selon la direction α du vecteur $\vec{r}(n, n')$ joignant les positions d'équilibre des atomes n et n' , r est le module du vecteur $\vec{r}(n, n')$, et $k(n, n')$ est la constante de force.

L'équation précédente se décompose en un système de $3N$ équations pour N atomes. Les solutions sont sous forme d'ondes planes harmoniques de la forme :

$$u_{\alpha}(n, t) = u_{\alpha}(n, \omega) e^{i\omega t} \quad (1.8)$$

Le terme $u_{\alpha}(n, \omega)$ désigne l'amplitude de vibration d'un atome localisé au site n suivant la direction cartésienne α , ω la fréquence de vibration. L'équation du mouvement peut alors s'écrire sous la forme :

$$\omega^2 m_n u_{\alpha}(n, \omega) = \sum_{n' \neq n} \sum_{\beta} \left[\frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} \right] k(n, n') \{ u_{\beta}(n', \omega) - u_{\beta}(n, \omega) \} \quad (1.9)$$

La relation précédente permet de réduire le système d'équations que l'on peut écrire sous la forme matricielle suivante :

$$[\omega^2 I - D(\vec{q})]|u\rangle = 0 \quad (1.10)$$

Où : $D(\vec{q})$ est la matrice dynamique de taille $(3N \times 3N)$, pour chaque vecteur d'onde $\vec{q}$, elle dépend des constantes de force entre les différents atomes ;

I : est la matrice identité de même rang que la matrice D , et $|u\rangle$ le vecteur propre du déplacement.

Pour que le système homogène (1.10) ait des solutions non triviales en ω^2 , il faudrait que : $\det(\omega^2 I - D(\vec{q})) = 0$.

On peut déterminer Ainsi, pour chaque vecteur d'onde $\vec{q}$ de la première zone de Brillouin les différents modes de vibration dans le système considéré. Ces derniers sont caractérisés par l'ensemble des solutions $\omega_s > 0$, avec $s = 1, 2, \dots, 3N$.

II.2. Méthodes théoriques utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle

Les équations précédentes ont été élaborées dans le cas d'un système périodique basé sur les conditions aux limites de Born Von Karman [25]. En présence de la surface, la brisure de symétrie dans la direction perpendiculaire, rend la résolution du système d'équation difficile, vu que le théorème de Bloch n'est plus applicable. Par conséquent, pour étudier les propriétés physiques liées à la dynamique vibrationnelle dans les solides cristallins présentant des défauts de structure (la surface), plusieurs techniques de calcul, permettant de réduire le nombre d'équations et d'inconnues [26], ont été développées et adaptées. On en citera la méthode de diagonalisation directe, la méthode des fonctions de *Green*, et la méthode de raccordement.

II.2.1. Méthode de diagonalisation directe (Slab method)

Cette méthode a été introduite dans sa formulation générale en 1965 par Clark. Elle a été appliquée ensuite à un système physique par Allen et Alldredge [27-28]. Elle consiste à déduire la matrice dynamique à partir des équations du mouvement des atomes appartenant à une cellule unitaire, dans un système ayant un nombre fini de plans atomiques dans une direction (Z par exemple), avec une extension finie dans les deux autres directions X et Y . Pour retrouver la région dite de volume, le nombre de plans utilisés pour la modélisation doit être suffisamment grand. La résolution numérique de cette matrice détermine les vecteurs et les valeurs propres. Ce qui permet ensuite la

détermination, des courbes de dispersion, des densités spectrales et des vecteurs déplacements des atomes.

Cette méthode est couteuse en temps de calcul lors des simulations numériques, vu l'importante taille des matrices.

II.2.2. Méthode des fonctions de Green

Méthode introduite par George Green [29] en 1850. Elle est basée sur la résolution d'une équation aux dérivées partielles linéaires à coefficients constants et permet l'étude de la dynamique des systèmes réels [30-33]. Dans notre cas, nous partons d'un cristal infini constitué d'atomes de masses m_n . D la matrice dynamique qui lui est associée. Nous obtenons un cristal avec deux surfaces libres (cristal perturbé) en coupant le réseau infini associé au cristal non perturbé en deux par le plan $z = a/2$ et en supprimant les interactions entre les atomes situés de part et d'autre de ce plan. Soit D_p la matrice dynamique associée au cristal ainsi perturbé.

Nous écrivons D_p sous la forme : $D_p = D + P$

Où P est la matrice de perturbation.

Nous introduisons la matrice des fonctions de Green $G(\omega^2)$

définie par : $G(\omega^2) = (\omega^2 I - D)^{-1}$

Pour le système perturbé, elle s'écrit : $G_p(\omega^2) = (\omega^2 I - (D + P))^{-1}$

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

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

D'où la relation $G_p(\omega^2) = ((I - G(\omega^2)P))^{-1} G(\omega^2)$.

Les pôles de la fonction $G_p(\omega^2)$ donnent les états vibrationnels du système perturbé.

II.2.3. La méthode de raccordement

Initiée par Feuchtwang [34] en 1967 puis revisitée par Szeftel et *al.* en 1987 [35], la méthode de raccordement a été introduite à l'origine lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi infini à trois dimensions, puis utilisée par la suite pour l'étude de la dynamique vibrationnelle et magnétique de divers systèmes physiques [36-38]. Aussi, elle rend compte de façon satisfaisante des courbes de dispersion des phonons [34] et de résonances de surface. Son exécution requiert la subdivision du

cristal en trois régions distinctes (figure (I.6)) ayant toutes la même périodicité bidimensionnelle le long de la surface.

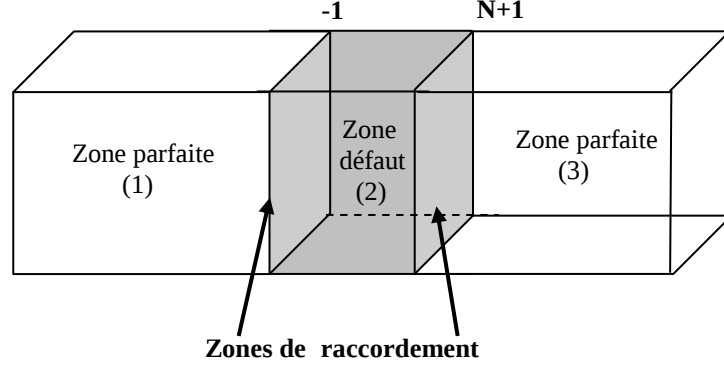


Figure (I.6) : Guide d'ondes perturbé.

Comme son nom l'indique, cette méthode permet de relier les déplacements des atomes du défaut à ceux des régions parfaites via les atomes des frontières des deux zones de raccordement qui délimitent la zone perturbée (zone 2), renfermant tous types de défauts. Quant aux zones (1) et (3), elles représentent les régions parfaites, non touchées par l'effet de la perturbation. On fixe l'origine de notre repère sur la position de la première colonne perturbée qu'on note (-1) , et la direction de l'onde incidente de la gauche vers la droite. Le mode incident pourrait être une superposition des modes du guide d'ondes parfait. Nous écrirons pour un mode $i < 0$:

$$\vec{u}_{in}^i = (Z_{\bar{\nu}})^i \vec{u}_{\bar{\nu}} \quad (1.11)$$

L'indice $\bar{\nu}$ désignera toujours le mode incident. En prévision du défaut, le vecteur déplacement de deux colonnes adjacentes sont reliés par un facteur de phase Z tel que

$$\vec{u}^{i\pm 1} = (Z)^{\pm 1} \vec{u}^i \quad (1.12)$$

Les solutions telles que $Z = 1$ sont des modes itinérants et celles vérifiant $Z < 1$, correspondent à des modes évanescents depuis le défaut vers le volume. Quant aux solutions $Z > 1$, elles donnent lieu à des modes divergents (i désigne le site occupé par

l'atome suivant la direction de propagation). Le facteur de phase $Z = e^{iqa}$, constitue une caractéristique essentielle de la méthode de raccordement pour des ondes itinérantes.

Le problème aux valeurs propres de l'équation peut alors s'écrire comme

$$D(r, Z) \vec{u}^i = -\Omega^2 \vec{u}^i \quad (1.13)$$

$\Omega^2 = m\omega^2/k_1$ est la fréquence normalisée, sans dimension, et $D(r, Z)$ la matrice dynamique (2×2) du réseau parfait (région (1) ou (3) de la figure (I.6)) contenant des termes en Z et $1/Z$. $r = k_2/k_1$ représente le rapport entre les constantes de force des deuxièmes et premiers voisins du réseau.

La résolution de l'équation (1.13) pour $Z = e^{iqa}$ fixé, permet d'obtenir les fréquences propres de vibration ainsi que les vecteurs propres qui leur sont associés.

En arrivant à la zone défaut, les ondes diffusées sont composées d'une partie réfléchie et d'une autre transmise. Elles engendrent des déplacements $\vec{u}_r$ et $\vec{u}_t$ et dans les régions (1) et (2) qui peuvent être exprimés comme une combinaison des modes propres du guide d'onde à la même fréquence.

$$\vec{u}_t^i = \sum_{\nu} T_{\nu\nu}^-(Z_{\nu})^i \vec{u}_{\nu\nu}^- \text{ pour } i \geq N+1 \quad (1.14)$$

$$\vec{u}_r^i = \sum_{\nu} R_{\nu\nu}^-(Z_{\nu})^{-i} \vec{u}_{\nu\nu}^- \text{ pour } i \leq -1 \quad (1.15)$$

On désigne par les facteurs complexes R et T , les coefficients de réflexion et de transmission normalisés préalablement par les vitesses de groupe de l'onde plane. Ils représentent la colonne $\bar{\nu}$ de la matrice dynamique de diffusion du système perturbé.

L'écriture des équations de mouvements des atomes qui se trouvent entre les colonnes -1 et (N+1) (atomes des zones défaut et de raccordements), permettent d'aboutir à la matrice dynamique D du système perturbé. Elle est de type rectangulaire de la forme :

$$[D] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (1.16)$$

Où le vecteur $|u\rangle$ représente les déplacements de tous les sites appartenant à la zone comprise entre les colonnes (-1) et $(N+1)$ de la figure (I.6). Il est composé deux parties : la première $|irr\rangle$ constituée par les déplacements des sites irréductibles formant la région défaut, et la seconde $|racc\rangle$ formée par les déplacements associés aux sites raccordés (colonnes -1 et $N+1$). Cette matrice constitue un point de départ incontournable pour le calcul d'importantes grandeurs physiques.

II.3. Calcul des grandeurs physiques

Les facteurs complexes R et T vont nous permettre de calculer certaines grandeurs physiques telles que les coefficients de transmission, de réflexion et la conductance des phonons.

II.3.1. Probabilités de transmission et de réflexion

Les probabilités (appelées aussi coefficients) de réflexion et de transmission [39] sont données respectivement par :

$$r_{\nu\bar{\nu}} = |\rho_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \frac{v_{\nu}}{v_{\bar{\nu}}} |R_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (1.17)$$

$$t_{\nu\bar{\nu}} = |\tau_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \frac{v_{\nu}}{v_{\bar{\nu}}} |T_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (1.18)$$

Où ν désigne un mode propageant du guide d'ondes et $\bar{\nu}$ le mode incident. τ et ρ sont les éléments de la matrice de diffusion du défaut.

Si ν est un mode atténué, les coefficients t et r sont nuls car à longue portée, loin de la zone perturbée, l'effet de ce mode est négligeable.

Nous soulignerons par ailleurs, en supposant que l'onde incidente a une amplitude normalisée, que la somme des coefficients r et t est égale à l'unité (1) :

$$\sum_{\nu} (t_{\nu\bar{\nu}} + r_{\nu\bar{\nu}}) = 1 \quad (1.19)$$

Ceci qui se traduit dans les phénomènes de diffusion par la conservation du courant où la matrice de diffusion est toujours unitaire.

II.3.2. La conductance phononique

La conductance phononique $\sigma(\Omega)$ d'un défaut, est une grandeur physique définie par analogie avec la conductance électronique [11] dans les phénomènes de diffusion électronique. Elle est définie par :

$$\sigma(\Omega) = \sum_{\nu, \bar{\nu}} t_{\nu\bar{\nu}} \quad (1.20)$$

La somme est effectuée sur tous les modes se propageant à la fréquence Ω . Pour un guide d'ondes parfait, sans défaut, σ est un entier qui donne le nombre de modes propageants à la fréquence Ω considérée.

La présence du défaut crée un écart entre le σ idéal et sa valeur provenant des processus de diffusion. Cet écart donne une mesure de la réflexion causée par la diffusion sur les nanostructures.

Chapitre II

Impact des îlots atomiques sur la diffusion d'ondes élastiques dans une surface

Introduction

En physique de la matière condensée, la grande importance de l'étude des phonons [40] est due au rôle qu'ils jouent dans un grand nombre de propriétés des solides particulièrement à basse dimensions. On peut en citer, la conductivité thermique, la conductivité électrique, la capacité à propager le son, etc.

Le but de ce chapitre est d'étudier la diffusion des ondes de vibrations d'un réseau à basse dimensions, perturbé par la présence d'un îlot atomique dans différentes configurations. Comme décrit précédemment, l'étude sera menée dans le model des forces centrales, dans l'approximation des vibrations harmoniques s'étendant aux premiers et seconds voisins. Dans un premier temps, nous étudions les propriétés dynamiques du réseau parfait. Nous introduirons, ensuite, les équations régissant la diffusion en présence de défauts.

II.1. Description du modèle parfait

Le système auquel on s'intéresse est un réseau carré infini, repéré par les axes x , y , de paramètre de maille a , supposé égal à un pour de raisons de simplification. Les atomes de masse m , sont situés aux nœuds du réseau et reliés à leurs voisins via des ressorts dont les constantes de raideur est k_1 pour les premiers voisins, et k_2 pour les seconds (figure (II.1)). On suppose que l'onde se propage de la gauche vers la droite.

