

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU

FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE CHIMIE



*DOMAINE : SCIENCES DE LA MATIERE*

*FILIERE : CHIMIE*

## ***MEMOIRE DE MASTER***

*SPECIALITE : CHIMIE-PHYSIQUE*

### Sujet

**Propriétés dynamiques d'une surface métallique dans des structures CFC suivant les directions de haute symétrie**

Présenté par **ATTAB Amine**

Soutenu, le 25/06/2024, devant la commission d'examen composée de :

<b>M<sup>r</sup> Boualem BOURAHLA</b>	<b>Professeur</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Président</b>
<b>M<sup>me</sup> Fazia LEKADIR</b>	<b>MCB</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Rapporteuse</b>
<b>M<sup>me</sup> Malika BOUCHERRAB</b>	<b>MCA</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Examinatrice</b>
<b>M<sup>me</sup> Zahra NAIT ABDELLAH</b>	<b>MCA</b>	<b>UMMTO</b>	<b>Examinatrice</b>

# **Remerciements**

*Je tiens à exprimer mes plus vifs remerciements à Madame LEKADIR Fazia de l'Université Mouloud Mammeri de m'avoir dirigé et encadré avec compétence et patience. Ses aides précieuses et ses conseils m'ont permis de mener à terme mon travail. Qu'elle trouve ici ma profonde reconnaissance*

*J'exprime toute ma gratitude au Professeur BOURAHLA Boualem de l'Université Mouloud Mammeri qui m'a fait l'honneur d'assurer la présidence du jury.*

*Je tiens à exprimer, aussi, ma reconnaissance aux membres du jury : Dr NAIT ABDELLAH Zahra et Dr BOUCHERRAB Malika de l'Université Mouloud Mammeri, pour l'honneur qu'elles m'ont fait d'avoir acceptées d'examiner mon travail de mémoire.*

*Je tiens à remercier tous les membres de ma famille particulièrement mes chers parents, ainsi que mes amis et toute personne qui a contribué de près ou de loin à la réalisation de ce modeste travail.*

**Amine ATTAB**

## Table des matières

Introduction générale.....	3
Chapitre I : Dynamique des réseaux.....	5
Introduction .....	5
I. 1. Réseaux de bravais tridimensionnels .....	5
I. 2. Différents types de défauts.....	6
I. 2. 1. Défauts ponctuels.....	7
I. 2. 2. Défauts linéaires.....	8
I. 2. 3. Défauts plans (bidimensionnels).....	9
I. 2. 4 : Les défauts tridimensionnels.....	9
I. 3. Les phonons .....	10
I. 3.1. Les différents types de phonons.....	10
Chapitre II : Généralités sur la dynamique vibrationnelle.....	12
Introduction .....	12
II.1. Dynamique vibrationnelle des systèmes ordonnés .....	12
II. 2. Dynamique vibrationnelle des systèmes désordonnés.....	15
II. 2. 1 Méthodes théoriques utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes désordonnés.....	15
II. 2. 1. 1. La méthode de diagonalisation directe .....	15
II. 2. 1. 2. La méthode des fonctions de Green.....	16
II. 2. 1.3. La méthode de raccordement.....	17
II. 3. Calcul des densités d'états vibrationnelles .....	20
Conclusion.....	21
Chapitre III : Propriétés vibrationnelles d'une surface alliage ordonnée Cu/Pt (111) .....	22
Introduction .....	22
III. 1. Les trois structures cubiques à faces centrées dans les directions [100], [110], et [111]. .....	22
III. 2. Première zone de Brillouin et direction de symétrie de la surface [111].....	23
III. 3. Représentation d'une structure cristalline dans un CFC [111].....	25
III. 4. Dynamique vibrationnelle d'un guide d'ondes parfait.....	26
III. 5. Courbes de dispersion .....	28
<b>III. 6.</b> Calcul des facteurs de phase.....	30
III. 7. Matrice dynamique du système de surface alliage <b>Cu – Pt[111]</b> .....	30
III. 8. Matrice de raccordement.....	32
III. 9. Les états localisés .....	34

---

III. 9. 1. Les états localisés au niveau d'une surface propre en platine Pt(111) .....	34
III. 9. 2. Les états localisés au niveau d'une interface alliage Cu- Pt(111) .....	35
III.10. Densité d'état vibrationnelle .....	366
Conclusion générale .....	39
Références bibliographiques .....	40

## Introduction générale

Les nanomatériaux sont des structures avec l'une de leurs grandeurs qui varie sur une échelle de quelques nanomètres. Ces matériaux peuvent, ainsi, se présenter sous plusieurs formes selon le caractère nanostructuré. On peut distinguer les nanoparticules, les films minces, les multicouches, les poudres nanostructurées (particules microniques constituées de grains nanométriques), les alliages nanocristallins (nanograins cristallins au sein d'une matrice métallique amorphe), les clusters dispersés dans une matrice, etc.

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

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

Ce travail de mémoire constitue une étude théorique accompagnée de simulations numériques. Il est consacré à la description de la dynamique d'une surface métallique dans des structures cubiques à faces centrées, suivant la direction [111].

L'objectif est de comprendre la dynamique vibrationnelle des matériaux CFC en présence d'un défaut. D'une manière générale, c'est la compréhension de l'impact et le rôle des surfaces sur les propriétés vibrationnelles.

Le contenu du mémoire que nous présentons est structuré de la façon suivante :

Le premier chapitre est consacré à la description des réseaux de Bravais, puis, nous présentons les différents types de défauts qui peuvent exister dans un matériau, à savoir les défauts ponctuels, linéaires ou volumique ; et la dernière partie de ce chapitre sera réservée aux définitions des différents types de phonons.

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

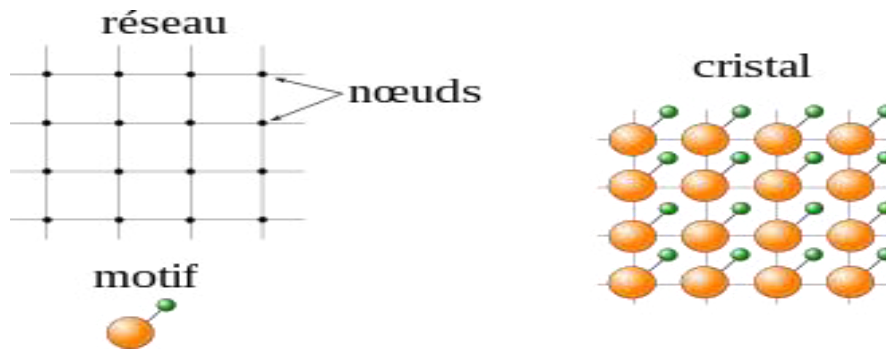
Dans le troisième chapitre, nous présentons l'étude dynamique d'un système parfait (en volume) qui est la structure cubique à faces centrées suivant la direction [111] ; ainsi que la description de sa structure correspondante dans le réseau réciproque, et le calcul des vecteurs réciproques, nous avons aussi tracé ses courbes de dispersion. Ce chapitre est réservé aussi à l'étude vibrationnelle d'une surface métallique de type Cu/Pt, suivant la direction [111], nous avons appliqué la méthode de raccordement pour la détermination des propriétés vibrationnelles qui sont les courbes de dispersion des phonons localisés au niveau de la surface. Nous avons aussi calculé les densités d'états associées aux sites localisés dans la zone perturbée.

Nous clôturons notre mémoire par une conclusion générale qui synthétise tous les résultats obtenus dans le cadre de notre étude.

## Chapitre I : Dynamique des réseaux

### Introduction

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



**Figure I. 1 :** Représentation schématique d'une structure cristalline.

### I. 1. Réseaux de bravais tridimensionnels

Le réseau de Bravais est une distribution régulière de points dans l'espace qui représente la périodicité de la distribution atomique d'un cristal. C'est un modèle géométrique qui nous permet de décrire simplement l'univers (et les objets qui le composent) avec trois grandeurs ou dimensions.

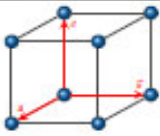
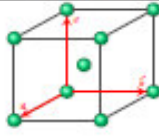
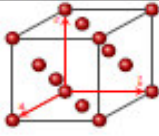
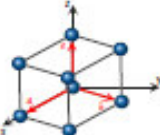
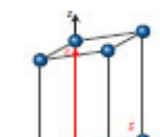
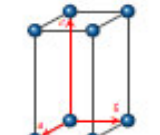
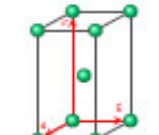
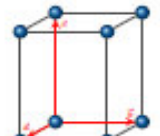
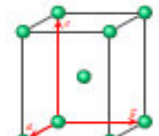
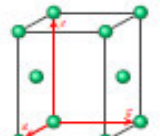
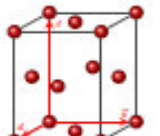
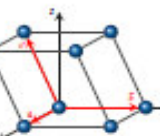
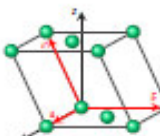
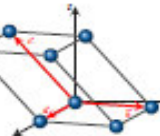
Multiplicité	m = 1	m = 2		m = 4
Type de réseau	Primitif (P)	Centré (I)	Bases centrées (C)	Faces centrées (F)
Cubique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma$				
Rhomboédrique $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$				
Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$				
Quadratique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
Orthorhombique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$				
Monoclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$				
Triclinique $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$				

Tableau I. 1 : Représentation des réseaux de Bravais.

## I. 2. Différents types de défauts

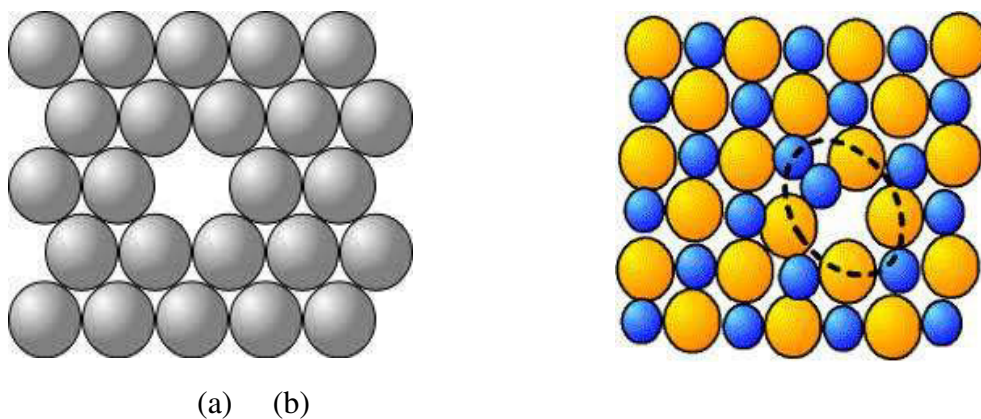
Un défaut cristallin est une interruption de la périodicité du cristal. La périodicité représente la répétition régulière des positions atomiques dans les trois directions de l'espace. Les motifs réguliers sont interrompus par des défauts cristallographiques. Ils peuvent être ponctuels, linéaires, plans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

### I. 2. 1. Défauts ponctuels

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

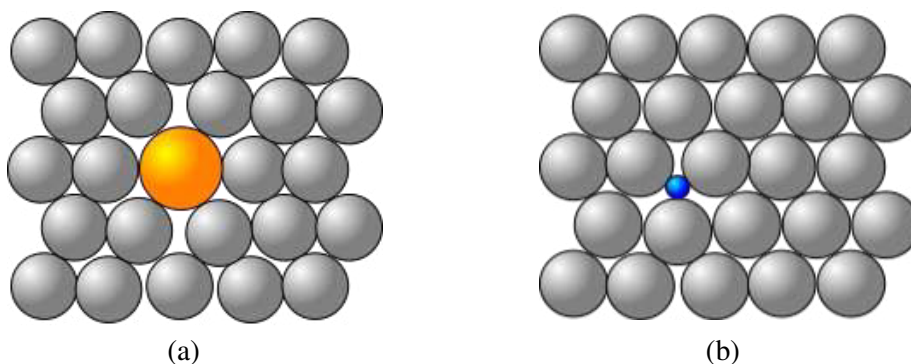
**a) Les lacunes :** ce défaut correspond à un site atomique inoccupé dans la structure. Elles jouent un rôle fondamental dans la diffusion à l'état solide qui résulte de déplacements d'atomes sur de longues distances et est à la base des traitements thermiques notamment.