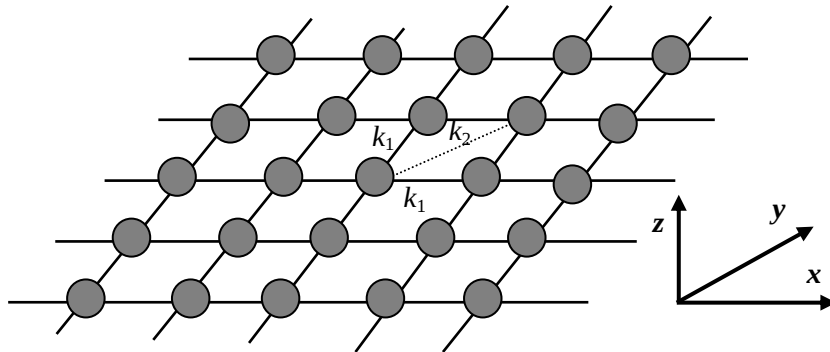


Figure (II.1) : Guide d'onde parfait représentant une surface atomique.

a. Equations de mouvement

Le mouvement des atomes de notre système est régi par l'équation dynamique de Newton

$$\sum \vec{F} = m.\vec{\gamma} \quad (2.1)$$

$$\text{Où : } \begin{cases} \vec{F} = -k\vec{x} \\ \vec{\gamma} = -\omega^2\vec{x} \end{cases}$$

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

L'équation du mouvement est donnée par l'équation (1.7).

La projection suivant les axes (Ox) et (Oy), donnera les équations du mouvement d'un atome (i,j) du plan atomique :

Suivant la direction (Ox)

$$\begin{aligned} -m\omega^2 u_x(i,j) = & -(2k_1 + 2k_2)u_x(i,j) + k_1 u_x(i+1,j) + k_1 u_x(i-1,j) + \frac{k_2}{2} u_x(i+1,j+1) + \\ & \frac{k_2}{2} u_x(i+1,j-1) + \frac{k_2}{2} u_x(i-1,j+1) + \frac{k_2}{2} u_x(i-1,j-1) + \frac{k_2}{2} u_y(i+1,j+1) + \\ & \frac{k_2}{2} u_y(i-1,j-1) - \frac{k_2}{2} u_y(i-1,j+1) - \frac{k_2}{2} u_y(i+1,j-1) \end{aligned} \quad (2.2a)$$

Suivant la direction (Oy)

$$\begin{aligned} -m\omega^2 u_y(i,j) = & -(2k_1 + 2k_2)u_y(i,j) + k_1 u_y(i,j+1) + k_1 u_y(i,j-1) + \frac{k_2}{2} u_y(i+1,j+1) + \\ & \frac{k_2}{2} u_y(i+1,j-1) + \frac{k_2}{2} u_y(i-1,j+1) + \frac{k_2}{2} u_y(i-1,j-1) + \frac{k_2}{2} u_x(i+1,j+1) - \frac{k_2}{2} u_x(i+1,j-1) - \\ & \frac{k_2}{2} u_x(i-1,j+1) + \frac{k_2}{2} u_x(i-1,j-1) \end{aligned} \quad (2.2b)$$

L'onde qui se propage est une onde plane harmonique, elle s'écrit sous la forme :

$$u_\alpha(n,t) = u_\alpha(n,\omega)e^{i\omega t} \quad (2.3)$$

On pose :

$$u_\alpha(i \mp 1, j) = Z^{\mp 1} u_\alpha(i, j) \quad (2.4a)$$

$$u_\alpha(i, j \mp 1) = Z'^{\mp 1} u_\alpha(i, j) \quad (2.4b)$$

Où Z et Z' sont les facteurs de phase satisfaisant la condition de propagation suivant les axes x et y . Ils sont donnés par : $Z = \exp(iq_x a) = e^{i\phi_x}$ et $Z' = \exp(iq_y a) = e^{i\phi_y}$. En tenant compte de ces nouvelles notations, les équations du mouvement prendront la forme :

Suivant la direction (Ox)

$$[m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 + (k_1 + k_2 \cos \phi_y)(Z + Z^{-1})]u_x(i, j) + ik_2 \sin \phi_y (Z - Z^{-1})u_y(i, j) = 0$$

Suivant la direction (Oy)

$$[m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 + 2k_1 \cos \phi_y + (Z + Z^{-1})k_2 \cos \phi_y]u_y(i, j) + ik_2 \sin \phi_y (Z - Z^{-1})u_x(i, j) = 0$$

La matrice dynamique (2x2) du système parfait se met sous la forme :

$$\begin{bmatrix} m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 + (k_1 + k_2 \cos \phi_y)(Z + Z^{-1}) & ik_2 \sin \phi_y (Z - Z^{-1}) \\ ik_2 \sin \phi_y (Z - Z^{-1}) & m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 + 2k_1 \cos \phi_y + (Z + Z^{-1})k_2 \cos \phi_y \end{bmatrix}$$

L'équation aux valeurs propres du système précédent est :

$$[\Omega I - D(Z, r)]|u\rangle = 0 \quad (2.5)$$

Où : $\Omega^2 = \frac{m\omega^2}{k_1} = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2$ est la fréquence normalisée ; $r = k_2/k_1$ est le rapport entre les constantes de forces des deuxièmes et premiers voisins du réseau parfait. D et I sont respectivement : la matrice dynamique (2x2) et la matrice identité. La détermination des fréquences propres de vibrations revient à calculer les valeurs propres de la matrice D .

b. Courbe de dispersion

Le système d'équations précédent admet de solutions non triviales si :

$$\text{Det}[\Omega I - D(Z, r)] = 0 \quad (2.6)$$

Sa résolution permet d'obtenir les deux fréquences propres de vibrations Ω , et les deux vecteurs propres $\vec{u}$ qui leur sont associés pour Z fixé.

Lorsque le facteur de phase Z parcourt le cercle unité dans le plan complexe, autrement dit lorsque q_x balaie la première zone de Brillouin $[-\pi, \pi]$, on obtient les relations de dispersion des différents modes propres en fonction de $\phi_x = q_x a$ pour $r = 0,5$.

Les relations de dispersion sont des fonctions périodiques de période $2\pi/a$, et toutes les informations des modes de vibrations sont contenues dans l'intervalle $[-\pi, \pi]$, on peut donc restreindre notre étude à la première zone de Brillouin.

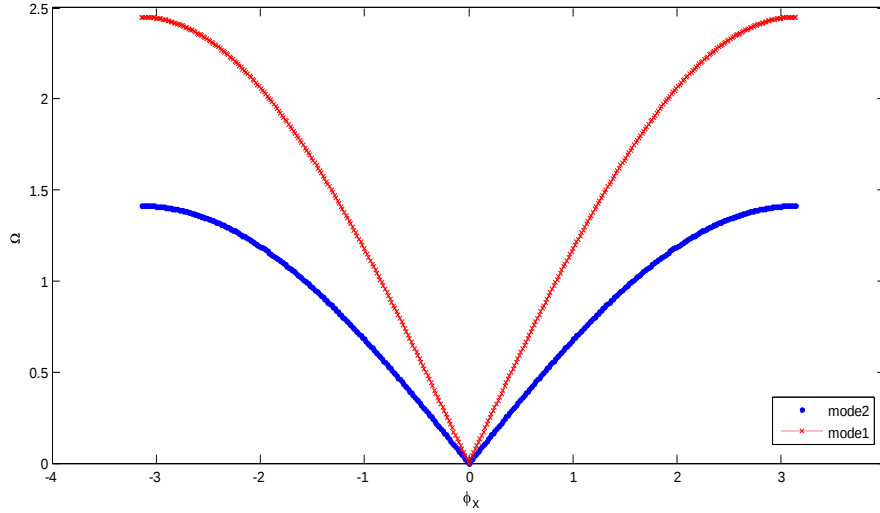


Figure (II.2) : Courbe de dispersion d'un plan atomique.

Discussion

On constate que ces courbes sont symétriques par rapport à l'origine, et leurs dépendances en ϕ_x n'est pas linéaire reflétant ainsi la dispersion du système.

Les deux branches de dispersion sont acoustiques puisque $\Omega \rightarrow 0$ quand $\phi_x \rightarrow 0$, elles correspondent à deux modes de propagation. Les vecteurs propres obtenus dans la résolution du système aux valeurs propres permettent de les distinguer l'un de l'autre. Le mode (2) correspond à un mode transversal pour lequel la vibration se propage perpendiculairement au mouvement des atomes, et le mode (1) correspond à un mode longitudinal pour lequel la direction de propagation de la vibration et le déplacement des atomes sont colinéaires.

Les deux branches se recouvrent sur l'intervalle de fréquence $[0, 1.40]$. Au-delà de cette plage, il ne subsiste que la branche longitudinale.

Les deux modes sont propagateurs dans les intervalles de fréquences suivants :

Mode (1) : $[\Omega_{2\min} = 0, \Omega_{2\max} = 2.45]$.

Mode (2) : $[\Omega_{1\min} = 0, \Omega_{1\max} = 1.40]$.

Les courbes de dispersion peuvent être assimilées au spectre des énergies possibles pour les phonons en fonction de leur impulsion $\hbar(q_x a)/2\pi$. La connaissance d'un tel spectre, pour un cristal réel, est très importante. Il permet de préciser les énergies et les impulsions

que le cristal est susceptible de fournir ou d'absorber lorsqu'il interagit avec un autre système.

II.2. Les vitesses de groupe

La vitesse de groupe d'une onde de vibration est la vitesse du paquet d'ondes : elle correspond à la vitesse à laquelle l'énergie ou l'information est transportée dans un milieu dispersif, lorsque les directions de propagation sont diverses. Elle est définie pour des valeurs du vecteur d'onde $\vec{q}$ réelles par l'expression :

$$v_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} \text{ soit } \vec{v}_g = \overrightarrow{\text{grad}}[\Omega(\vec{q})] \quad (2.7)$$

Dans le cas où q est différent d'un réel, nous imposons $v_g = 0$.

La forme matricielle de la dérivée est donnée par :

$$\begin{bmatrix} i(k_1 + k_2 \cos \phi_y)(Z - Z^{-1}) & -k_2 \sin \phi_y (Z + Z^{-1}) \\ -k_2 \sin \phi_y (Z + Z^{-1}) & i k_2 \cos \phi_y (Z - Z^{-1}) \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

L'allure de la vitesse de groupe v_g dans les deux modes en fonction de la fréquence de diffusion Ω est donnée sur la figure (II.3).

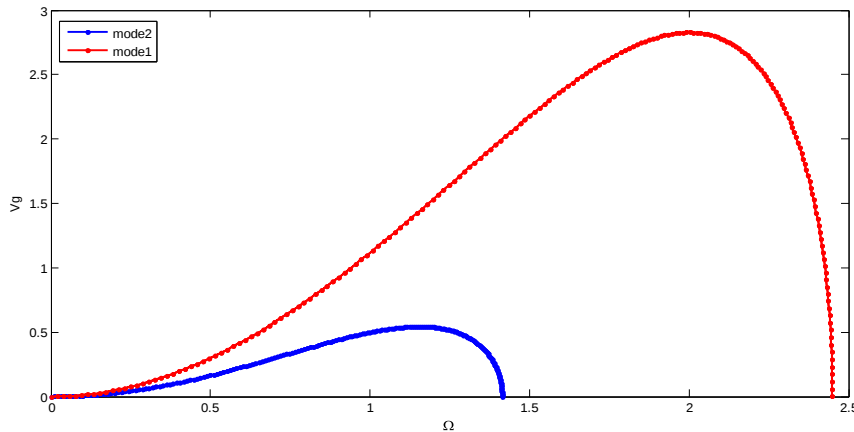


Figure (II.3) : Vitesses de groupe d'un guide d'ondes
Parfait de la figure (II.1), en fonction de Ω , pour $r = 0,5$.

La vitesse de groupe correspond à la pente des courbes de dispersion. On constate que la pente de ces courbes ne change pas de signe. Cela signifie que l'onde incidente se propage

bien sans changement de direction dans le cristal. Notons que l'étendue de chacune des plages où la vitesse $v_g \neq 0$ se rapporte bien à celle des modes propagants.

II.3. Calcul des facteurs de phase

La connaissance des modes évanescents en plus des modes propageant définis dans le cas des guides d'onde parfaits est nécessaire pour la description de la diffusion en présence de défauts. Les modes évanescents sont caractérisés par un facteur de phase $Z < 1$. Donc pour chaque fréquence Ω donnée, on doit prendre toutes les solutions $Z \leq 1$.

Les solutions pour lesquelles $|Z| > 1$ ne seront pas retenues, car elles donnent lieu à des modes divergents. La résolution se fait en utilisant la méthode du déterminant ou la méthode d'augmentation de base laquelle sera utilisée dans nos calculs.

Cette méthode consiste en l'augmentation de la base de l'espace des vecteurs propres.

Nous allons donc linéariser le système en introduisant de nouvelles variables définies par :

$$\vec{v}_i = -\frac{1}{Z} \vec{u}_j \quad (2.9)$$

$i \in [2, 4]$, pour $j \in [1, 2]$.

Nous obtiendrons deux équations supplémentaires, le nouveau système contiendra alors deux fois plus d'équations que le système original.

$$A(\Omega)\vec{w} = Z.B.\vec{w} \quad (2.10)$$

$$\text{Avec : } \vec{w} = \begin{pmatrix} \vec{u}_j(l) \\ \vec{v}_i(l) \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Notons que A et B sont des matrices de taille (4×4) , extraites de la matrice dynamique $D(Z, r)$ après augmentation de la base.

La résolution du système (2.10) conduit pour chaque fréquence Ω , à deux paires de valeurs propres $\{Z(i), Z^{-1}(i)\}$ et à deux paires de vecteurs propres qu'il s'agit de classer.

La représentation à trois dimensions des trajectoires des facteurs d'atténuation Z en fonction de la fréquence permet d'avoir une vision plus complète des courbes de dispersion. On voit bien sur la figure (II.4) que la projection des courbes des solutions propagantes sur le plan complexe donne lieu à des cercles de rayon unité égal au module de Z .

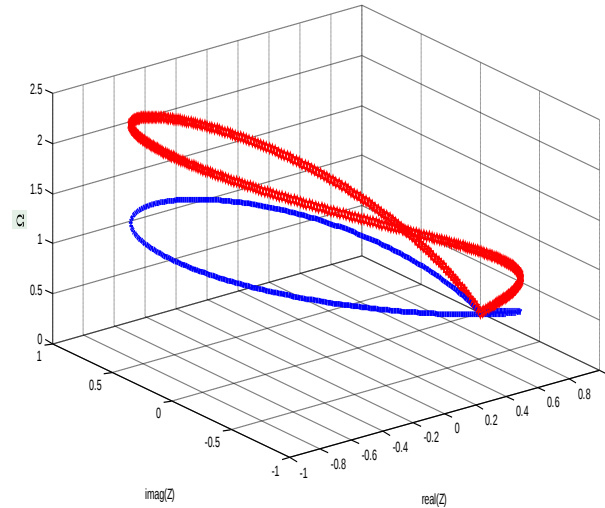


Figure (II.4) : Courbes de dispersion à 3D.