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



**Figure I. 2 :** Représentation d'une Lacune en (a), et d'interstitiels en (b).

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



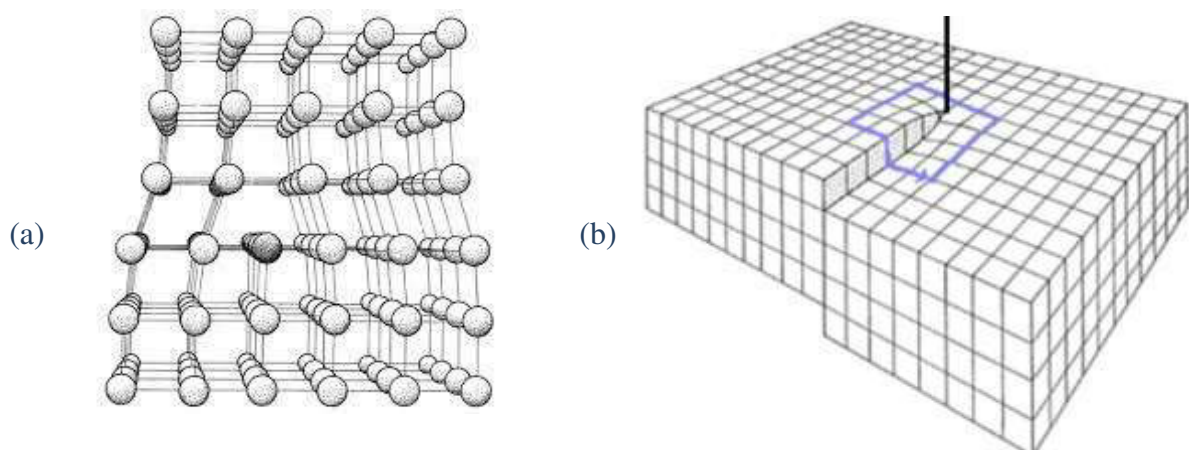
**Figure I. 3 :** (a) Atome en substitution, (b) Atome étranger en substitution.

### I. 2. 2. Défauts linéaires

En réalité le cristal parfait n'existe pas et les cristaux réels contiennent des défauts qui entraînent souvent des propriétés physiques particulières. Ces défauts sont les dislocations, ce sont des défauts linéaires qui se déplacent le long des plans atomiques.

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

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

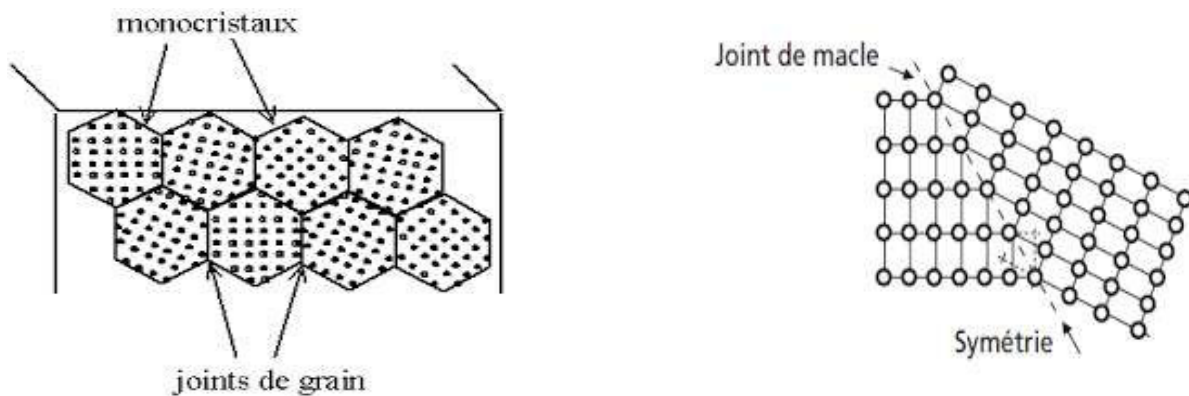


**Figure I. 4** : Structure d'une dislocation coin (a) et dislocation vis (b).

### I. 2. 3. Défauts plan (bidimensionnel)

Les défauts plans sont des défauts 2D. Ce ne sont pas des défauts internes au cristal mais le résultat de plusieurs monocristaux accolés les uns aux autres pour former des polycristaux. Les zones de raccordement des deux cristaux d'orientations différentes sont appelées joints de grains. Les défauts plans peuvent aussi être des défauts d'empilement ou des macles.

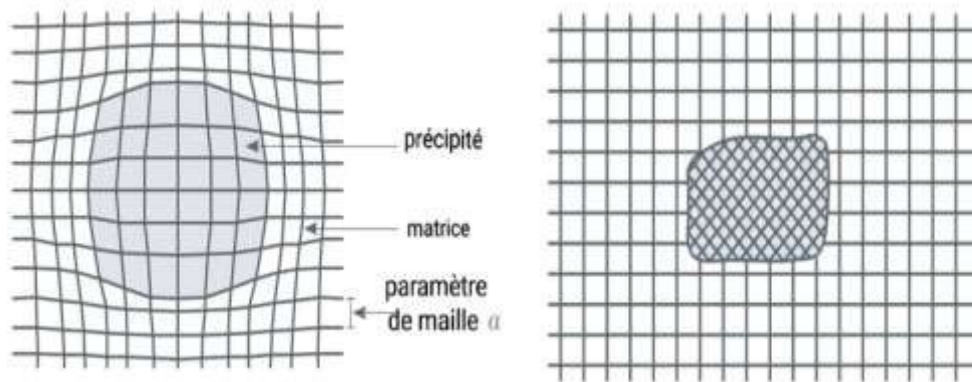
- Joints de grain : la matière solide est, en général, constituée par un assemblage de microcristaux. A la jonction de ces microcristaux se forment des petites cavités dans lesquelles les impuretés se rassemblent habituellement.
- Macles : les macles résultent de l'association de plusieurs monocristaux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



**Figure I. 5 :** Illustration de défauts linéaires joints de grains et macles.

### I. 2. 4 : Les défauts tridimensionnels

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



**Figure I. 6 :** Différents types de précipités.

### I. 3. Les phonons

Le terme « phonon » fut introduit par Fränkel [1]. 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 peut associer aussi 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 [2].

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 ».

#### I. 3.1. Les différents types de phonons

Dans un solide réel, il y a plusieurs types de phonons (acoustiques et optiques). Les phonons acoustiques correspondent typiquement aux ondes sonores dans le réseau atomique. Les phonons acoustiques longitudinaux et transverses sont souvent notés de manières abrégées LA et TA

Les phonons optiques sont présents dans les solides qui comportent plusieurs atomes par maille.

##### a) Les phonons acoustiques

Le son est une onde produite par la vibration mécanique d'un matériau et qui traverse l'air ou l'eau. Ces ondes dites acoustique sont particulièrement facile à utiliser et à ajuster ou à moduler si l'on parle, crie ou chuchote dans une direction ou une autre. Chaque changement modifiera la longueur, l'amplitude de l'onde et la fréquence de son émis.

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

## Chapitre II : Généralités sur la dynamique vibrationnelle

### Introduction

L'étude des propriétés physiques des matériaux, à l'échelle nanométrique, présente un intérêt immense dans les domaines scientifiques et industriels. En effet, lorsqu'on diminue la taille d'un objet pour atteindre une taille nanométrique, les propriétés physiques de ces objets seront modifiées. Le développement de la science des matériaux et plus particulièrement de la physique de l'état condensé a poussé les physiciens et les chimistes à comprendre que les propriétés d'un matériau dépendaient étroitement de sa structure (défauts compris).

En parallèle, l'étude de la dynamique des réseaux parfaits a suscité un intérêt considérable. Son développement a été rendu possible grâce au développement des techniques expérimentales. Ces dernières permettent d'avoir accès aux propriétés à partir des courbes de dispersion obtenues par diffusion de neutrons. Par ailleurs, l'intérêt de la connaissance de la dynamique d'un réseau parfait est qu'elle sert de base à une description d'un réseau perturbé par des défauts atomiques [3-5].

### II.1. Dynamique vibrationnelle des systèmes ordonnés

Un solide cristallin est constitué par la répétition périodique, dans l'espace d'un motif atomique ou moléculaire (formant une maille). La périodicité de la structure d'un cristal est donc représentée par un ensemble de points régulièrement disposés. Cet ensemble est un réseau cristallin et les points le constituant sont des nœuds du réseau (sont des entiers relatifs si la maille choisie pour décrire le réseau est primitive).

La périodicité d'un cristal est décrite par un ensemble de vecteurs positions, qui localisent chaque maille élémentaire du cristal dans l'espace [6-8].

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

$$\vec{r}_0 = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3 \quad (2.1)$$

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

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

$$\vec{r}(l,t) = \vec{r}_0(l,t) + \vec{u}(l,t) \quad (2.2)$$

Avec

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

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

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

$$m(l) \frac{d^2 \vec{R}_i}{dt^2} = \sum \vec{F} \quad (2.3)$$

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

$$m(l) \frac{d^2 \vec{u}_\alpha(l,t)}{dt^2} = - \sum_{l \neq l'} \sum_\beta \left( \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) k(l,l') [\vec{u}_\beta(l,t) - \vec{u}_\alpha(l',t)] \quad (2.4)$$

$\alpha$  et  $\beta$  représentent les trois directions cartésiennes  $x$ ,  $y$  et  $z$ ,

$m(l)$  la masse de l'atome du site  $l$ ,  $\vec{u}_\alpha(l,t)$  l'amplitude de vibration suivant la direction  $\alpha$ ,  $r_\alpha$  et  $r_\beta$  sont respectivement les composantes cartésiennes selon les directions  $\alpha$  et  $\beta$  du vecteur  $\vec{r}(l,l')$  joignant les positions d'équilibres des atomes aux sites  $l$  et  $l'$ ,  $r$  est le module du vecteur  $\vec{r}(l,l')$ ,  $k(l,l')$  la constante de force de rappel entre les atomes des sites  $l$  et  $l'$ .

En choisissant des solutions sous forme d'ondes planes, l'équation (2.4) peut alors se mettre comme suit

$$\omega^2 m_l u_\alpha(l) = - \sum_{l \neq l'} \sum_\beta \left( \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) k(l,l') [u_\beta(l) - u_\beta(l')] \quad (2.5)$$

L'équation (2.5) peut être écrite pour les  $N$  atomes contenus dans la cellule élémentaire et selon les trois directions cartésiennes. Nous sommes alors en présence d'un système de  $(3N)$  équations de mouvements (il y a 3 degrés de liberté par site).