II.4. Etude de la diffusion dans le système perturbé

L'utilisation de la microscopie pour définir le relief d'une surface peut être réalisée en déposant la pointe sur la surface à explorer, ce qui peut engendrer dans la pratique une modification des propriétés physiques de la structure étudiée. La symétrie du plan se trouve ainsi brisée par le positionnement de la pointe qu'on représentera dans notre étude par un îlot atomique, au dessus de la surface cristalline. Nous allons considérer que cette brisure de symétrie est suivant l'axe des x , d'où l'application de la méthode de raccordement, tandis que suivant la direction y , l'onde ne voit pas le défaut. Les atomes de l'îlot sont équidistants de a , et sont repérés dans la direction z .

Nous allons traiter trois cas de figures :

- 1/ La pointe est positionnée sur un atome de la surface.
- 2/ La pointe est positionnée entre deux atomes proche voisins.
- 3/ La pointe se trouvera entre quatre atomes.

Dans chaque cas nous verrons l'effet de l'adoucissement au durcissement des constantes élastiques, en faisant varier la masse.

a. Description du modèle

La présence de l'îlot atomique sur la surface de notre échantillon va nous mener à subdiviser le cristal en trois zones :

La zone de gauche G et la zone de droite D, correspondant au système parfait étudié en (II.1).

La zone du milieu M, correspondant à la zone du nanocontact : pointe-surface. Cette zone est reliée aux zones G et D par deux zones de raccordement, et les constantes de forces de cette zone sont notées k_{1d} et k_{2d} , respectivement pour les premiers et seconds voisins.

b. Matrice dynamique du système

La matrice dynamique du système perturbé, trouve son origine dans l'écriture des équations de mouvement des atomes situés dans la zone du défaut, ainsi que les atomes de raccordement. C'est une matrice rectangulaire de taille $(m \times n)$, où m représente le nombre d'atomes de la zone défaut plus (+) le nombre d'atomes de raccordement, multiplié par trois. (Il y a 3 degrés de liberté par site), et n est égal au nombre m plus (+) le nombre d'atomes de raccordement multiplié par deux (2 degrés de liberté par site).

c. Matrice de raccordement

La matrice de raccordement sert à établir les relations de raccordement entre les déplacements vibrationnels des atomes appartenant au domaine perturbé et les champs vibrationnels des modes des deux guides d'ondes parfaits.

Pour cela nous allons représenter les déplacements atomiques des sites appartenant à la région de raccordement par une combinaison linéaire de vecteurs $\{RT\}$ définissant un espace fini.

Dans notre cas, il existe deux zones de raccordement ce qui nécessite la définition de deux bases distinctes $\{R\}$ et $\{T\}$. La base $\{R\}$ sera utilisée pour l'étude du mouvement des atomes de la région G, et la base $\{T\}$, celui des atomes de la région D.

Les dimensions des vecteurs de bases définies sont liées au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude dynamique de la zone parfaite, ainsi $\{R\}$ et $\{T\}$ sont de dimension (02). Dans la région de raccordement à droite, on peut écrire les déplacements vibrationnels de la manière suivante :

$$u'_\alpha(n_x, n_y) = \sum_{j=1}^2 Z_j^{nx} A'(\alpha, j) T_j \quad (2.12a)$$

$$u_\alpha(n_x, n_y) = \sum_{i=1}^2 Z_i^{nx} A(\alpha, j) R_i \quad (2.12b)$$

R_i : est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents i dans la base $\{R\}$ de l'espace des phases. T_j : est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents j dans

la base $\{T\}$ de l'espace des phases. α : est l'une des deux directions (Ox) ou (Oy). A et A' sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres issus de l'étude de la matrice de la zone parfaite.

Le vecteur des déplacements atomiques de la zone du défaut est noté $|u\rangle$, se décompose en deux parties :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

- la partie $|irr\rangle$ est constituée des déplacements des sites irréductibles formants la zone M . Sa dimension correspond au nombre d'atomes de cette zone multiplié par trois degrés de liberté par atome.
- la partie $|rac\rangle$ est composée des déplacements des deux zones de raccordements G et D . Sa dimension est donnée par le nombre d'atome de raccordement multiplié par deux degrés de liberté.

Le raccordement des atomes se met sous la forme matricielle suivante :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [R] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

Où : I_d est une matrice identité. Sa taille dépend du nombre d'atomes dans le site irréductible multiplié par trois (3 degrés de libertés par site).

R_1, R_2, R_3 et R_4 : sont des sous matrices carrées, elles dépendent du nombre de modes propagateurs du système parfait, leurs dimensions (2×2). Ces dernières sont exprimées en fonctions des Z_i (Z_1, Z_2) et des poids pondérés associés aux modes (cofacteurs).

R : est appelé matrice de raccordement, ses dimension sont ($n \times m$).

Le produit de la matrice dynamique du système perturbé (D) par la matrice de raccordement (R) donne une matrice carrée $S(m \times m)$.

$$[D(m \times n)] \cdot [R(n \times m)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [S(m \times m)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = 0 \quad (2.15)$$

La relation $\det([S(m \times m)]) = 0$ donne les états vibrationnels en présence de l'îlot atomique.

A/ La pointe est au dessus d'un atome de la surface : position Top

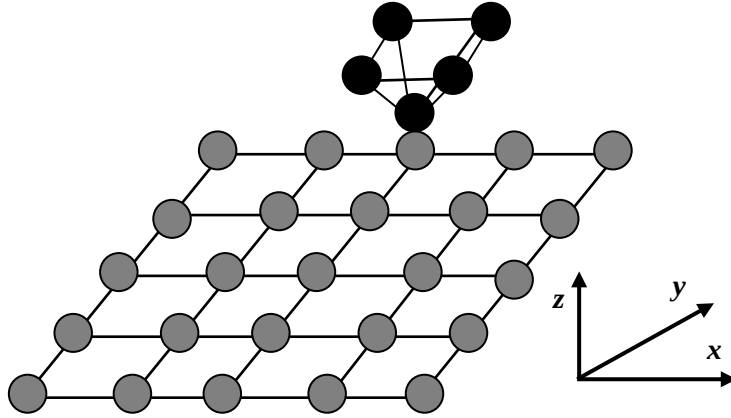


Figure (II.5) : Îlot atomique en position Top sur une surface plane.

On commence par l'écriture des équations du mouvement des atomes de la zone perturbée et des atomes de l'îlot au nombre de 8 fois trois degrés de liberté, celles des atomes de raccordement au nombre de 2 fois deux degrés de liberté et enfin celles des sites adjacents au nombre de 2 fois deux degrés de liberté. On obtient une matrice rectangulaire D de taille (28×32) . Le produit de la matrice D obtenue avec la matrice de raccordement du système R donne une matrice carrée. $S(28 \times 28)$ Les états vibrationnels de notre système sont déterminés par la relation de compatibilité : $\det([S(28 \times 28)]) = 0$.

- Courbes des coefficients de transmission (T), réflexion (R) et de la conductance (σ) en fonction de la fréquence de diffusion :

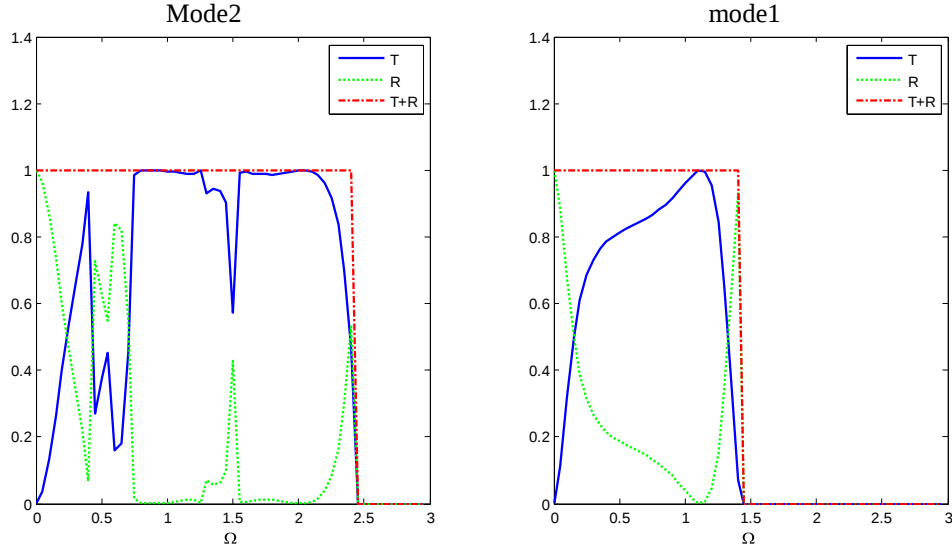
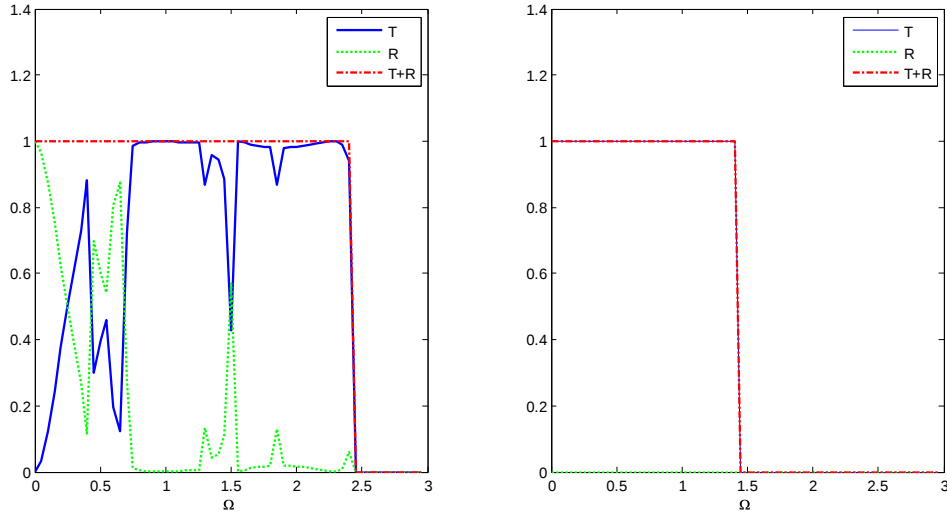
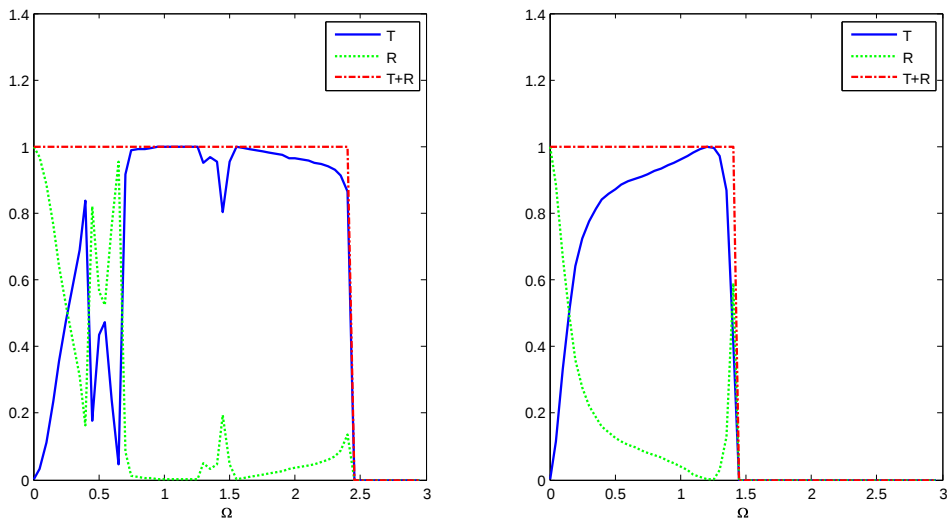
Un calcul numérique nous permet de déterminer les coefficients de transmission (T), de réflexion (R), et la conductance phononique (σ) en fonction de la fréquence normalisée Ω dans différents cas. Ces grandeurs physiques sont représentées dans le cas d'adoucissement, d'homogénéité puis de durcissement des constantes de force au niveau du défaut, et ce pour une masse des atomes de l'îlot légère, homogène, et enfin lourde.

Les résultats numériques sont obtenus pour $\phi_y = 0$ et pour les différentes valeurs des paramètres k_1 , k_2 et k_{1d} , k_{2d} prenant les paires de valeurs suivantes :

$(k_{1d}, k_{2d}) = (0.9, 0.4)$ dans le cas d'un adoucissement des contraintes,

$(k_{1d}, k_{2d}) = (1.0, 0.5)$ dans le cas des contraintes homogènes,

$(k_{1d}, k_{2d}) = (1.1, 0.6)$ pour un durcissement des constantes de force au niveau du défaut.

A.1/ Masse légère : ($m_{\text{îlot}} < m_{\text{plan}}$)**Figure (II.5.1a)** : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'adoucissement des contraintes.**Figure (II.5.1b)** : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'homogénéité des contraintes.**Figure (II.5.1c)** : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas du durcissement des contraintes.

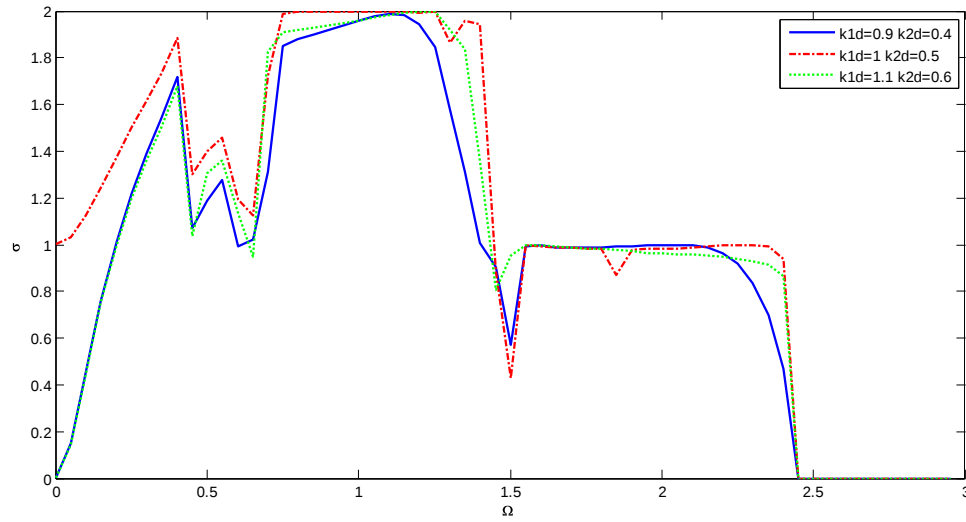


Figure (II.5.1d) : Conductance phononique pour un îlot en position Top en surface (masse légère).