Le modèle du cristal illimité qui peut être construit en répétant périodiquement dans l'espace le bloc des  $N$  atomes d'un cristal fini de même structure, présente l'avantage de la symétrie de translation avec les conditions aux limites (condition de Born von Karman) permettent de réduire

le champ des déplacements du système. En effet, grâce à la périodicité spatiale de l'environnement atomique, deux atomes  $l$  et  $l'$ , occupant deux sites équivalents du réseau, doivent effectuer à une phase près, les mêmes mouvements vibratoires. Ainsi, leurs amplitudes des vibrations vérifient à tout instant  $t$  la relation suivante

$$\vec{u}(l', \omega) = \vec{u}(l, \omega) \exp(i\vec{q}\vec{r}(l, l')) \quad (2.6)$$

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

La relation (2.6) permet de transformer le système d'équation (2.5) en un système de  $3N$  équations homogènes à  $3N$  inconnues, où  $N$  désigne le nombre d'atomes dans la maille élémentaire du réseau.

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

$$[\omega^2 I - D(\vec{q})]|u\rangle = |0\rangle \quad (2.7)$$

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

La condition pour que le système homogène (2.7) ait des solutions, en  $\omega^2$ , non triviales est que le déterminant soit nul

$$\det[\omega^2 I - D(\vec{q})] = 0 \quad (2.8)$$

Ainsi, grâce à la condition de compatibilité du système (2.7) qui fournit une équation algébrique en  $\omega^2$ , nous pouvons déterminer les différents modes de vibration du solide en affectant à chaque vecteur d'onde  $\vec{q}$  de la première zone de Brillouin, les  $3N$  solutions  $\omega_s$  telle que  $\omega_s > 0$ . L'indice  $s = 1, \dots, 3N$  numérote les différentes branches de dispersion. Par convention, à chaque fois on indexe les courbes de dispersion, on les numérote de bas en haut, en se plaçant au centre de la zone de Brillouin ( $\vec{q} \rightarrow 0$ ).

## II. 2. Dynamique vibrationnelle des systèmes désordonnés

### II. 2. 1 Méthodes théoriques utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes désordonnés

Le formalisme donné dans la section précédente, basé sur les conditions aux limites périodiques de *Born et von Karman*, s'applique seulement aux systèmes périodiques. Or, en ce qui concerne l'étude des modes vibrationnels des systèmes perturbés de basse dimensionnalité. (L'absence de la symétrie de translation dans la direction normale au défaut) rend difficile la résolution du système d'équations du mouvement vibratoire d'un solide semi infini. La brisure de symétrie entraîne des modifications dans l'ordonnement des atomes, de la structure électronique et de la dynamique du réseau [9], d'où la nécessité d'utiliser de nouvelles méthodes de calcul afin de réaliser un couplage des équations du mouvement d'une couche atomique à l'autre dans le système semi infini. Ces méthodes permettent, soit de résoudre des systèmes infinis d'équations, soit de limiter dans une approximation valable le nombre d'équations au niveau du défaut [10-12].

#### II. 2. 1. 1. La méthode de diagonalisation directe

En 1965, Clark l'a introduite dans sa formulation générale. Elle a été appliquée pour la première fois aux systèmes physiques par Allen et al [13,14]. La méthode s'intéresse, particulièrement aux modes surfaciques des réseaux cubiques à faces centrées et aux effets induits par les couches adsorbantes [15].

Au cours des 20 dernières années, cette approche est apparue comme pratique et puissante dans l'étude de la dynamique vibratoire et magnétique des surfaces planes et des surfaces adjacentes [16-20].

Le principe de la méthode consiste à contraindre le système étudié à un nombre fini de plans atomiques dans une direction, par exemple avec une extension infinie dans les deux autres directions cartésiennes  $x$  et  $y$ . De plus, le nombre de plans utilisés pour la modélisation doit être suffisamment grand pour garantir l'existence de région dite volumétrique. Ensuite, il ne reste plus qu'à écrire les équations de mouvement des atomes appartenant à la cellule unitaire pour en déduire la matrice dynamique. Sa résolution numérique détermine ses vecteurs et ses valeurs propres. Cela permet de remonter aux propriétés de la surface via la courbe de dispersion, la densité spectrale et la densité d'état, les vecteurs de déplacement et autres grandeurs physiques.

Cependant, l'inconvénient de cette approche est l'utilisation de matrices de grande taille, ce qui augmente le temps de calcul lors des simulations numériques [21-22].

### II. 2. 1. 2. La méthode des fonctions de Green

On appelle fonctions de Green en physique les solutions élémentaires d'équations aux dérivées partielles linéaires à coefficients constants. Elle a été introduite en 1850 par George Green [23]. C'est un outil mathématique qui fait un grand pas en avant à la physique dans l'étude de la dynamique des systèmes perturbés. Elle a été appliquée pour la première fois à la physique du solide par Slater [24]. Ces dernières années, cette approche a été la plus couramment utilisée pour étudier la dynamique des systèmes réels, avec quelques variations dans la formalismemathématique [25-28].

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

$$D_p = D + P \quad (2.9)$$

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

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

$$G(\omega^2) = [\omega^2 I - D]^{-1} \quad (2.10)$$

Son équivalent pour le système perturbé peut s'écrire

$$\begin{aligned} G_p(\omega^2) &= [\omega^2 I - D_p]^{-1} \\ G_p(\omega^2) &= [\omega^2 I - (D + P)]^{-1} \\ \Rightarrow G_p(\omega^2) &= [(\omega^2 I - D)(I - \frac{P}{(\omega^2 I - D)})]^{-1} \\ \Rightarrow G_p(\omega^2) &= [(\omega^2 I - D)\{I - G(\omega^2)P\}]^{-1} \end{aligned}$$

D'où la relation matricielle

$$G_p(\omega^2) = [I - G(\omega^2)P]^{-1}G(\omega^2) \quad (2.11)$$

L'ensemble des états vibrationnels du système perturbé sont alors donnés par les pôles de la fonction  $Gp(\omega^2)$  [29-31]. Ils permettent, en général, d'interpréter les changements causés par le défaut sur les spectres de vibration pour les phonons. Les étapes d'obtention de la matrice sont détaillées dans la référence [32].

### II. 2. 1.3. La méthode de raccordement

Cette méthode a été introduite pour la première fois par Feuchtwang lorsqu'il a étudié l'équilibre structural statique d'un réseau tridimensionnel semi-infini [33]. Elle a été discutée par Khater et Szeftel en 1987 dans deux articles ; le premier sur le développement de la forme mathématique utilisée, et le second sur l'application aux surfaces Ni(100) et Ni(100)+C(2x2) [34, 35]. Depuis, la méthode de raccordement a contribué à l'étude de la dynamique vibrationnelle de plusieurs systèmes physiques par plusieurs auteurs [36-44].

#### a) Principe de la méthode

La méthode de raccordement a été introduite afin de dériver une méthode analytique pour déterminer les grandeurs physiques qui caractérisent les systèmes désordonnés. L'application de cette méthode à l'étude des ondes élastiques dans les systèmes réside dans la description du mouvement vibrationnel des atomes par un nombre fini d'équations [45]. Son application nécessite la division de l'espace d'un solide (système) en trois régions (voir figure. II.1)

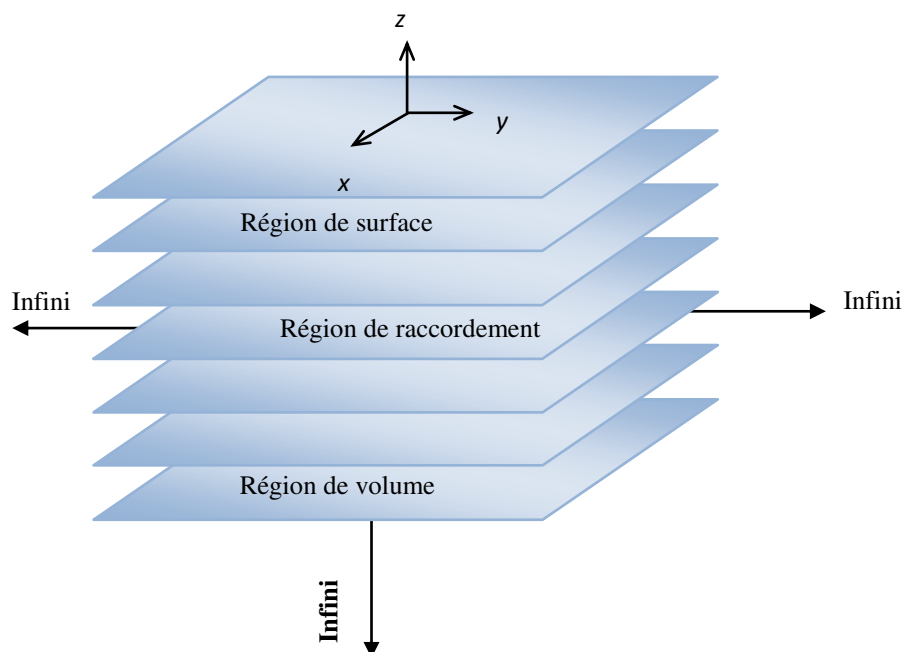


Figure II. 1 : Représentation schématique d'une surface selon le de la méthode de raccordement.

- **Zone parfaite** : c'est la région où on retrouve le volume ; les atomes ne sont pas influencés par la présence du défaut ; elle est caractérisée par une périodicité tridimensionnelle, et c'est elle qui permet de tracer les courbes de dispersion en volume.
- **Zone de défaut (ou la zone perturbée)** : c'est la région qui renferme toutes sortes de nanostructures et de défauts, elle est en générale affectée par la relaxation et la reconstruction des plans atomiques. La périodicité est perturbée dans cette zone, ce qui conduit à des propriétés différentes de celles du volume.
- **Zone de raccordement** : c'est la limite entre les régions parfaites et les atomes de la zone de défaut. Elle permet de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut avec les états de vibrations évanescents de la zone parfaite.

Compte tenu de la brisure de symétrie dans la direction perpendiculaire à la zone perturbée (figure II.1), la relation des déplacements dans la direction cartésienne  $\alpha$ , entre d'une part un atome  $l$  appartenant à un plan  $p$  et d'autre part un atome  $l'$  appartenant à un plan  $p'$  tous deux parallèles au plan perturbé mais se trouvant dans la région du volume, vérifie l'équation suivante

$$u_\alpha(l', p', \omega) = u_\alpha(l, p, \omega) \cdot Z^{(p' - p)} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}(l, l')) \quad (2.12)$$

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

En insérant (2.12) dans les équations de mouvements (2.5), on obtient un système d'équations pour les déplacements  $|u\rangle = |u_\alpha(l, \omega)\rangle$  des sites atomiques d'une maille élémentaire dans le volume, qui peut s'écrire analytiquement comme suit

$$\omega^2 M_l u_\alpha(l, \omega) + \sum_{\ell \neq l'} \sum_{\beta} \left( \frac{r_\alpha \cdot r_\beta}{r^2} \right) K(l, l') u_\beta(l, \omega) [Z^{(p' - p)} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}(l, l')) - 1] \quad (2.13)$$

Ou sous la forme matricielle suivante

$$[\omega^2 I - D(\vec{q})] = |0\rangle \quad (2.14)$$

La condition de compatibilité de ce système matricielle donne accès pour chaque couple  $(\vec{q}, \omega)$  à une équation polynômiale en  $Z$  dont les solutions physiques caractérisent les différents modes vibrationnels en volume suivant la direction normale au plan de surface.

Les solutions pour lesquelles  $|Z| = 1$  sont des modes itinérants, tandis que celles qui vérifient la condition  $|Z| < 1$  correspondent à des modes qui s'atténuent dans le système et qui ne peuvent pas le traverser (ce sont des modes évanescents).

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

$$u_{\alpha}(l, \omega) = \sum_{\nu=1}^n u(\alpha, \nu) Z_{\nu}^{p'-p} R_{\nu} \quad (2.15)$$

Avec

- $p$  est la troisième coordonnée de l'atome  $l$  considéré.
- $\alpha$  parcourt les trois directions cartésiennes  $x, y$  et  $z$ .
- $n$  est le nombre de modes propageants et évanescents, déterminés par la résolution de la relation explicitant la matrice dynamique (2.14).
- $R_{\nu}$  est un vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent  $\nu$  dans la base  $\{R\}$ .
- $Z_{\nu}$  est le facteur de phase correspondant au mode évanescent  $\nu$  de la matrice dynamique dans le volume.
- $u(\alpha, \nu)$  représente les déplacements atomiques des sites appartenant à l'espace parfait, associés à la contribution du  $\nu^{\text{ème}}$  mode évanescent, suivant la direction cartésienne  $\alpha$ .

La détermination simultanée des facteurs de phases  $Z_{\nu}$  caractérisant les modes évanescents et les modes propageants, ainsi que des vecteurs propres correspondants, tous deux issus de l'étude dynamique en volume, loin de la surface, nous permet alors de définir la matrice de raccordement qu'on notera par  $D_r$  à l'aide des développements (2.15). Le produit des deux

matrices  $D$  et  $D_r$  conduit à une matrice carrée  $D_S$  caractérisant un système d'équations homogènes pour lequel des solutions non triviales exigent

$$\det[\omega^2 I - D_S(\vec{q})] = 0 \quad (2.16)$$

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

### II. 3. Calcul des densités d'états vibrationnelles

Plusieurs propriétés physiques intéressantes issues d'excitations élastiques ou magnétiques sont obtenues en calculant la densité d'état  $N(\Omega)$  [46], définie de manière générale telle que la quantité  $N(\Omega) d\Omega$  est le nombre d'états d'énergie entre  $\Omega$  et  $(\Omega + d\Omega)$ . Dans la limite thermodynamique,  $N(\Omega)$  est considérée comme une fonction continue qui permet de calculer toutes les grandeurs thermodynamiques à partir de la fonction de partition dans l'approximation harmonique de la dynamique du réseau. La principale grandeur d'intérêt à cet égard est la contribution des vibrations à l'énergie libre de Helmholtz, donnée par la définition standard  $F = U - TS$ , où  $U$  est l'énergie interne du système considéré,  $S$  est son entropie et  $T$  est sa température absolue [47].

Nous pouvons calculer la densité vibrationnelle des états proches d'une surface donnée, en utilisant une forme basée essentiellement sur la fonction de Green et la méthode de raccordement [48]. Pour ce faire, il faut d'abord calculer la densité spectrale. La manière la plus simple de l'obtenir est d'introduire l'opérateur de Green, qui peut être représenté de manière très compacte [49], sous la forme

$$G(\Omega^2 + i\varepsilon, \varphi_x, \varphi_y, r) = [(\Omega^2 + i\varepsilon)I - D_S(\varphi_x, \varphi_y, r)]^{-1} \quad (2.17)$$

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

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{(p,p')}(\Omega, \varphi_x, \varphi_y) = 2\Omega \sum_m L_{\alpha m}^p \cdot L_{\beta m}^{p'*} \cdot \delta(\Omega^2 - \Omega_m^2) \quad (2.18)$$

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

La densité d'état qui correspond à la somme sur  $\varphi_x$  et  $\varphi_y$  de la trace des matrices de densités spectrales peut alors s'écrire ainsi

$$\begin{aligned}
 N(\Omega) &= \sum_{\varphi_x, \varphi_y} \sum_{p\alpha} \rho_{(\alpha, \beta)}^{(p, p')}(\Omega, \varphi_x, \varphi_y) \\
 &= -\frac{2\Omega}{\pi} \sum_{\varphi_x, \varphi_y} \sum_{p\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [Im G_{\alpha}^{pp}(\varphi_x, \varphi_y, \Omega^2 + i\varepsilon)]
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

### **Conclusion**

Nous avons introduit un outil mathématique qui joue un rôle très important dans la compréhension des différents phénomènes au voisinage d'une surface. La méthode théorique que nous allons appliquer dans le chapitre qui suit est une suite aux différents travaux sur la méthode de raccordement initié par Feuchtwang [33], puis reprise par Jacob Szeftel et Anoine Khater [34-35] et ses collaborateurs (Tigrine Rachid, Boualem Bourahla et Rabah Chadli, ...) [50-52].

]

## Chapitre III : Propriétés vibrationnelles d'une surface alliage ordonnée Cu/Pt (111)

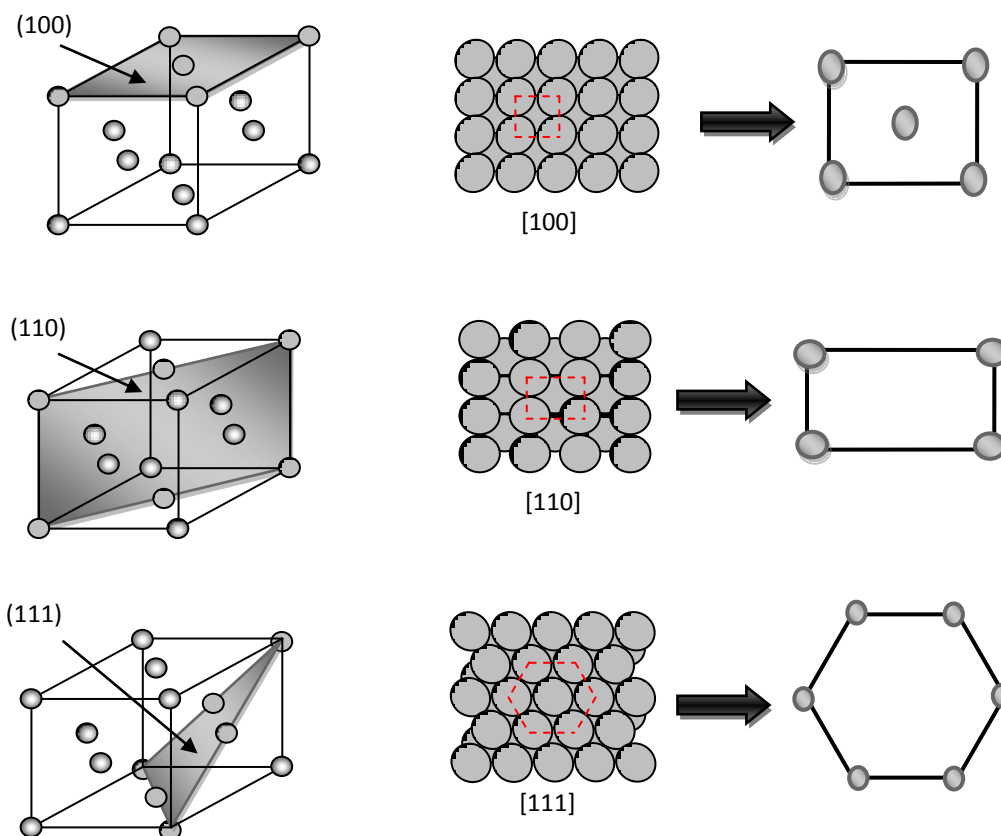
### Introduction

Les matériaux à cristallisation cubique à faces centrées font l'objet d'une recherche très intense [53-61]. Cela est dû à leurs grandes gammes d'utilisation. En effet ces matériaux sont à la base de la fabrication de plusieurs composants industriels qui sont utilisés dans différents domaines, vu leur forte conductivité électrique et thermique (Cuivre par exemple), et leur réflectivité, (Silicium par exemple), ainsi que d'autres caractéristiques comme la ductilité et la malléabilité qui les rendent faciles et utiles à manipuler pour les adapter aux différents besoins en mécanique et en électronique.

La simulation numérique n'est pas seulement une loi de comportement (dynamique) mais aussi une modélisation des systèmes réels à étudier. Alors dans ce chapitre, on présente le système modèle faisant l'objet de notre étude, puis par la suite, on détermine sa matrice dynamique en volume dont les valeurs propres conduisent aux courbes de dispersion en fonction du vecteur d'ondes  $\vec{q}$ , ensuite, on s'intéresse à une surface métallique ordonnée Cu-Pt (111), obtenue par dépôt d'atome de cuivre sur un substrat de platine d'une façon que chaque atome de platine sera entouré de six atomes de cuivre.

### III. 1. Les trois structures cubiques à faces centrées dans les directions [100], [110], et [111].

La figure (III.1) montre la structure cristalline cubique à faces centrées cfc dans différentes directions [100], [110] et [111]. Notons que la structure étudiée est un système cfc, suivant la direction [111], à trois dimensions.

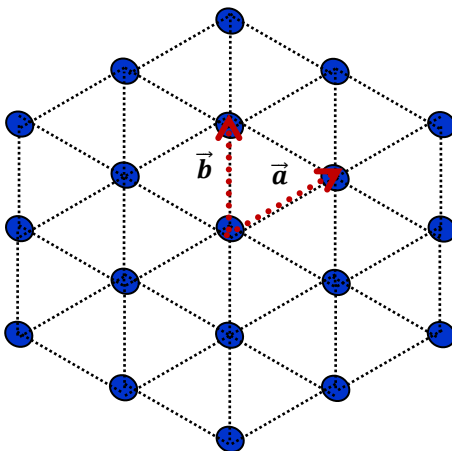


**Figure III. 1 :** Les trois structures cubiques à faces centrées dans les directions [100], [110], et [111].

### III. 2. Première zone de Brillouin et direction de symétrie de la surface (111)

- *Réseau direct*

La structure du réseau direct de la surface (111) est hexagonale (figure. III. 1), elle est définie par les deux vecteurs de base  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$



**Figure. III. 2 :** Représentation du réseau direct de la surface (111).

$$\vec{a} \begin{pmatrix} a\frac{\sqrt{3}}{2}/2 \\ a/2\sqrt{2} \end{pmatrix} \text{ et } \vec{b} \begin{pmatrix} 0 \\ a/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

• *Réseau réciproque*

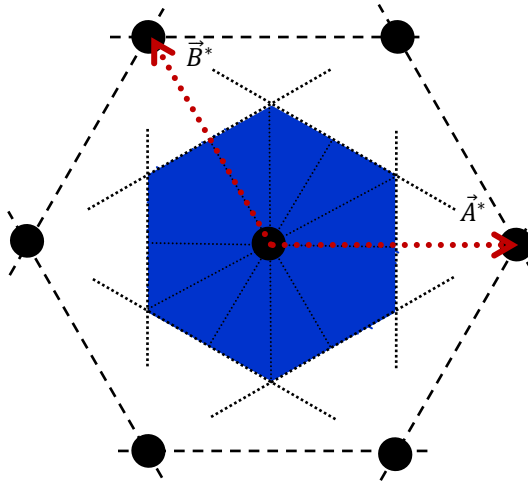
Le réseau réciproque du réseau direct de la surface (111) (figure. III. 2) est obtenu à l'aide des deux vecteurs de base  $\vec{A}^*$  et  $\vec{B}^*$  comme suit :

$$\vec{A}^* \cdot \vec{a} = 2\pi$$

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

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

$$\vec{b} \cdot \vec{A}^* = 0$$



**Figure. III. 3 :** Représentation du réseau réciproque de la surface (111).

Un simple calcul numérique permet d'avoir les résultats suivants

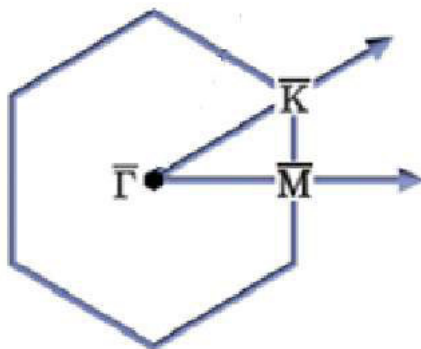
$$\vec{A}^* \begin{pmatrix} 4\frac{\sqrt{2}}{3}\pi/a \\ 0 \end{pmatrix} \vec{B}^* \begin{pmatrix} -2\frac{\sqrt{2}}{3}\pi/a \\ 2\sqrt{2}\pi/a \end{pmatrix}$$

$$\|\vec{A}^*\| = 4\frac{\sqrt{2}}{3}\pi/a \quad \|\vec{B}^*\| = 4\frac{\sqrt{2}}{3}\pi/a.$$

• *Première zone de Brillouin*

La première zone de Brillouin du réseau hexagonal de la structure cubique à faces centrées dans la direction [111] est définie dans le réseau réciproque.