A.2/ Masse homogène : ($m_{\text{îlot}} = m_{\text{plan}}$)

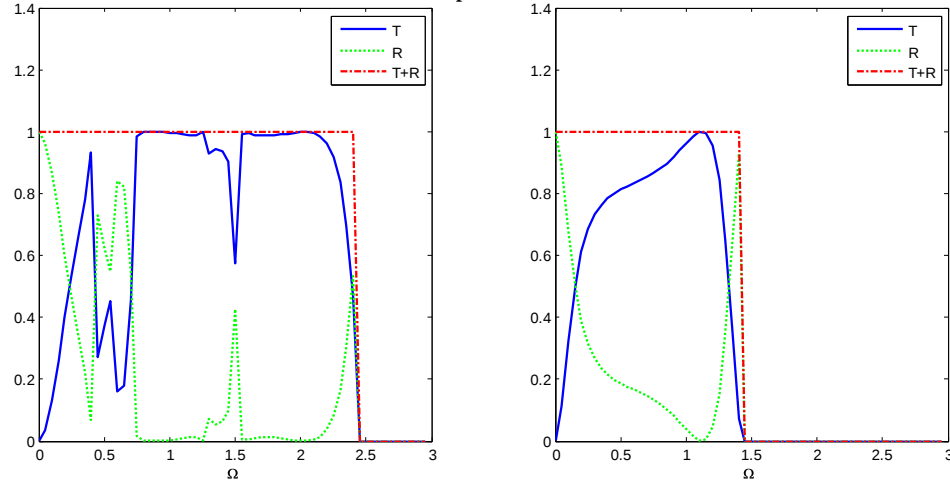
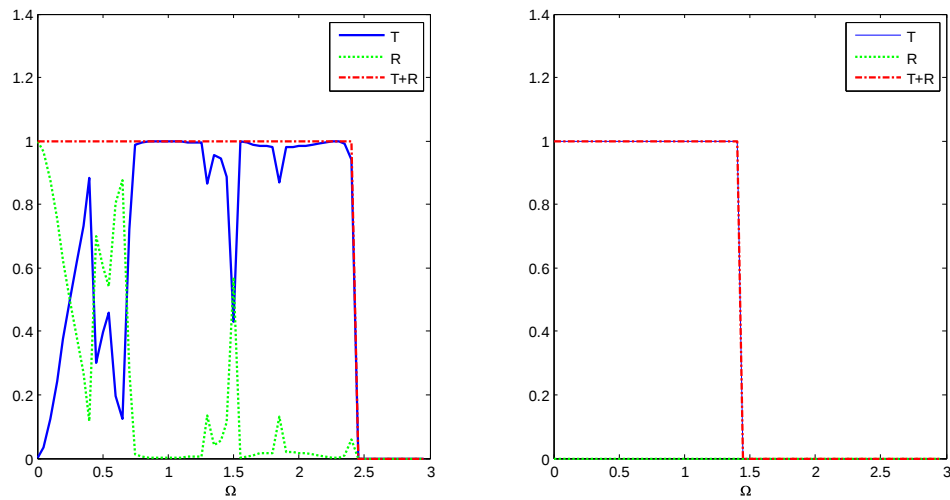


Figure (II.5.2a) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'adoucissement des contraintes.



Figure(II.5.2b) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

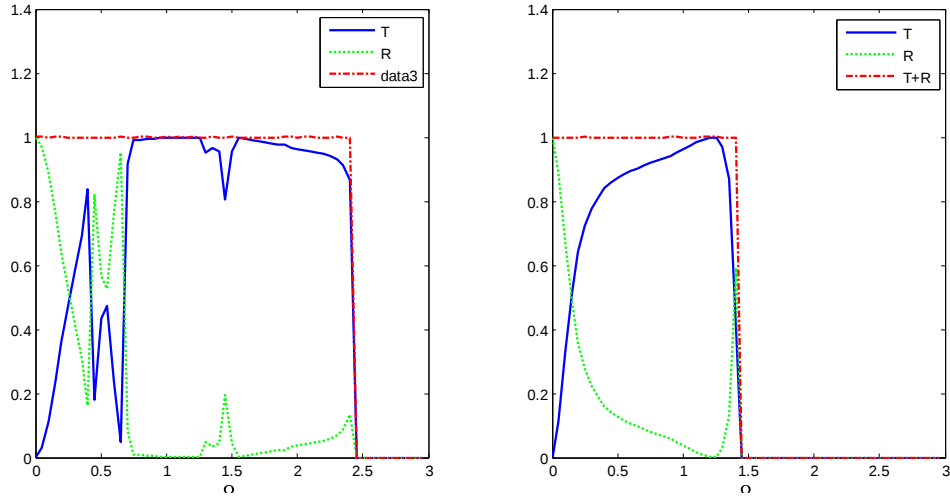


Figure (II.5.2c) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas du durcissement des contraintes.

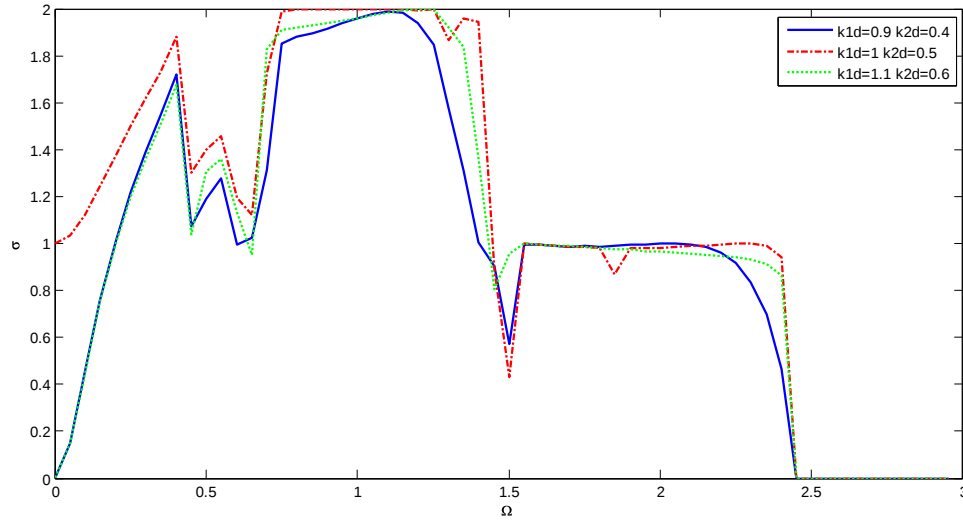


Figure (II.5.2d) : Conductance phononique pour un îlot en position Top en surface (masse homogène).

A.3/ Masse lourde : ($m_{\text{îlot}} > m_{\text{plan}}$)

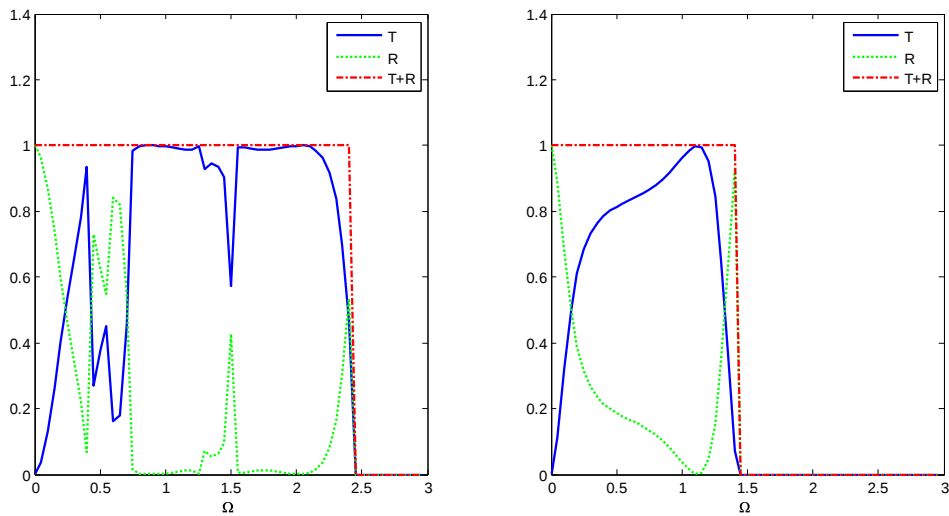


Figure (II.5.3a) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

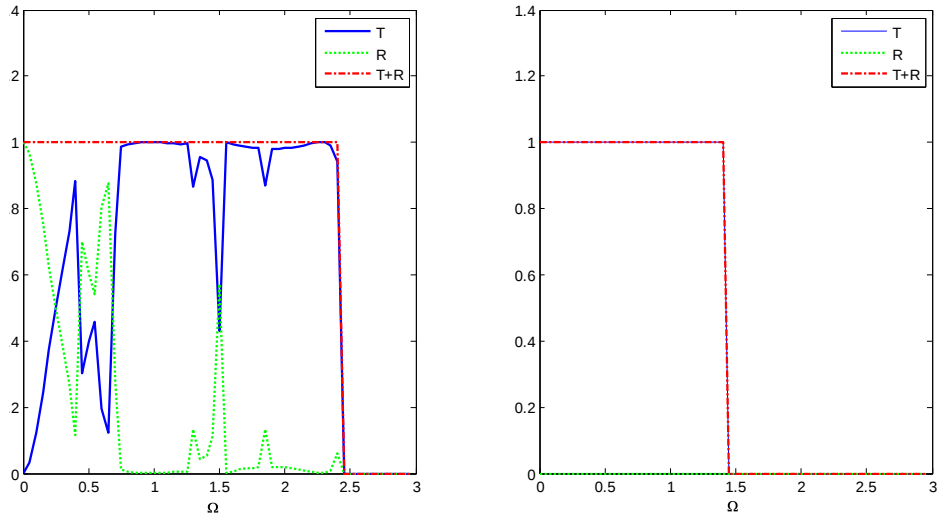


Figure (II.5.3b) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

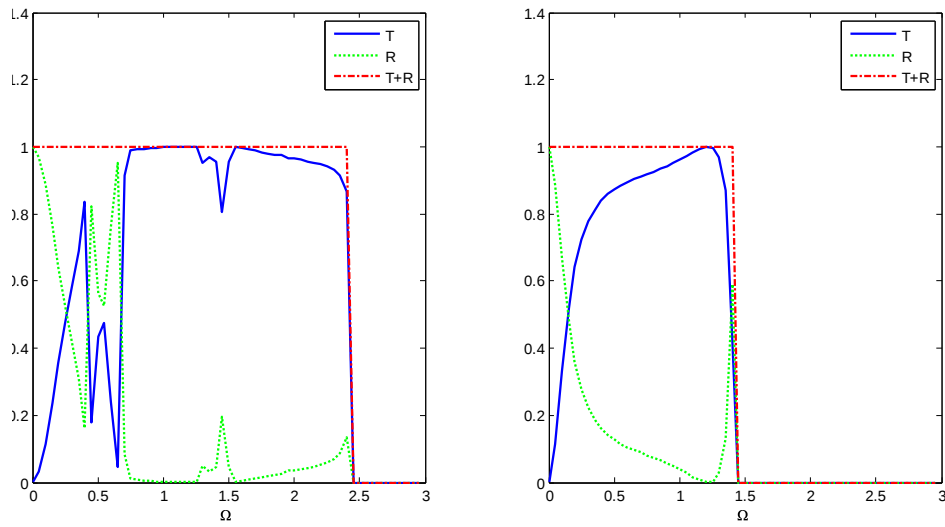


Figure (II.5.3c) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas du durcissement des contraintes.

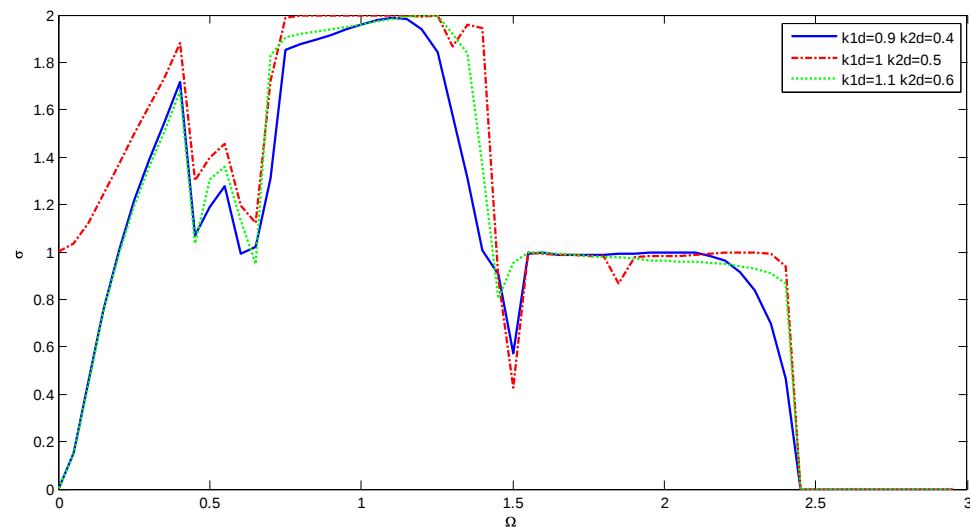


Figure (II.5.3d) : Conductance phononique pour un îlot en position Top en surface (masse lourde).

A.4/ Discussion des résultats

On constate que l'on retrouve bien les plages de fréquence des deux modes propageants de la structure parfaite, où s'effectuent la transmission et la réflexion, à savoir :

$[\Omega_{1\min} = 0, \Omega_{1\max} = 2.45]$ pour le mode (1) et $[\Omega_{2\min} = 0, \Omega_{2\max} = 1.40]$ pour le mode (2).

Pour le mode (1), on remarque que la transmission débute dans tous les cas à zéro puis présente une série de pics résonnants et de creux pour s'annuler dans la limite des fréquences maximales. Les pics observés sont liés à la présence d'états discrets à ces fréquences. Certains sont identifiés comme des résonances de type Fano dues à une interaction entre les états localisés dans la région du défaut et les modes propageant des deux sous systèmes parfaits qui se trouvent de part et d'autre de la zone présentant le dépôt atomique. Pour le mode (2), la transmission est plus régulière. En effet elle commence par une valeur nulle aux basses fréquences et augmente, pour atteindre son maximum, puis subit une décroissance pour s'annuler à la limite des hautes fréquences permises pour ce mode. La transmission dans le cas des contraintes homogènes est totale dans les trois cas de type de masse. En effet, la région du défaut retrouve l'environnement élastique du reste de la surface ($k_1 = k_{1d} = 1, k_2 = k_{2d} = 0,5$). Le défaut n'a pas d'influence pour ce mode et on observe une transmission totale. On remarque aussi que les résonances de Fano se produisent aux mêmes fréquences pour les trois types de masses et la transmission à leurs niveaux décroît avec le relâchement des contraintes. Elles sont plus nombreuses aux basses fréquences, particulièrement dans le cas des contraintes homogènes. Ce comportement de la transmission peut être dû à l'insuffisance de l'énergie des ondes élastiques à basse fréquences pour franchir le défaut; au cours de leurs déplacements elles acquièrent une énergie supplémentaire en interagissant avec les modes localisés dans la zone défaut. De plus, les ondes élastiques interfèrent entre elles dans la région perturbée et donnent lieu à des ondes résultantes, avec des longueurs d'ondes particulières, dues aux réflexions multiples par les limites du défaut.

Pour ce qui est de la conduction phononique, on remarque que pour les trois types de masses, elle est plus importante dans le cas des contraintes homogènes, où elle prend la valeur unité pour une fréquence nulle, contrairement aux cas dur et doux où elle est nulle pour une fréquence nulle. La courbe du cas dur est légèrement décalée vers le bas, puis vient celle des contraintes douces en troisième lieu. En d'autres termes, on peut dire que la conductance diminue avec le relâchement des contraintes.

Les courbes obtenues pour les trois types de masse sont identiques, ce qui signifie que la masse n'a pas d'influence sur la conductance dans la position Top.

B/ La pointe est entre deux atomes proches voisins de la surface : position Bridge

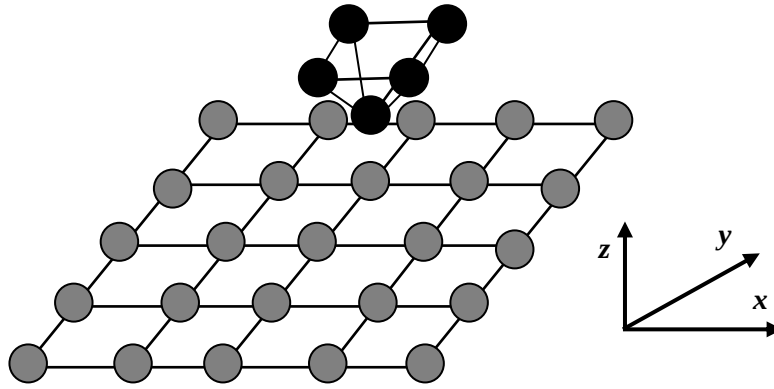


Figure (II.6) : Îlot atomique en position Bridge sur une surface plane.

Dans cette position, les équations du mouvement des atomes de la zone perturbée et des atomes de l'îlot sont au nombre de 7 fois trois degrés de liberté, celles des atomes de raccordement au nombre de 2 fois deux degrés de liberté et enfin celles des sites adjacents au nombre de 2 fois deux degrés de liberté. On obtient une matrice rectangulaire D de taille (25×29) . Le produit de la matrice D obtenue avec la matrice de raccordement du système R donne une matrice carrée $S(25 \times 25)$.

Les états vibrationnels de notre système sont déterminés par la relation de compatibilité : $\det([S(25 \times 25)]) = 0$.

- Courbes des coefficients de transmission (T), réflexion (R) et de la conductance (σ) en fonction de la fréquence de diffusion :

B.1/ Masse légère ($m_{\text{îlot}} < m_{\text{plan}}$)

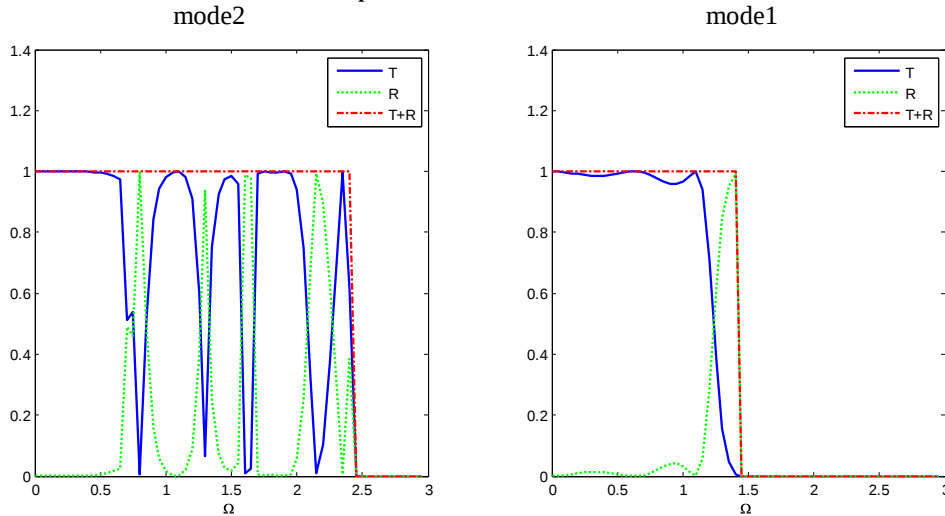


Figure (II.6.1a) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

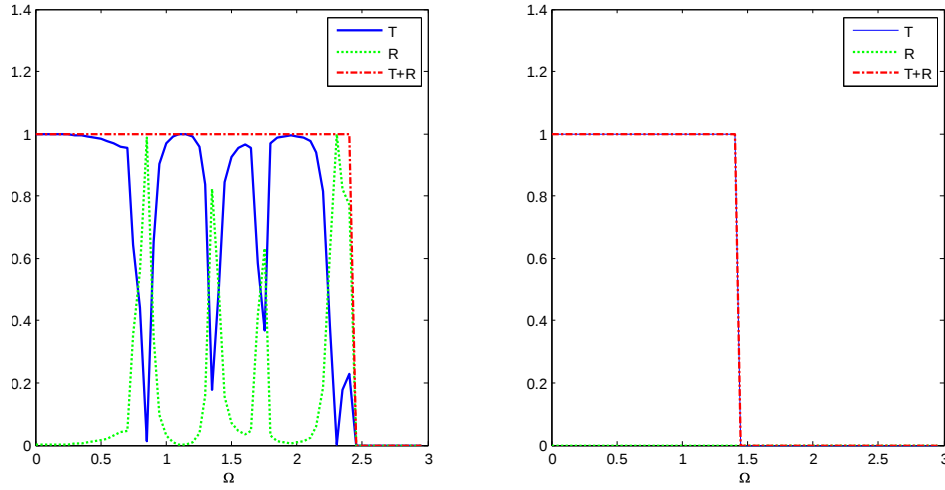


Figure (II.6.1b) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

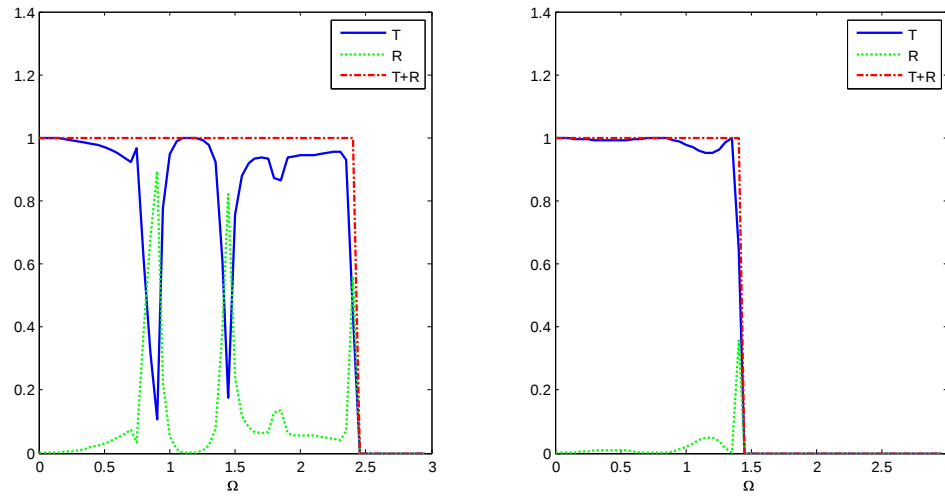


Figure (II.6.1c) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas du durcissement des contraintes.

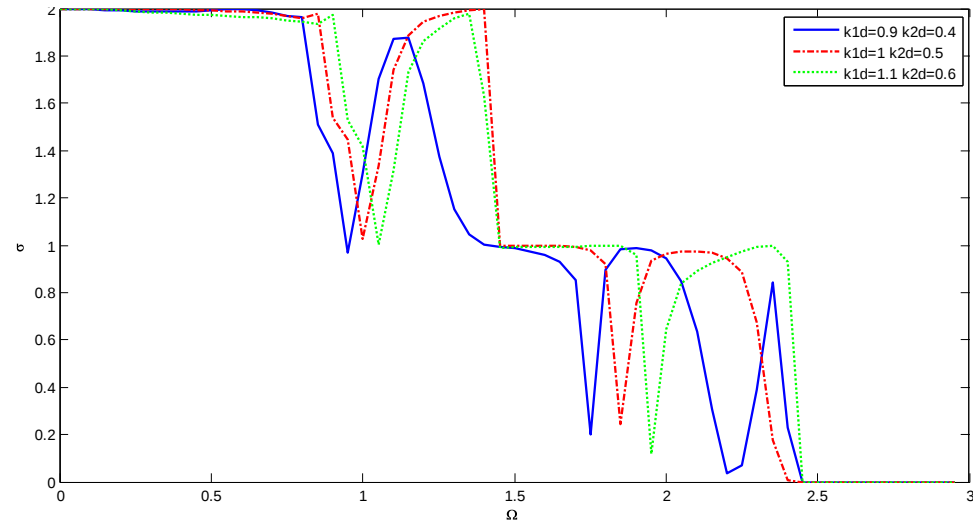
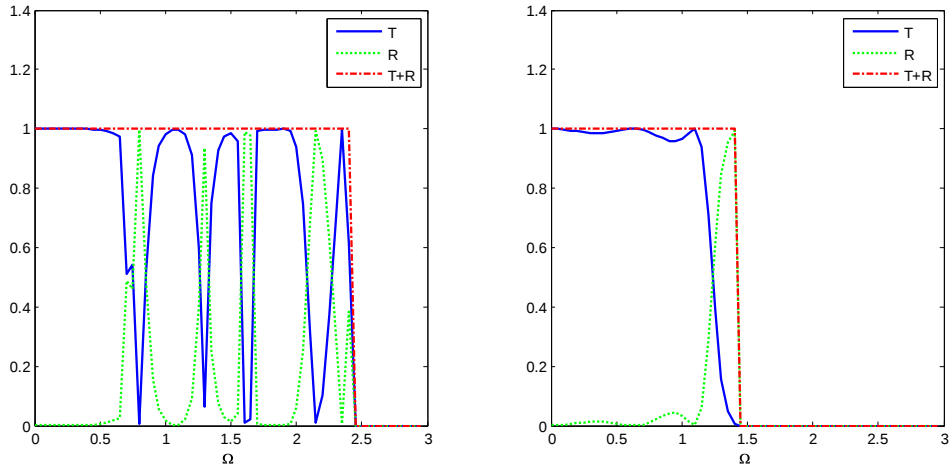
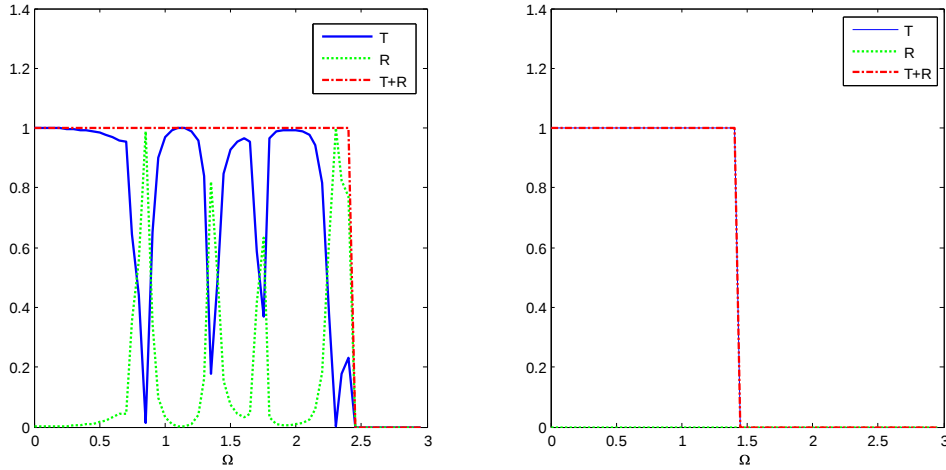
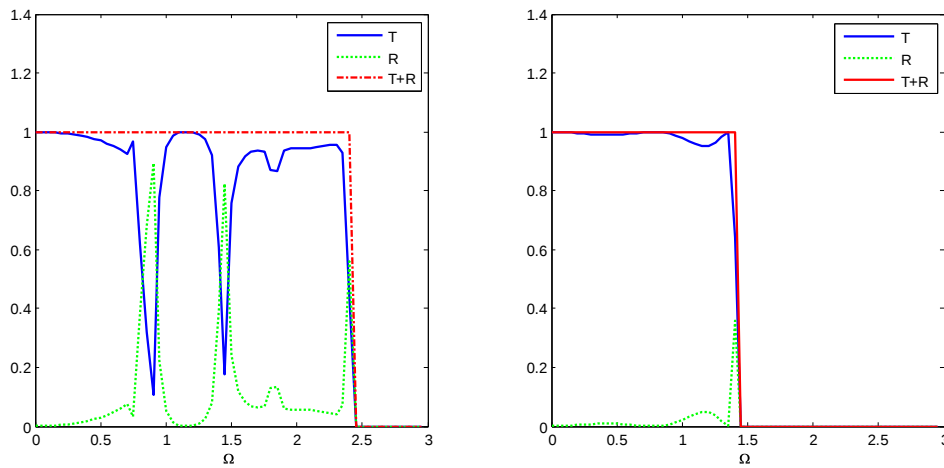
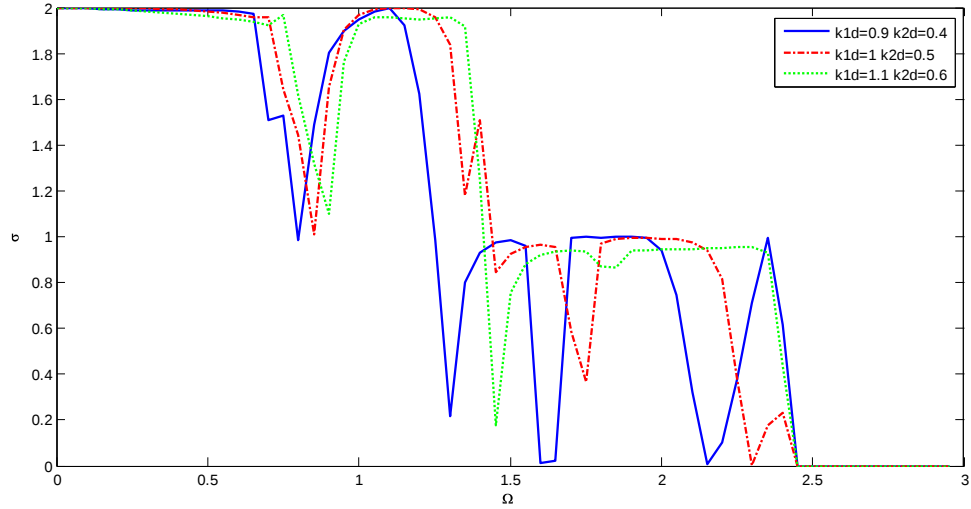


Figure (II.6.1d) : Conductance phononique pour un îlot en position Bridge en surface (masse légère).