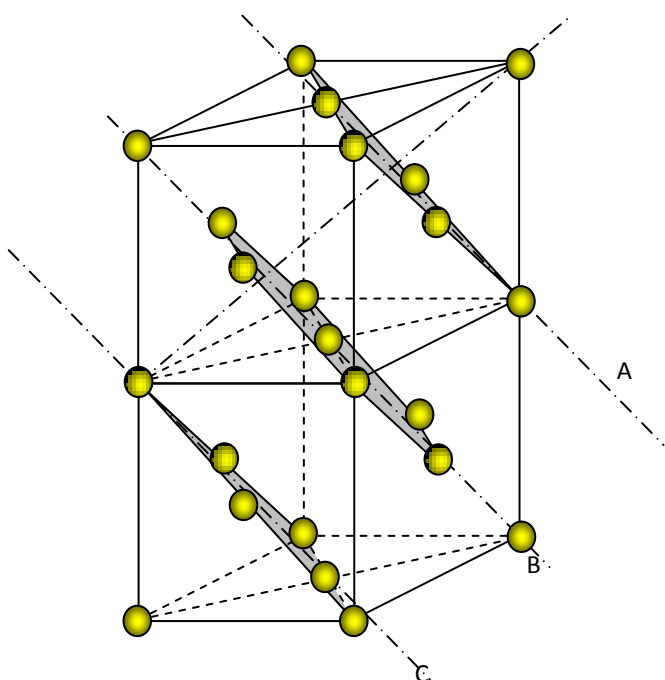
Sur la figure (III. 3), nous avons représenté la première zone de Brillouin réduite, les points remarquables de cette zone sont les points de haute symétrie  $\Gamma$ , K et X.



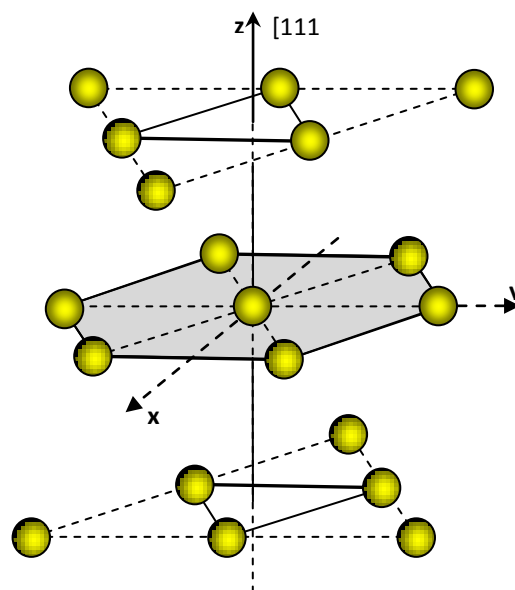
**Figure. III. 4 :** Représentation de la première zone de Brillouin réduite de la surface (111).

**III. 3. Représentation d'une structure cristalline dans un CFC[111]**

Les atomes dans une structure cristalline cubique à faces centrées suivant la direction [111] sont arrangés de la manière suivante ; un empilement de plans ordonné (ABC ABC, ...) qui est une structure hexagonale comme on l'a représenté sur la figure (III. 5).



**Figure. III. 5 :** Empilement atomiques ABC d'une structure cristalline cfc, suivant la direction [111].



**Figure. III. 6 :** Premiers et seconds voisins d'un atome en volume, suivant la direction [111].

### III. 4. Dynamique vibrationnelle d'un guide d'ondes parfait

La région d'étude en volume, suivant la direction [111] est représentée sur la figure ( III. 5). Un atome de cuivre en volume est entouré par 12 premiers voisins situés à une distance  $a/\sqrt{2}$  et 6 seconds voisins à une distance  $a$ .

L'écriture des équations du mouvement pour un atome dans la région de volume permet de déterminer la dynamique vibrationnelle en volume du substrat de platine loin de la région de surface. Pour cela, on a pris en considération les premiers et les seconds voisins dans le cadre de l'approximation harmonique associée au modèle des forces centrales. Chaque atome en volume, son équation du mouvement est la suivante (dans la direction [111])

#### Suivant ( $Ox$ )

$$\begin{aligned} & [\Omega^2 - (4 + 2.r) + 3 \cos \varphi_y \cos 3\varphi_x + (1/6) \cos \varphi_y (Ze^{i\varphi_x} + Z^{-1}e^{-i\varphi_x}) + (2r/3)(Ze^{i4\varphi_x} \\ & + Z^{-1}e^{-i4\varphi_x}) + (1/3)(1 + r \cos 2\varphi_y) Ze^{-i2\varphi_x} + Z^{-1}e^{i2\varphi_x}]u_x(A) \\ & + [(\sqrt{3}/6) i \sin \varphi_y (Ze^{i\varphi_x} - Z^{-1}e^{-i\varphi_x}) - \sqrt{3} \sin \varphi_y \sin 3\varphi_x \\ & - (\sqrt{3}/3)ri \sin 2\varphi_y (Ze^{-i2\varphi_x} - Z^{-1}e^{i2\varphi_x})]u_y(A) + [(\sqrt{2}/3) \cos \varphi_y (\zeta e^{i\varphi_x} \\ & + Z^{-1}e^{-i\varphi_x}) - (\sqrt{2}/3)(1 + r \cos 2\varphi_y) (Ze^{-i2\varphi_x} + Z^{-1}e^{i2\varphi_x}) \\ & + (\sqrt{2}r/3) (Ze^{i4\varphi_x} + Z^{-1}e^{-i4\varphi_x})]u_z(A) \end{aligned}$$

#### Suivant ( $Oy$ )

$$\begin{aligned} & [(\sqrt{3}/6) i \sin \varphi_y (Ze^{i\varphi_x} - Z^{-1}e^{-i\varphi_x}) - \sqrt{3} \sin \varphi_y \sin 3\varphi_x - (\sqrt{3}/3)ri \sin 2\varphi_y (Ze^{-i2\varphi_x} \\ & - Z^{-1}e^{i2\varphi_x})]u_x(A) + [\Omega^2 - (4 + 2.r) + \cos \varphi_y \cos 3\varphi_x \\ & + 2\cos 2\varphi_y + (1/2) \cos \varphi_y (Ze^{i\varphi_x} + Z^{-1}e^{-i\varphi_x}) + r \cos 2\varphi_y (Ze^{i2\varphi_x} \\ & + Z^{-1}e^{-i2\varphi_x})]u_y(A) + [(\sqrt{6}/3) i \sin \varphi_y (Ze^{i\varphi_x} - Z^{-1}e^{-i\varphi_x}) \\ & + (\sqrt{6}/3)ri \sin 2\varphi_y (Ze^{-i2\varphi_x} - Z^{-1}e^{i2\varphi_x})]u_z(A) \end{aligned}$$

#### Suivant ( $Oz$ )

$$\begin{aligned}
 & [(\sqrt{2}/3) \cos \varphi_y (Ze^{i\varphi_x} + Z^{-1}e^{-i\varphi_x}) - (\sqrt{2}/3)(1 + r \cos 2\varphi_y) (Ze^{-i2\varphi_x} + Z^{-1}e^{i2\varphi_x}) \\
 & + (\sqrt{2}r/3)(Ze^{i4\varphi_x} + Z^{-1}e^{-i4\varphi_x})]u_x(A) \\
 & + [(\sqrt{6}/3) i \sin \varphi_y (Ze^{i\varphi_x} - Z^{-1}e^{-i\varphi_x}) \\
 & + (\sqrt{6}/3) ri \sin 2\varphi_y (Ze^{-i2\varphi_x} - Z^{-1}e^{i2\varphi_x})]u_y(A) + [\Omega^2 - (4 + 2.r) \\
 & + (4/3) \cos \varphi_y (Ze^{i\varphi_x} + Z^{-1}e^{-i\varphi_x}) + (r/3)(Ze^{i4\varphi_x} + Z^{-1}e^{-i4\varphi_x}) \\
 & + (2/3)(1 + r \cos 2\varphi_y)(Ze^{-i2\varphi_x} + Z^{-1}e^{i2\varphi_x})]u_z(A) \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

Où  $\Omega^2 = \frac{m}{k_1} \omega^2$  est la fréquence normalisée,  $r = \frac{k_2}{k_1}$  le rapport des constantes de force premier et second voisins  $k_1, k_2$ , respectivement et  $Z$  le facteur de phase, satisfaisant la condition d'évanescence, suivant la direction cartésienne (oz). Les facteurs de phases suivant les directions (ox) et (oy) sont définis par les grandeurs suivantes :  $\varphi_x = (\frac{a}{2\sqrt{6}})q_x$  et  $\varphi_y = (\frac{a}{2\sqrt{2}})q_y$  ;  $q_x$  et  $q_y$  étant les composantes suivant  $x$  et  $y$  du vecteur d'onde du réseau réciproque.

Les équations du mouvement (3.1) peuvent se mettre sous une forme matricielle

$$[\Omega^2 I - D(e^{i\varphi_x}, e^{i\varphi_y}, Z, r)]|u\rangle = 0 \quad (3.2)$$

Où  $D$  représente la matrice dynamique en volume. Elle est de taille (3×3), et  $I$  c'est une matrice identité de même taille que  $D$ .

La condition mathématique pour que le système matriciel (3.2) ait des solutions non triviales est que le déterminant soit nul, c'est-à-dire

$$\det[\Omega^2 I - D(e^{\varphi_x}, e^{\varphi_y}, Z, r)] = 0 \quad (3.3)$$

Cette équation peut se mettre sous forme d'une équation caractéristique séculaire de degré 6 en  $Z$ , à savoir

$$A_0 + A_1 Z + A_2 Z^2 + A_3 Z^3 + A_4 Z^4 + A_5 Z^5 + A_6 Z^6 = 0 \quad (3.4)$$

Où les coefficients  $A_n$  sont des constantes dépendantes de  $\Omega, \varphi_x, \varphi_y$  et  $r$ . Par ailleurs, la symétrie de notre modèle en volume permet de déterminer que si  $Z$  est une solution pour l'équation (3.4), le facteur de phase  $Z^{-1}$  est aussi une autre solution.