B.2/ Masse homogène ($m_{\text{îlot}} = m_{\text{plan}}$)**Figure (II.6.2a)** : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'adoucissement des contraintes.**Figure (II.6.2b)** : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'homogénéité des contraintes.**Figure(II.6.2c)** : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas du durcissement des contraintes.



Figure(II.6.2d) : Conductance phonique pour un îlot en position Bridge en surface (masse homogène).

B.3/ Masse lourde ($m_{\text{îlot}} > m_{\text{plan}}$)

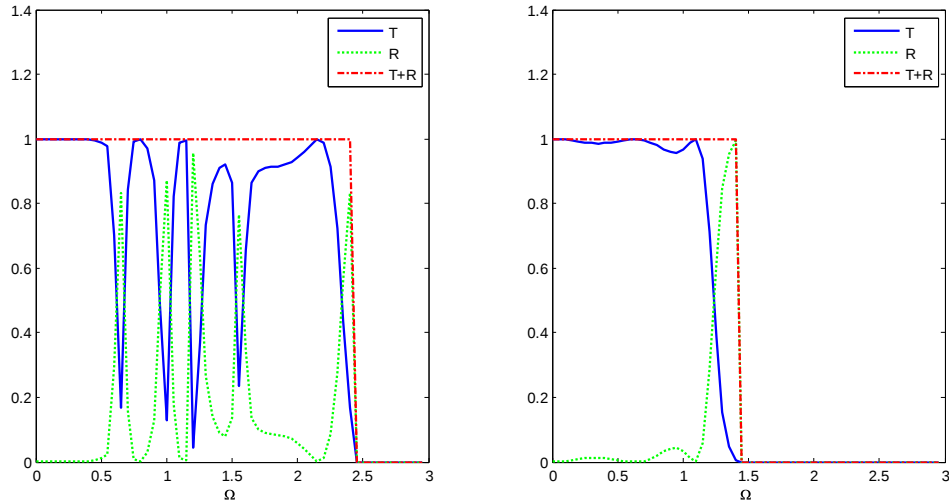
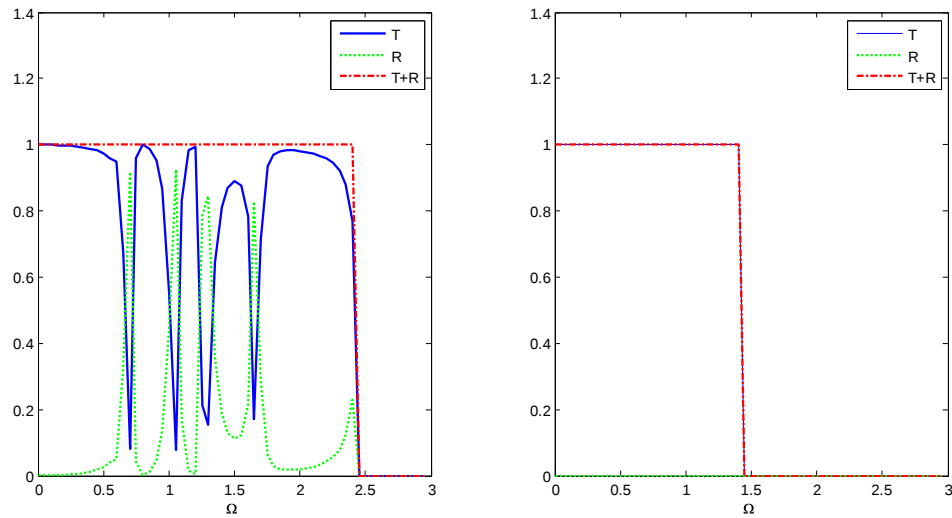
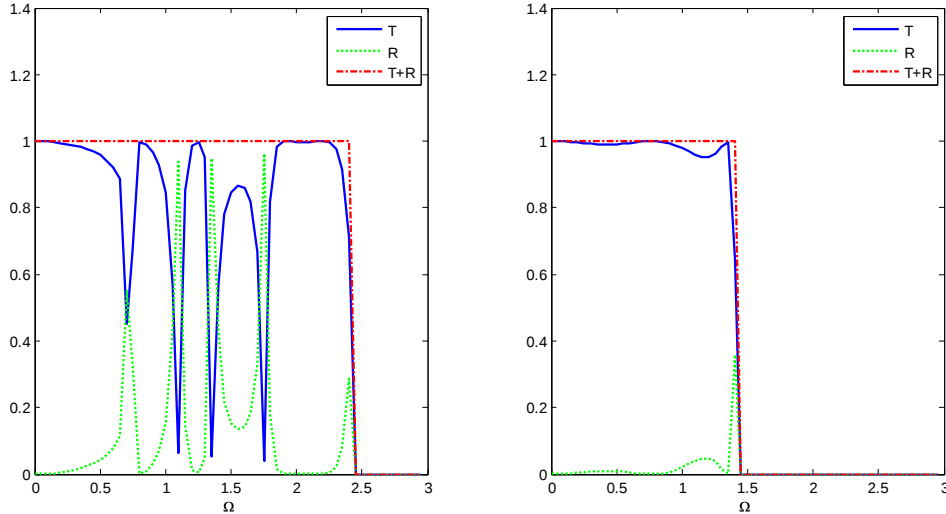


Figure (II.6.3a) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'adoucissement des contraintes



(II.6.3b) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'homogénéité des contraintes.



Figure(II.6.3c) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas du durcissement des contraintes.

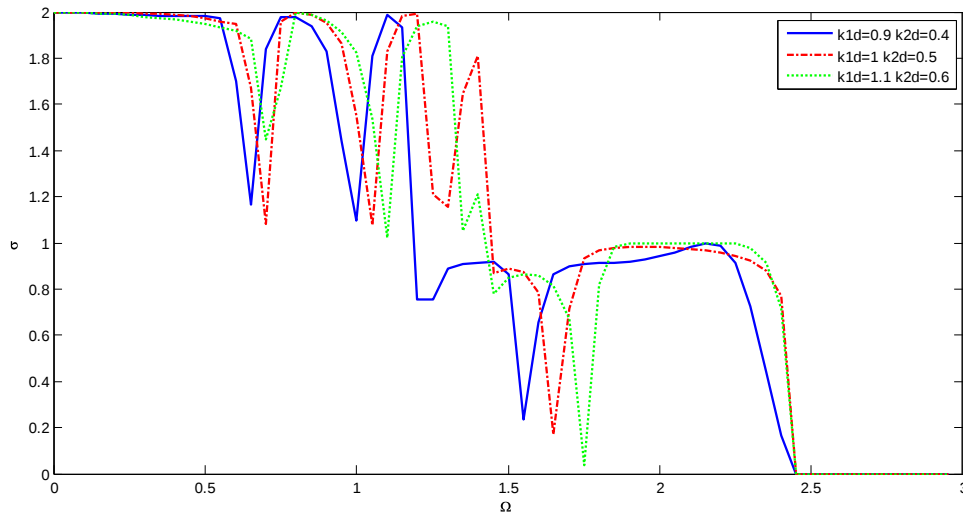


Figure (II.6.3d) : Conductance phononique pour un îlot en position Bridge en surface (masse lourde).

B.4/ Discussion des résultats

Comme dans le cas de la position Top, les courbes de transmission et de réflexion se limitent aux plages de fréquences permises pour les modes (1) et (2).

Dans la position Bridge, la transmission dans le mode (1) est maximale pour une fréquence nulle, puis elle présente une série de minimas proches de zéro et de maximas proches ou égaux à l'unité, et s'annule pour des hautes fréquences. Les résonances de Fano sont rencontrées particulièrement pour des contraintes douces et homogènes aux fréquences élevées, et pour des contraintes dures aux basses fréquences.

Pour le mode (2), la transmission est totale pour des contraintes homogènes, tandis que pour des contraintes douces et dures elle est maximale uniquement aux hautes fréquences avant de s'annuler.

On remarque que les résonances Fano sont moins nombreuses pour cette deuxième configuration. Ceci est dû probablement aux états localisés au niveau de la zone défaut qui sont moins nombreux par rapport au premier cas (position Top). Les résonances Fano du mode (1) pour les hautes fréquences diminuent jusqu'à la disparition avec le durcissement des constantes de force dans les trois cas de types masse. Pour le mode (2), la courbe de transmission du cas des contraintes dures est légèrement décalée vers les hautes fréquences par rapport à celles des constantes douces pour tous les types masse.

La conductance a la même allure pour les trois types de contraintes considérées avec un léger décalage vers les hautes fréquences de la courbe du cas homogène puis du cas dur. Elle est maximale (égale à 2) pour des fréquences nulles, et s'annule à la limites des fréquences permises du mode (1) pour les masse légère et lourde. Pour le cas de la masse homogène, la conductance s'annule pour d'autres fréquences au-delà de la fréquence limite du mode (2).

C/ La pointe est au centre de quatre atomes de la surface : position Hollow

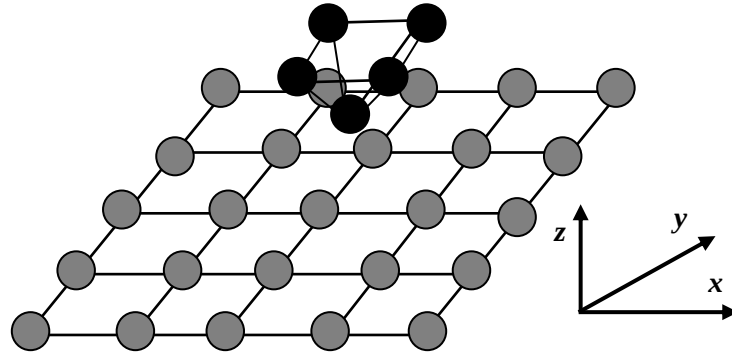


Figure (2.7) : Position Hollow.

La configuration ci-dessus nous permet d'écrire les équations du mouvement des atomes de la zone perturbée et des atomes de l'îlot qui sont cette fois aussi au nombre de 7 fois trois degrés de liberté, celles des atomes de raccordement au nombre de 2 fois deux degrés de liberté et enfin celles des sites adjacents au nombre de 2 fois deux degrés de liberté. On obtient une matrice rectangulaire D de taille (25×29) .

Le produit de la matrice D obtenue avec la matrice de raccordement du système R donne une matrice carrée $S(25 \times 25)$. Les états vibrationnels de notre système sont déterminés par la relation de compatibilité : $\det([S(25 \times 25)]) = 0$.

- Courbes des coefficients de transmission (T), réflexion (R) et de la conductance (σ) en fonction de la fréquence de diffusion :

C.1/ Masse légère : ($m_{\text{îlot}} < m_{\text{plan}}$)