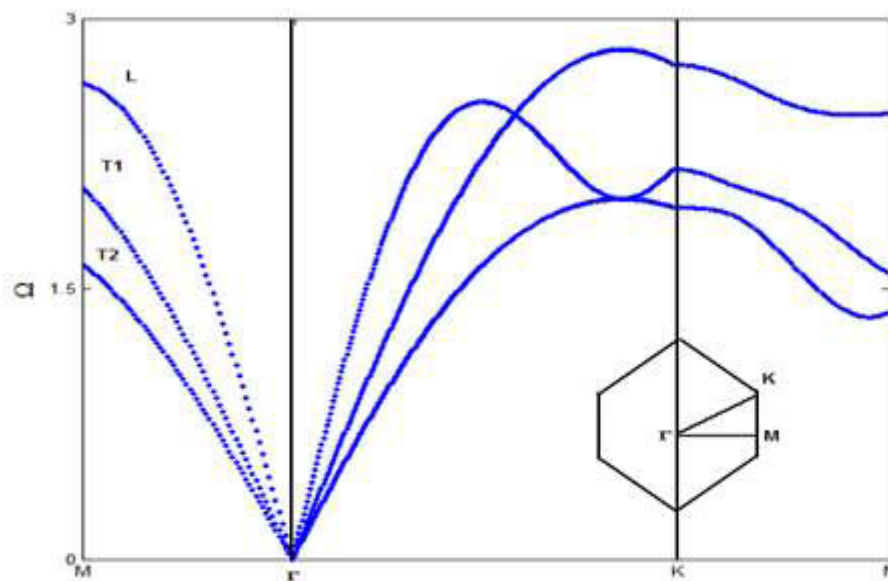
Pour satisfaire la condition de vibration qui est  $|Z| \leq 1$ , on ne peut prendre que les 3 valeurs acceptables physiquement pour  $Z$  parmi les solutions possibles de l'équation (3.4). Le champ d'évanescence est alors déterminé en volume pour le système de surface alliage considéré puisque ces solutions constituent dans l'espace  $\{\Omega, \varphi_x, \varphi_y\}$  la base des modes évanescents.

### III. 5. Courbes de dispersion

La relation de dispersion calculée dans le cadre de l'approximation harmonique dans le réseau réciproque du réseau hexagonal, suivant les directions de haute symétrie de la première zone de Brillouin  $\Gamma M$ ,  $\Gamma K$  et  $KM$ , avec  $\Gamma = (0,0,0)$ ,  $K = \left(0, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0\right)$  et  $M = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0\right)$

de Brillouin  $\Gamma M$ ,  $\Gamma K$  et  $KM$ , avec  $\Gamma = (0,0,0)$ ,  $K = \left(0, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0\right)$  et  $M = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, 0\right)$

Les résultats obtenus sont illustrés sur la figure (III. 7).



**Figure. III. 7 :** Courbes de dispersion d'une structure CFC parfaite dans les directions de haute symétrie.

La courbe de dispersion est représentée sur la figure III.7. Cette dernière représente les modes de phonons de la structure cubique à faces centrées, suivant la direction [111], en fonction des vecteurs d'onde pris le long des directions de haute symétrie dans la première zone de Brillouin. Dans la première direction  $M-\Gamma$ , nous remarquons que la courbe de dispersion contient trois types de branches : deux branches transversales (notées T1 et T2) pour lesquelles les vibrations se propagent perpendiculairement au mouvement des atomes et une autre branche longitudinale (notée L) pour laquelle la direction de propagation de la vibration et le déplacement des atomes sont colinéaires. Le même comportement est bien observé dans la direction  $\Gamma-K$  et  $K-M$ . L'ensemble des vibrations est décrit pour des vecteurs d'ondes de la première zone de Brillouin, par conséquent, nous obtenons deux modes propres. L'analyse de l'évolution des courbes de dispersion permet de relever l'intervalle de propagation des modes (transversaux et longitudinaux) dans chaque direction de haute symétrie, comme nous l'avons résumé dans le tableau (III.1) ci-dessous.

	Mode transversal 1	Mode transversal 2	Mode longitudinale
$\Gamma$ -M	$\Omega \in [0.00, 1.63]$	$\Omega \in [0.00, 2.05]$	$\Omega \in [0.00, 2.63]$
$\Gamma$ -K	$\Omega \in [0.00, 1.95]$	$\Omega \in [0.00, 2.75]$	$\Omega \in [0.00, 2.15]$
K-M	$\Omega \in [1.95, 1.36]$	$\Omega \in [2.75, 2.47]$	$\Omega \in [2.15, 1.59]$

Tableau III. 1. Intervalle de propagation des modes dans les directions de haute symétrie.

### III.6. Calcul des facteurs de phase

Nous représentons sur la figure (III.8) l'évolution du module des facteurs de phase en fonction de la fréquence  $\Omega$ .

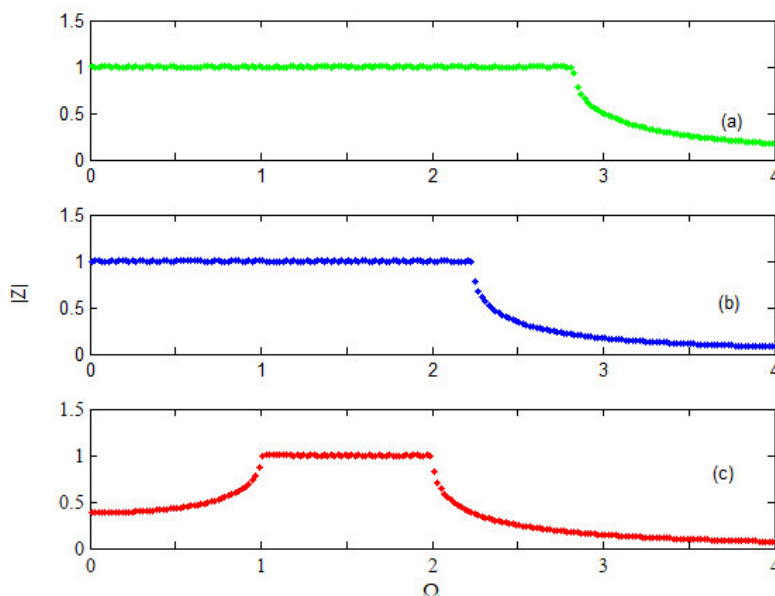


Figure III. 8 : Les facteurs de phase.

Sur les figures (III.8. a), (III. 8. b) et (III.8. c), on remarque que les plages de propagations et les plages d'évanescence sont différentes.

La figure (III.8. a) : le mode est propageant sur l'intervalle  $\Omega \in [0, 2.81]$  et quand  $\Omega > 2.81$  le mode devient évanescent.

La figure (III.8. b) et (III.8. c) : le mode est propageant sur l'intervalle  $\Omega \in [0, 2]$  et le mode devient évanescent partout ailleurs.

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

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

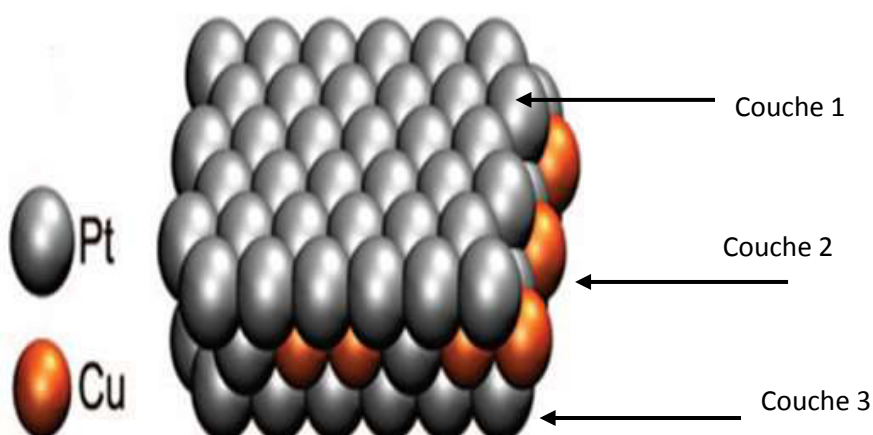
### III. 7. Matrice dynamique du système de surface alliage Cu – Pt[111]

Les équations du mouvement gouvernant les déplacements vibrationnels des atomes des différents sites du système, en présence de la surface, sont obtenues à partir de l'équation du mouvement. Dans notre calcul numérique, il faut déterminer les constantes de force qui relient les atomes premiers et deuxièmes voisins entre les atomes dans le système de surface alliage ordonné, que nous avons déjà définis. Les résultats sont donnés en fonction de la longueur de liaison entre les sites atomiques correspondants. Les résultats des paires atomiques (Cu-Cu)<sup>1</sup>, (Cu-Cu)<sup>2</sup>, (Pt-Pt)<sup>1</sup>, (Pt-Pt)<sup>2</sup>, (Cu-Pt)<sup>1</sup> et (Cu-Pt)<sup>2</sup> sont regroupés dans le tableau

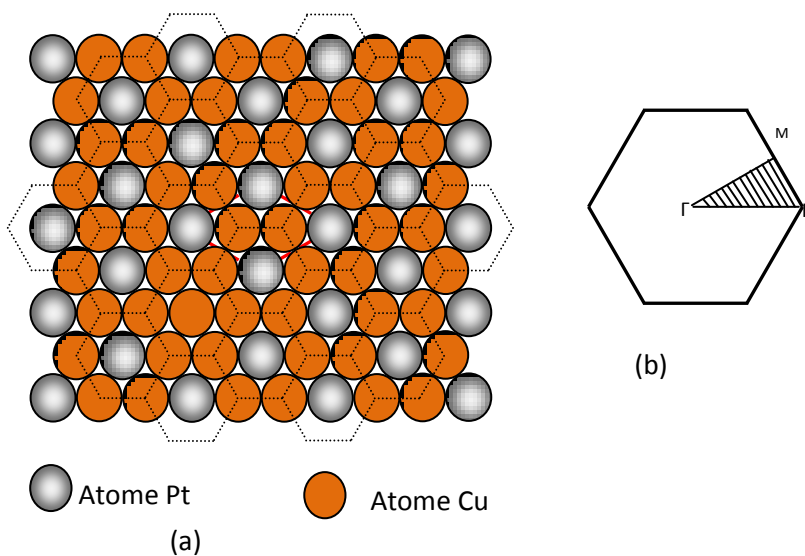
Type de paire	Longueur de liaison (Å)	Constantes de force ( $J.m^{-2}$ )
(Cu-Cu) <sup>1</sup>	2.566	27.50
(Cu-Cu) <sup>2</sup>	3.615	01.40
(Pt-Pt) <sup>1</sup>	3.280	35.24
(Pt-Pt) <sup>2</sup>	3.770	1.20
(Cu-Pt) <sup>1</sup>	2.670	28.64
(Cu-Pt) <sup>2</sup>	3.770	1.02

**Tableau III. 2** : Distances entre premiers et seconds voisins, dans le système alliage Cu et Pt [5].

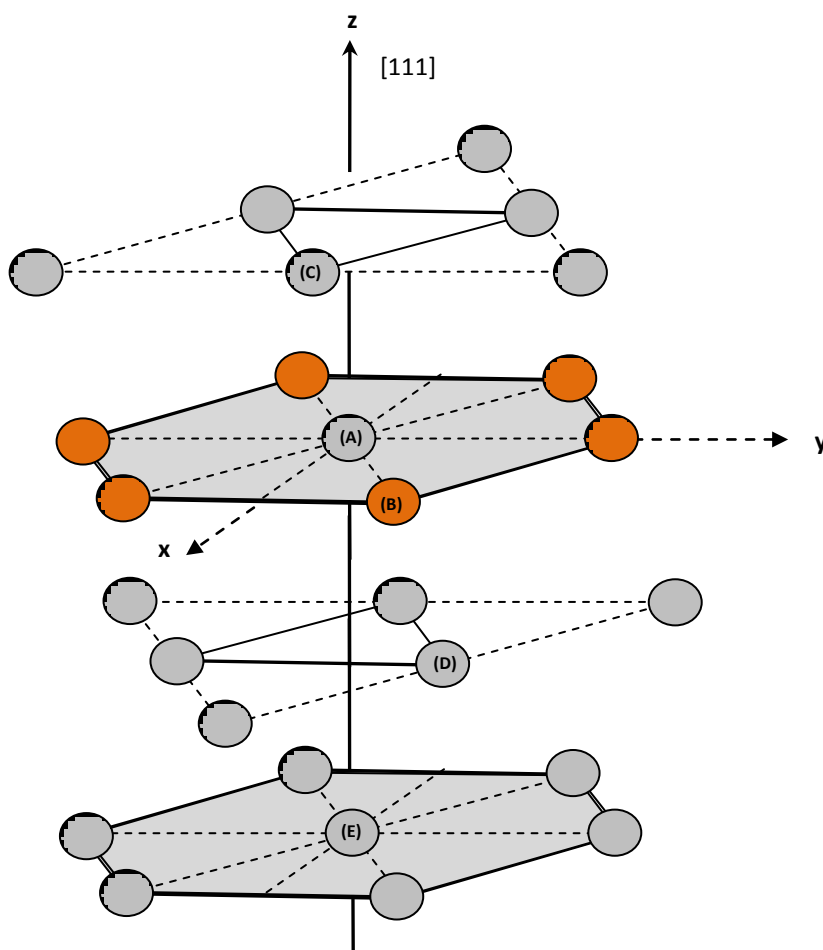
La matrice dynamique  $D$  du système considéré, de surface alliage Cu-Pt(111), trouve son origine en écrivant les équations du mouvement vibrationnel des atomes (A), (B), (C), (D) et (E), indiqués sur la figure (III. 11).



**Figure III. 9** : Représentations d'une surface métallique Cu-Pt(111).



**Figure III. 10 :** (a) Représentation schématique de la 2<sup>ème</sup> couche de la surface alliage Cu-Pt[111], (b) Représentation de la première zone de Brillouin.



**Figure III. 11 :** Représentation schématique de la surface alliage Cu-Pt[111].

L'ensemble des équations du mouvement vibrationnel des atomes définis précédemment constitue un système linéaire homogène. Celui-ci, peut se mettre sous forme d'une matrice rectangulaire  $D$ , contenant plus d'inconnus (18 inconnus) que d'équations (15 équations), telle que

$$[D]|u\rangle = |0\rangle \quad (3.5)$$

Avec

$$\dim [D] = 12 \times 18$$

$$\dim |u\rangle = 18 \times 1$$

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

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

### III. 8. Matrice de raccordement

Notre but dans cette étude est d'établir les relations de raccordement entre les déplacements vibrationnels des atomes appartenant à la surface alliage et les champs vibrationnels des modes évanescents en volume. Pour cela, nous allons représenter les déplacements atomiques des sites appartenant à la région de raccordement par une combinaison linéaire de vecteur  $\{R\}$  définissant un espace fini. La connaissance des facteurs de phase  $[Z, 1/Z]$ , caractérisant les modes évanescents dus à la présence de la surface et déterminés à partir de l'étude précédente en volume, permet de faire cet état de raccordement.

Pour un atome appartenant à la région de raccordement de notre système de surface alliage, on peut décrire ses déplacements vibrationnels à l'aide de la relation

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_i^{i=3} Z_i^{n_z} P(\alpha, i) R \quad (3.6)$$

Ici  $\alpha$  représente l'une des trois directions cartésiennes, et  $P(\alpha, i)$  sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents. Ils sont déterminés à l'aide des cofacteurs de la matrice dynamique en volume  $D$  définie auparavant.

Le vecteur  $|u\rangle$  de (3.5) décrivant tous les déplacements vibrationnels de tous les atomes d'une maille élémentaire capable de décrire le système de surface, peut être décomposé en deux parties, la première est notée par  $|irr\rangle$ , elle est constituée par les déplacements atomiques des cinq sites irréductibles formant la région de la surface c'est-à-dire les atomes (A), (B), (C) et (D). Quant à la seconde notée par  $|rac\rangle$ , elle est formée par les déplacements associés au site raccordé (E), ceci pour la base  $|R\rangle$ . Ainsi on écrit

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Avec

$$\dim|irr\rangle = (12 \times 1)$$

$$\dim|rac\rangle = (6 \times 1)$$

A partir de là, le raccordement des atomes peut être décrit à l'aide des expressions suivantes :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 \\ 0 & R_1 \\ 0 & R_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Où  $I_d$  est une matrice identité de dimension  $(12 \times 12)$  ; et  $R_1, R_2$  sont des matrices carrées de dimension  $(3 \times 3)$ .

En mettant  $D_r = \begin{bmatrix} I_d & 0 \\ 0 & R_1 \\ 0 & R_2 \end{bmatrix}$ , le système d'équation (3.8) peut s'exprimer à l'aide de cette matrice comme suit :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 \\ 0 & R_1 \\ 0 & R_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \end{pmatrix} = D_r \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

La matrice  $D_r$  de dimension  $(18 \times 12)$  est appelée matrice de raccordement.

En utilisant cette relation, on peut réécrire le système d'équations (3.5) comme suit

$$[D(12 \times 18)] \cdot [D_r(18 \times 12)] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (3.10)$$

Soit encore

$$[D_s(12 \times 12)] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (3.11)$$

$D_s$  définit comme étant le produit matriciel des deux matrices  $D$  et  $D_r$ .

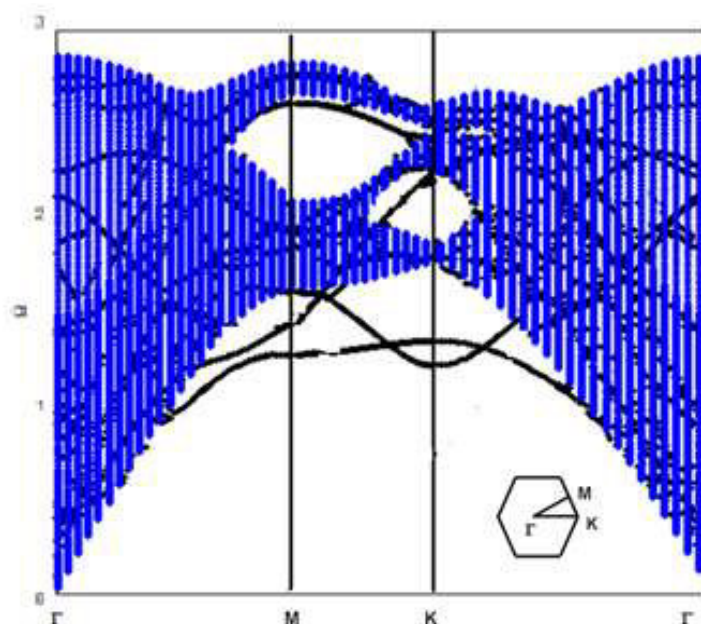
Ceci, pour des valeurs des rapports des constantes de forces donnés, les modes propres de phonons de surface localisés au voisinage de la surface alliage métallique ordonnée Cu-Pt(111) sont déterminés à l'aide de la relation de compatibilité

$$\det[D_s(12 \times 12)] = 0 \tag{3.12}$$

### III. 9. Les états localisés

#### III. 9. 1. Les états localisés au niveau d'une surface propre en platine Pt(111)

Les propriétés vibrationnelle du notre système surface alliage métallique Cu-Pt(111) sont présentées dans cette partie. Nous avons calculé les phonons localisés de la surface propre Pt(111), qu'on va utiliser comme système de référence dans le but de connaitre l'influence des atomes de cuivre sur cette surface. Les phonons de surface calculés sont mentionnés par des lignes noires pour la surface propre Pt(111) et la surface alliage sont calculés, en général, suivant les directions de haute symétrie  $\overline{\Gamma M}$ ,  $\overline{MK}$  et  $\overline{K\Gamma}$  comme montré dans les figures (III. 12-13).



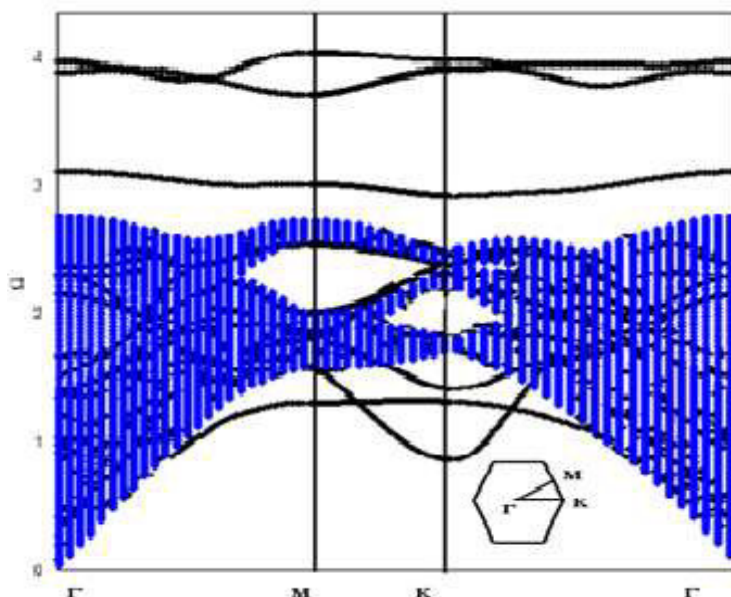
**Figure III. 12 :** Les courbes de dispersion des phonons de surface calculées pour la surface propre Pt(111) avec la bande des phonons en volume. Les états de surface sont indiqués par les lignes continues.

Les résultats obtenus pour la surface propre Pt(111) sont représentés sur la figure (III. 12). Nos calculs détaillent la présence de trois branches de phonons localisées situées sous la bande de phonons en volume. La plus basse d'entre elles est appelée branche de Rayleigh. Aux plus grandes longueurs d'ondes (c'est-à-dire au voisinage du point  $\Gamma$ ) ce mode correspond aux

déformations vibrationnelles verticales de la surface. Nos résultats montrent une branche de résonance dans l'intervalle  $\overline{MK}$ , près de la limite inférieure de la bande de volume, qui devient après une branche de phonon de surface dans le dernier intervalle. Nos résultats numériques montrent aussi une résonance dans l'intervalle  $\overline{K\Gamma}$ . Nos résultats révèlent l'existence de deux branches de phonon à des énergies plus élevées.

### III. 9. 2. Les états localisés au niveau d'une interface Alliage Cu- Pt(111)

Sur la figure III.13, les résultats correspondent aux phonons de surface de la surface alliage ordonnée Cu-Pt(111). La branche de Rayleigh pour la surface Pt(111) est maintenue et modifiée seulement très légèrement pour la surface alliage. Cependant, trois nouvelles branches apparaissent au-dessous de la bande de volume le long des directions de haute symétrie  $\overline{\Gamma M}$ ,  $\overline{MK}$  et  $\overline{K\Gamma}$ . Les branches de phonons dans les deux gaps d'énergie sont fortement modifiées par la présence des atomes de cuivre dans la couche intérieure de la surface alliage. Etant donné que la masse atomique effective et les constantes élastiques diminuent et augmentent, respectivement, dans une représentation de champ moyen, pour la couche extérieure, il est susceptible que les branches de phonons de la surface Pt(111) soient poussées vers les hautes énergies dans la surface alliage ordonnée ; pour être remplacées par des résonances dans les gaps d'énergie supérieures.