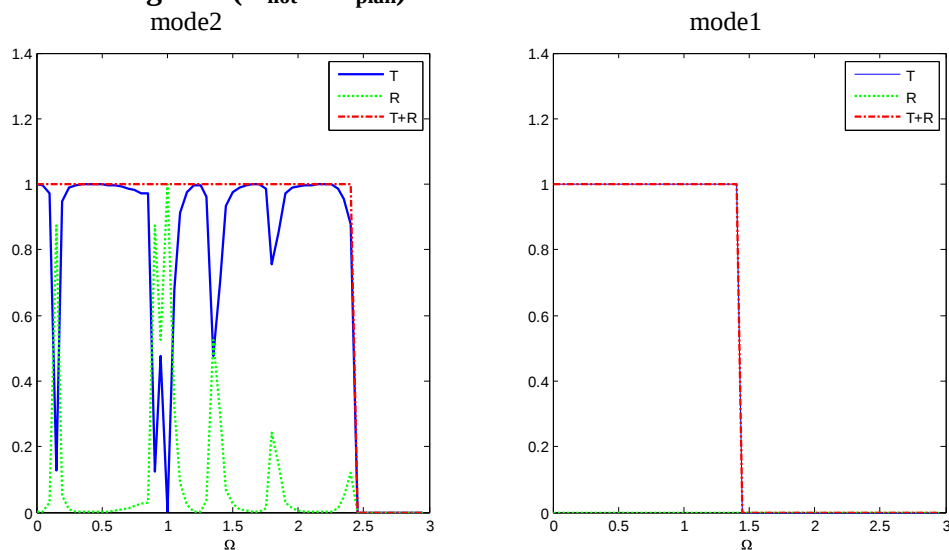


Figure (II.7.1a) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

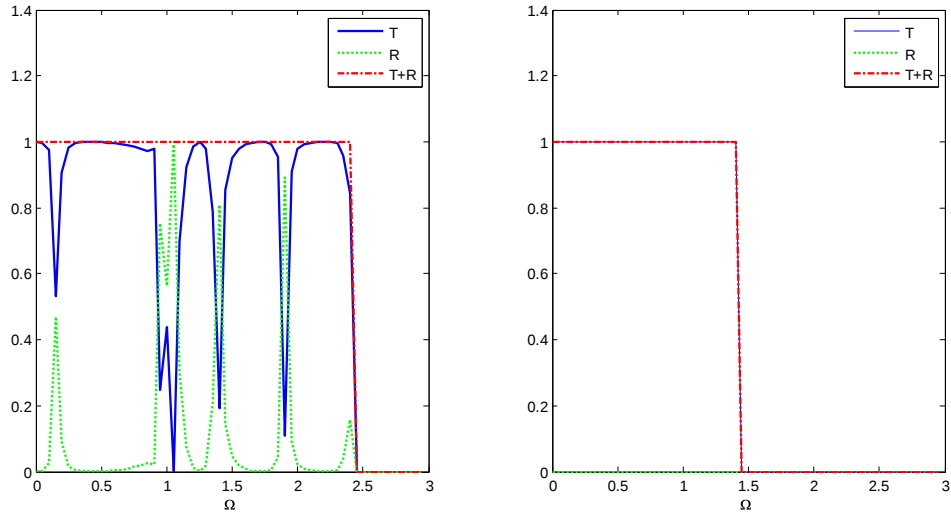


Figure (II.7.1b) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

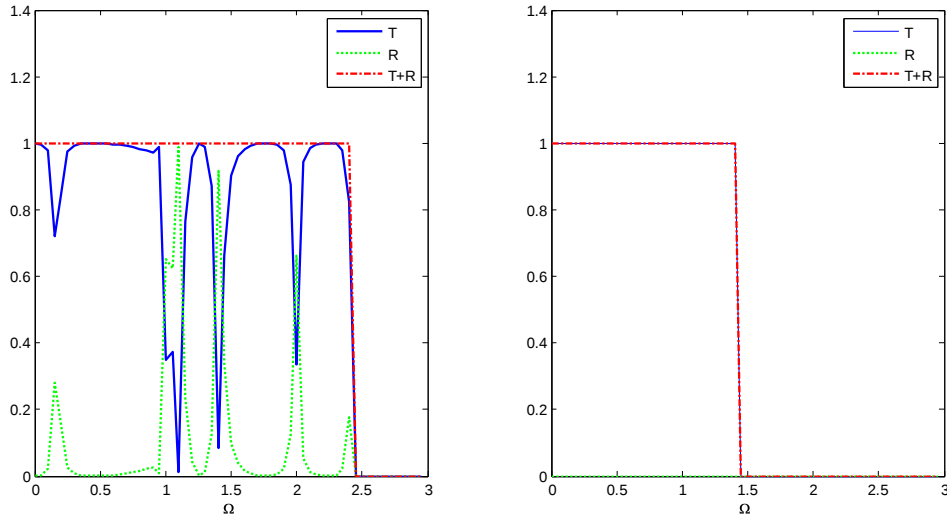


Figure (II.7.1c) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas du durcissement des contraintes.

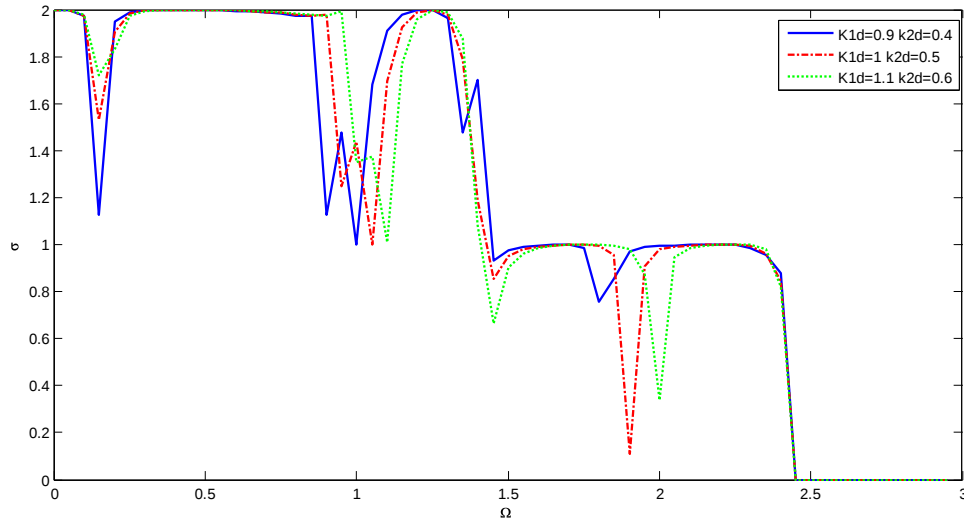


Figure (II.7.1d) : Conductance phononique pour un îlot en position Hollow en surface (masse légère).

C.2/ Masse homogène : ($m_{\text{îlot}} = m_{\text{plan}}$)

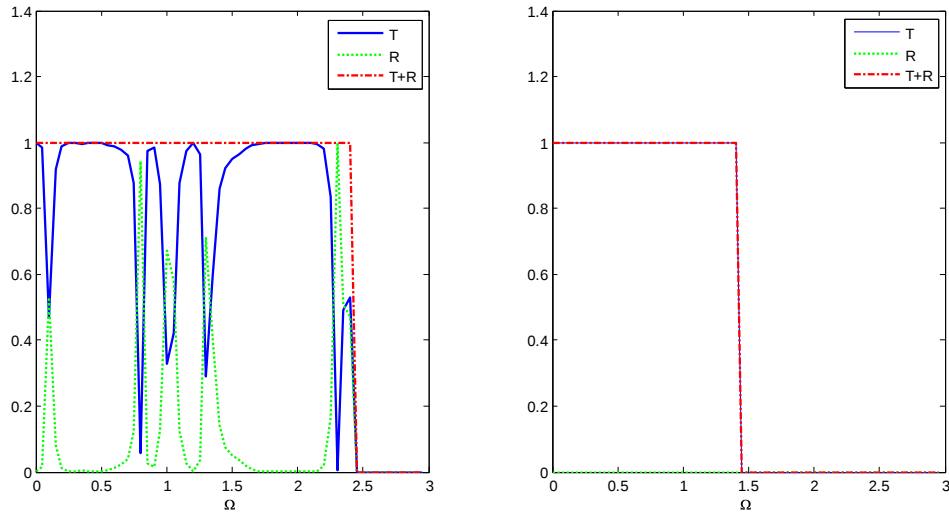


Figure (II.7.2a) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

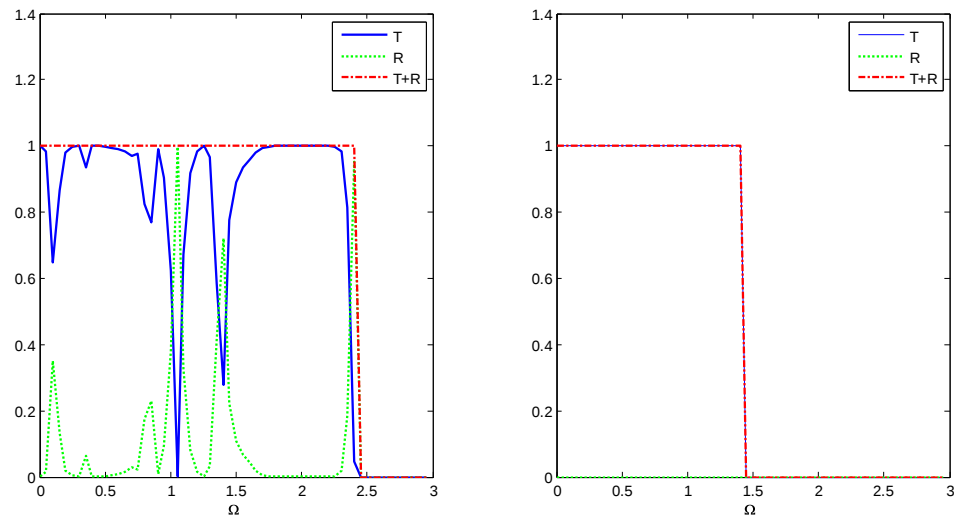


Figure (II.7.2b) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

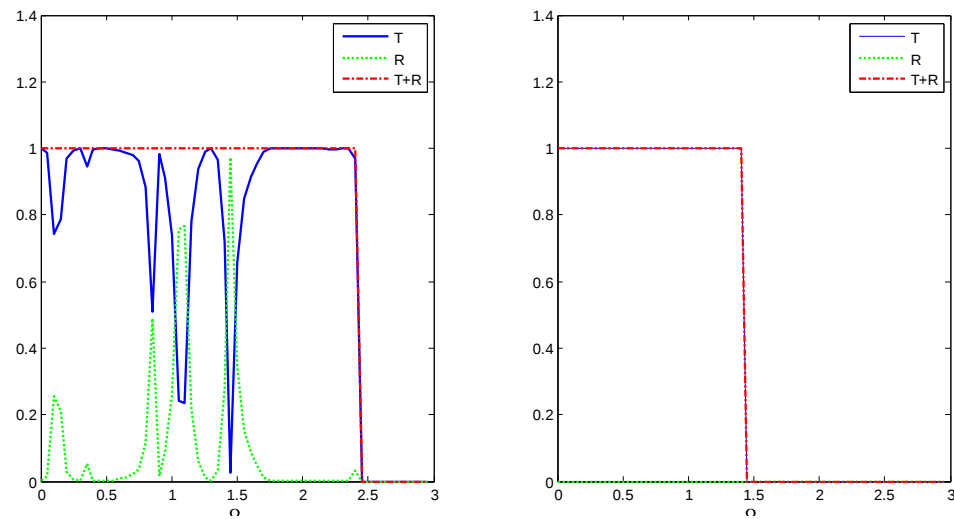


Figure (II.7.2c) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas du durcissement des contraintes.

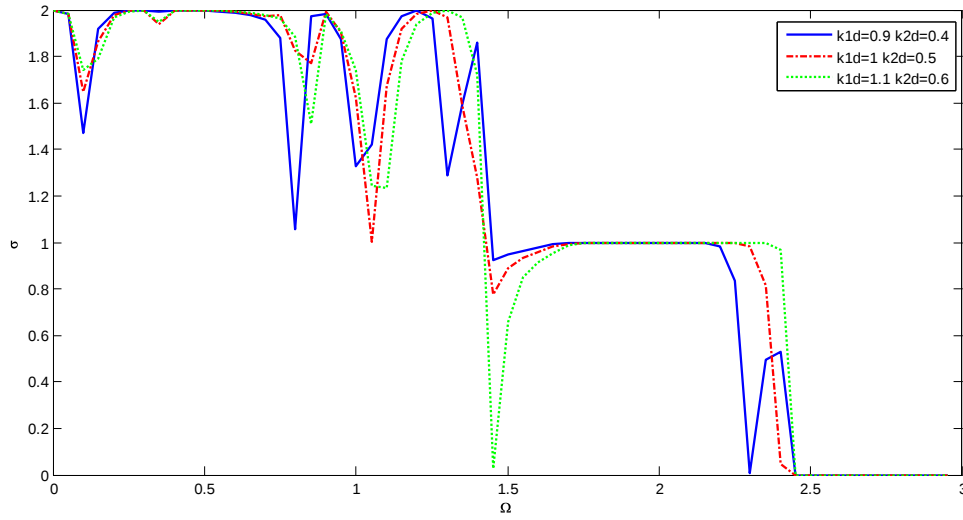


Figure (II.7.2d) : Conductance phononique pour un îlot en position Hollow en surface (masse homogène).

C.3/ Masse lourde ($m_{\text{îlot}} > m_{\text{plan}}$)

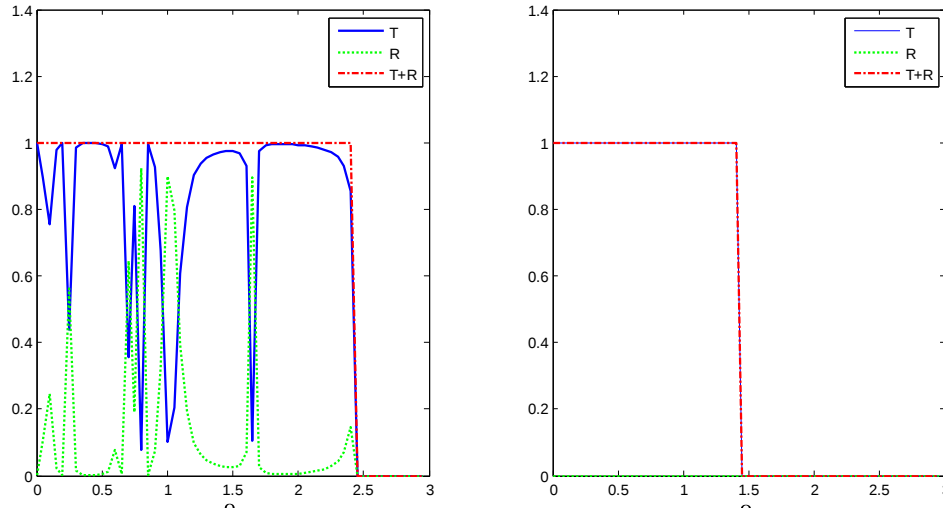


Figure (II.7.3a) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

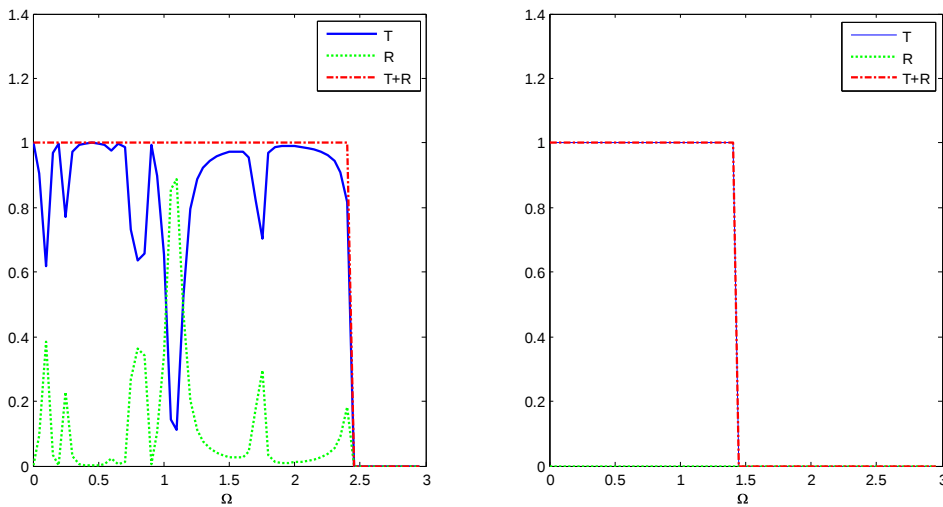


Figure (II.7.3b) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

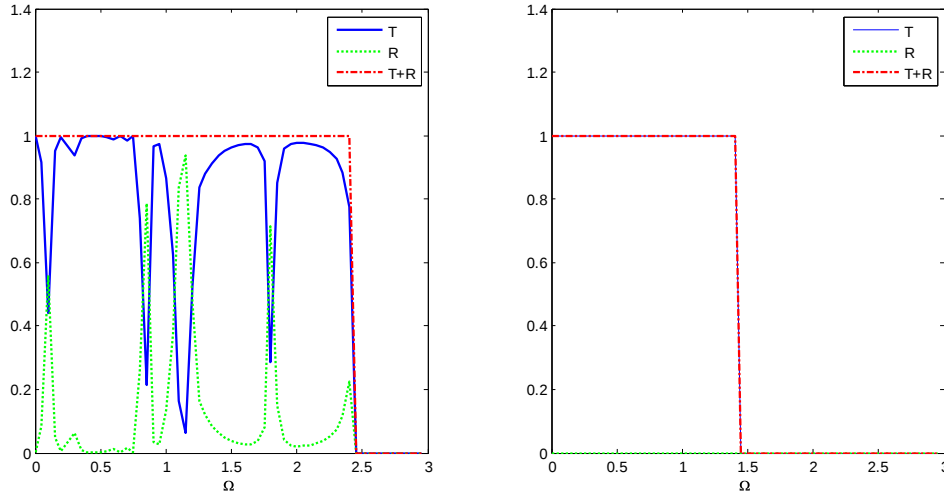


Figure (II.7.3c) : Transmission et réflexion d'ondes élastiques dans le cas du durcissement des contraintes.

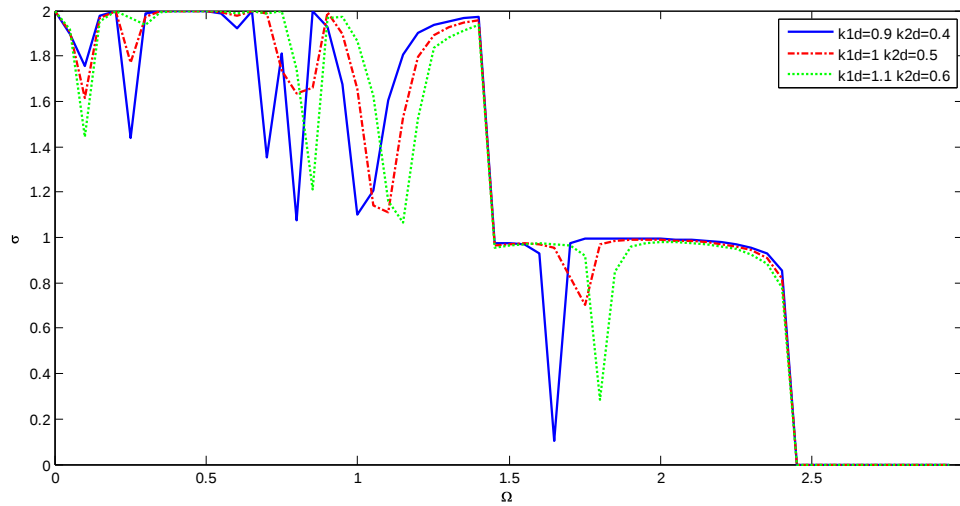


Figure (II.7.3d) : Conductance phononique pour un îlot en position Hollow en surface (masse lourde).

C.4/ Discussion des résultats

La transmission et la réflexion dans la position Hollow se limitent comme les deux cas précédents (Top et Bridge) aux domaines de propagation permis pour les modes (1) et (2). Dans le cas du mode (1), la transmission est maximale (égale à 1) pour une fréquence nulle, puis présente des oscillations irrégulières et asymétriques qui peuvent s'annuler pour certaines fréquences, dans le cas de masse légère et homogène des atomes de l'îlot. Les résonances Fano ne sont pas très présentes pour ces deux cas, contrairement au cas de la masse lourde, où elles sont nombreuses particulièrement pour des constantes élastiques douces. On notera également que dans ce cas particulier, la transmission commence à zéro (fréquence nulle) et s'annule après chaque résonance et à la limite des valeurs de

fréquences permises pour ce mode. Avec le durcissement des contraintes, la transmission commence de nouveau à son maximum, et les oscillations sont moins visibles.

C'est pour le mode (2) que le comportement de la transmission est particulier ; en effet, on remarque que la transmission est totale dans tous les cas des constantes de force et pour les différents types de masse considérés. On dira que le défaut laisse passer les ondes élastiques sans aucune influence.

La conductance, à quelques différences près, présente une allure similaire pour les différentes contraintes de forces dans le cas de la masse légère et homogène, avec un décalage vers les hautes fréquences avec le durcissement des contraintes, et une valeur maximale (égale à 2) à très basses fréquences. Mais pour le cas de masse lourde, son comportement est complexe aux basses fréquences, pour terminer en allures similaires et décalées aux hautes fréquences, notamment au-delà des fréquences du mode (2).

Conclusion & perspectives

Il y a des caractéristiques générales qui sont communes aux trois configurations et un certain comportement spécifique pour chaque position. Ceci nous permet de mettre en évidence l'influence de la position de l'îlot sur la propagation des ondes élastiques sur les surfaces atomiques. La somme des deux coefficients de transmission et de réflexion est égale à l'unité ($T+R = 1$) dans les trois configurations d'îlots atomiques examinées dans ce travail, d'où l'utilisation de cette propriété comme test pour nos calculs numériques.

En comparant les conductances des trois positions, on peut conclure qu'aux faibles fréquences (fréquences du mode (2)), ce sont les positions Bridge et Hollow qui favorisent la transmission, et au-delà de la limite supérieure permise pour ce mode, c'est la position Top qui présente une meilleure transmission.

Nous retiendrons que cette étude a permis de mettre en évidence l'influence de certains paramètres tels que la variation des valeurs des constantes de forces et de la masse des atomes de l'îlot sur la transmission des ondes élastiques se propageant dans une surface plane. La conductance étant la somme des contributions des modes individuels de transmission en une seule courbe, on constate qu'elle varie en fonction de ces paramètres, et se trouve par conséquent être le siège de résonances dues aux interactions entre les états propageant du système et les nouveaux états localisés créés au voisinage de la zone contenant l'îlot atomique. L'amplitude de ces résonances est fortement dépendante des fréquences excitatrices, des constantes de forces de liaison interatomiques du système et de la masse des atomes qui constituent le défaut.

L'étude de tels systèmes peut être exploitée afin d'améliorer la qualité des pointes utilisées pour explorer et caractériser les surfaces des matériaux et éviter leur destruction ou la modification de leurs propriétés vibrationnelle, magnétique, électrique, etc.

Ceci ouvre de larges perspectives dans ce domaine parmi lesquelles on citera :

- L'étude des nanomatériaux dans leur environnement réel (tenir compte des interactions avec un solide).
- La résolution du problème pour des géométries plus complexes. Reprendre le calcul pour des pointes proches de celles des AFM.
- Augmenter le nombre de paramètres décrivant les interactions entre les atomes.
- Etude de l'effet de la présence d'autres défauts en même temps au niveau de la surface et prise en considération de l'anisotropie de la surface.

Références

- [1] R. Feynman, American Physical of Society Conference, December (1959).
- [2] G. Iannaccone, Nano et Micro Technologies, Vol 3/1-2, pp.143-152 (2003).
- [3] V. R. Yusupov, V. Kabanov, D. Milhailovic, K. Conderek, H. Keller and A. Müller, Physica C, Vol 460-462, pp. 801-802 (2007).
- [4] I. V. Stiopkin, C. Weeraman, P. A. Pieniazek, F. Y. Shalhout, J. L. Skinner and A. V. Benderskii, Nature 474, 192–195 (2011).
- [5] M. C. Roco : « Research Programs on nanotechnology in the world », in : *Nanostructure science and technology R&D status and trends in nanoparticles, nanostructured materials, and nanodevices*, Chapitre 8, WTEC, (1999).
- [6] « Nanocomposites à charges lamellaire et matrice polymère », 2003 compte d'un atelier de prospective sur le sujet, Belgium Polymer Group, ARAMM, INSA- Lyon, FPL
- [7] S. Andrieu et P Müller, *Les surfaces solides : concepts et méthodes* , Editeur : EDP Sciences (Date de Parution : 09/2005).
- [8] Paul K. Hansma and Jerry Terssof, J. Appl. Phys. 61, R1 (1987);
- [9] G. Binning, C. F. Quate, and Ch. Gerber, Phys. Rev. Lett. 56, 930 (1986) ; T. R. Albrecht and C. F. Quate, J. Appl. Phys. 62, 2599 (1987).
- [10] A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss et I. Ipateva, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, Supplement 3, Academic Press, New York and London (1971).
- [11] C. Kittel, Introduction à la Physique de l'état Condensé, Dunod édition (1995).
- [12] M. Baldauf and D. M. Kolb, J. Phys. Chem. 100,11375 (1996).
- [13] J. Tang, M. Petri, L.A. Kibler, and D. M. Kolb, Electrochimica Acta. 51, 125 (2005).
- [14] B. S. Mun, C. Lee, V. Stamenkovic, N. M. Markovic, and P. N. Ross, Phys. Rev. B. 71, 115420 (2005).
- [15] M. A. Van Hove and G. A. Somorjai, Surf. Sci. 92, 489-518 (1980).
- [16] L. J. Clarke, *Surface Crystallography: An Introduction to Low Energy Electron Diffraction*, John Wiley, New York, (1985).
- [17] E. Bauer, *Techniques for the direct observations of structure and imperfections*, Vol. II, Part. 2, Ed. R.F. Bunshah, Wiley-Interscience, New York, (1969).
- [18] P. Auger, J. Physique Rad. 6, 205 (1925).
- [19] A. Cornet et J. P. Deville, *Physique et Ingénierie des Surfaces*, EDP Sciences Les Ulis, (1998).
- [20] A. Michael and Dutta Mitra, *Phonons in Nanostructures*, Cambridge (2004)
- [21] B. Bourahla, Thèse de doctorat, université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2007).
- [22] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater, R. Tigrine, Physica E 43, 1213-1218 (2011).
- [23] B. Bourahla, O. Nafa, R. Tigrine, Physica B 406, 725-730 (2011).
- [24] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater and R. Tigrine, TECHNISCHE MECHANIK, 32, 2-5, (2012), 113-117; R. Chadli, Thèse de doctorat, université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2012).
- [25] M. Born et T. Von Karman, Z. Physik 13, 297 (1912).
- [26] G. I. Stegemann and F. Nizolli, *Surface Excitation*, ed. V. M. Agronovich and R. London, Amsterdam: North Holland (1984).
- [27] R. E. Allen, G. P. Alidrege, et FW DE Wette, Phys. Rev. 4, 1648 (1971).
- [28] R. A. Allen, Surf. Sci 76, 91 (1978).
- [29] George Green, J. für die reine und angewandte Mathematik n° 39 (1850).
- [30] E. J. Mele and M. V. Pykhtin, Phys. Rev. Lett. 75, 3878 (1995).
- [31] A. Kara, S. Durukanoglu and T. Rahim, Phys. Rev. B 53, 15489 (1995).
- [32] Ch. Brouder, Europhys. Lett. 71, 556 (2005).
- [33] Ch. Brouder, J. Math. Chem. 44 (2008).
- [34] T. E. Feuchtwang, phy. Rev. 155, 731 (1967).
- [35] J. Szeftel and A. Khater, phys. Rev. C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987).
- [36] A. Khater and W. Czaja, Physica B167, 33 (1990).
- [37] A. Khater, N. Auby, D.Kechrakos, J. Phys.: Condensed Matter 4, 3743 (1992).
- [38] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlouvet, and A. Khater, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997).
- [39] A. Fellay, Rapport Master d'ingénieur physicien, EPF de Lausanne (1996).
- [40] R. Landauer, J. Phys.: Condensed Matter 1, 8099 (1989).

Résumé

L'évolution technologique permet, aujourd'hui, la fabrication et l'étude des dispositifs physiques miniaturisés (films minces, fils quantiques et même de nano-objet). Souvent ces systèmes ont des structures perturbées par l'existence des inhomogénéités qui modifient considérablement le phénomène de transport électronique, magnétique et vibrationnel etc.

Dans ce mémoire, nous montrons comment un îlot atomique, présent sur une surface métallique, modifie ses propriétés dynamiques. Nous avons quantifié, aussi, le transport phononique et la diffusion d'ondes élastiques de ces surfaces, en fonction de la position de l'atome qui assure le contact ponctuel entre le dépôt et les sites atomiques de la surface. L'objectif est de savoir comment ce type de nanostructure atomique pourrait servir de "pinces crocodiles" pour mesurer la conductance d'une molécule déposée sur une surface métallique.

Nous avons examiné, principalement, trois différentes possibilités de positionnement du point contact en surface : la première correspond à la situation où la pointe de l'îlot est au-dessus d'un site de la surface (Top) ; dans le deuxième cas, la pointe est placée entre deux atomes successifs (Bridge), la troisième décrit la situation où la pointe est placée au centre de quatre atomes de la surface (Hollow).

Pour chaque configuration, la dynamique de la surface et la diffusion d'ondes sont analysées pour différents valeurs de la masse des atomes de l'îlot atomique, et de l'environnement élastique dans la zone propre du point contact atomique entre le dépôt et la surface. Ceci permet d'étudier l'influence de l'adoucissement et du durcissement des constantes de forces sur les propriétés du système examiné.

La méthode de raccordement est employée pour calculer les spectres de transmission et de réflexion d'ondes élastiques par les îlots atomiques déposés sur les surfaces atomiques. La dynamique de la surface est déterminée en utilisant les équations du mouvement, en se basant sur la deuxième loi de Newton. Cette technique permet également de remonter aux modes localisés de phonons au voisinage de la zone contenant les dépôts atomiques en surface. Les coefficients de transmission, réflexion et la conductance totale de phonons, sont calculés comme les éléments d'une matrice de diffusion du type Landauer, par analogie avec le transport électronique cohérent.

Les résultats numériques montrent les effets caractéristiques d'interférence entre les phonons incidents et les états localisés de chaque position d'îlot atomique. Les pics observés sont identifiés comme étant des résonances de type Fano. Avec la variation des paramètres élastiques dans le domaine propre du point contact atomique, nous démontrons la possibilité de pouvoir fabriquer matériellement un filtre pour certains phonons du système, et éventuellement un amplificateur pour d'autres.

Mots Clés : Dynamique des surfaces métalliques ; Ilots atomiques ; Contact ponctuel ;

Diffusion d'ondes élastiques.