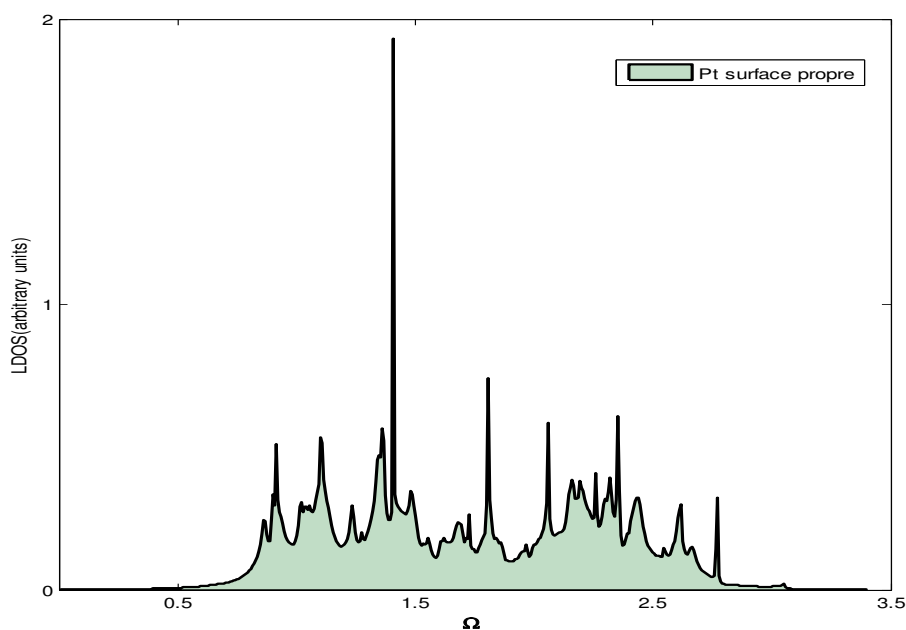


**Figure III. 13 :** Les courbes de dispersion des phonons de surface calculées pour la surface alliage Cu-Pt(111) avec la bande des phonons en volume. Les états de surface sont indiqués par les lignes continues.

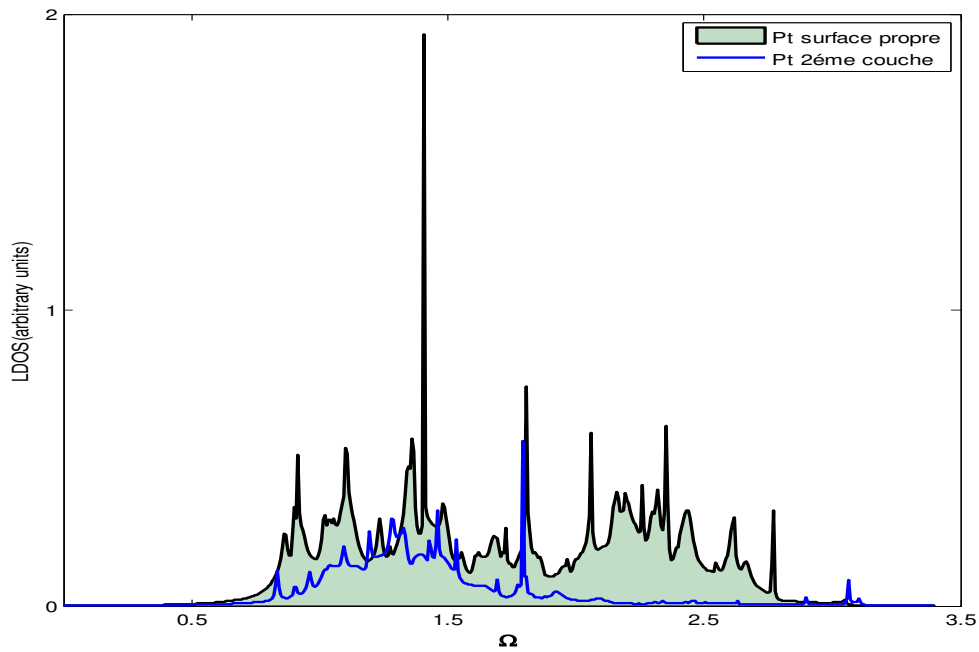
En outre, dans les branches de phonons de la surface alliage, en comparaison à celles de la surface propre Pt(111), nous constatons l'apparition de nouvelles branches de phonons optiques. En effet, le système de surface alliage exhibe trois telles branches de phonons de surface. L'une d'entre elles apparaît juste à la limite supérieure de la bande des phonons en volume, quand aux deux autres elles sont localisées plus haut au-dessus de cette bande. C'est clair que ces nouvelles branches de phonons de surface sont induites par la présence des atomes de cuivre entourés par six plus proches voisins d'atomes de cuivre dans la couche atomique intérieure.

### III. 10. Densité d'état vibrationnelle

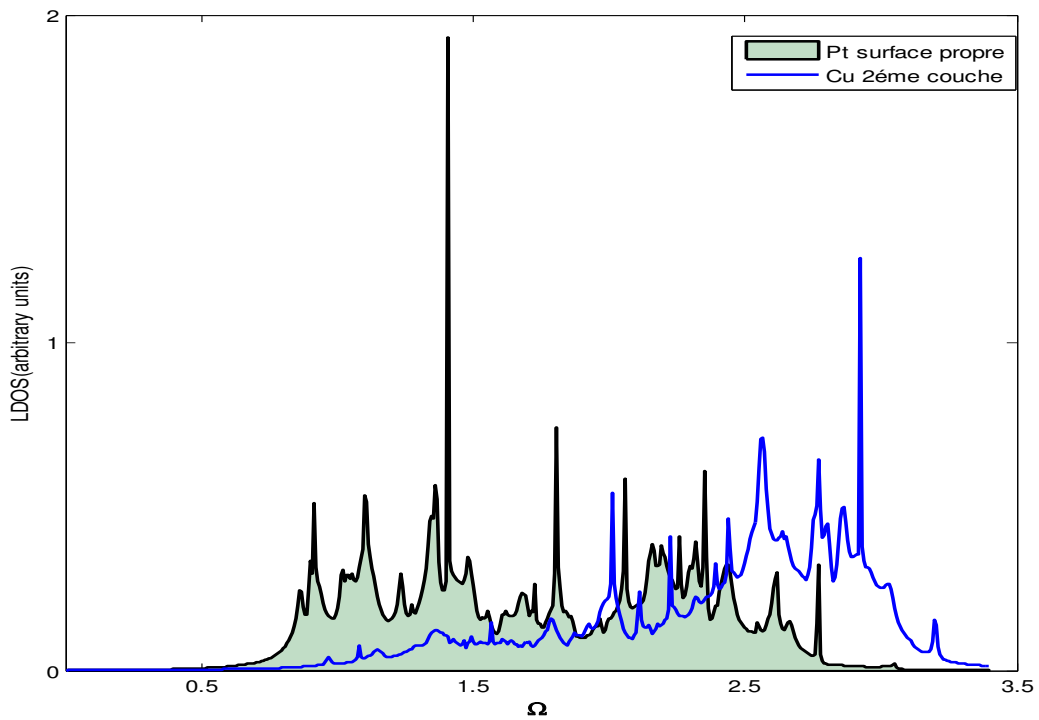
Les densités d'états vibrationnelles locales (LDOS) de notre système sont calculées numériquement par site atomique dans la couche de surface intérieure. Ces densités d'états sont données dans les unités arbitraires, en fonction de la fréquence normalisées  $\Omega$  dans la première zone de Brillouin. Sur la figure (III. 14) nous représentons les densités d'états vibrationnelles pour un site atomique de platine dans la couche atomique intérieure de la surface propre Pt (111), comme référence pour comparer avec la surface alliage Cu-Pt(111).



**Figure III. 14 :** La densité d'état vibrationnelle locale (LDOS) du site atomique de platine de la surface propre Pt(111).



**Figure III. 15 :** Les densités d'états vibrationnelles locales (LDOS) des sites atomiques de Pt dans la couche 2 atomique de la surface alliage avec celui de la densité d'état vibrationnelle de la surface propre Pt(111)



**Figure III. 16 :** Les densités d'états vibrationnelles locales des sites atomiques de Cu dans la couche 2 atomique de la surface alliage avec celui de la densité d'états vibrationnelle de la surface propre Pt(111) .

Ce travail reporte une investigation des propriétés vibrationnelles de la surface alliage ordonnée Cu-Pt(111) obtenue par le dépôt d'atomes de Cu sur la surface (111) d'un substrat de platine.

Les résultats des densités d'états sont présentés sur les figures III. 15 et III.16 montrent une diminution remarquable dans le spectre des densités d'états vibrationnelles des sites atomiques de platine dans la surface alliage, en comparaison à celle du site atomique de platine en deuxième couche dans la surface propre Pt(111). Ces différences sont dues essentiellement à la présence d'atomes de Cuivre dans la surface alliage, ce qui correspond à un transfert net d'activité vibrationnelle à partir des sites atomiques de platine aux sites atomiques de cuivre.

---

## Conclusion générale

L'étude des surfaces est un thème d'actualité intéressant dans le domaine de la physique des surfaces et d'interfaces. Elle permet, en effet, d'expliquer les phénomènes importants comme l'adsorption, la diffusion ainsi que la croissance cristalline. La surface est le lieu d'interactions entre le matériau et son environnement. Par conséquent, les surfaces jouent un rôle essentiel dans un grand nombre d'applications en nanotechnologie. Elles sont souvent utilisées comme des supports pour les nano-objets et interviennent directement dans les propriétés du matériau qu'on souhaite réaliser. A l'échelle atomique, une surface représente un environnement très asymétrique où les atomes ont une coordination et une structure électronique modifiées par rapport aux atomes du volume. Il en résulte que la structure de la surface peut être radicalement différente d'une simple terminaison du cristal.

La formation des alliages est un sujet compliqué dans la science des matériaux, on parle d'un alliage qui est le Cu – Pt. Ce sont des alliages très intéressants du point de vue de leurs propriétés catalytiques. Pour cela ces alliages de surface ont été largement étudiés par plusieurs auteurs, et ce pour leur intérêt technologique et scientifique, dans l'adsorption, la réactivité, la catalyse, ...

Notre étude a montré que l'inhomogénéité dans une structure cristalline influe considérablement sur les propriétés vibrationnelles des systèmes.

Les résultats les plus remarquables dans nos calculs est l'apparition de nouvelles branches de phonons pour la surface Cu-Pt(111) en comparaison avec la surface propre Pt(111). Quant aux résultats des densités d'états, ils montrent une diminution remarquable dans le spectre des densités d'états vibrationnelles des sites atomiques de Pt dans la surface alliage, en comparaison avec celle du site atomique de Pt en première couche dans la surface propre Pt(111).

La présence d'une surface dans une structure apporter une réponse sur l'impact de la morphologie de la surface sur les propriétés vibrationnelles des atomes dans le système.

La maîtrise parfaite des propriétés des systèmes en présence de surfaces va contribuer à la fabrication et la production de matériaux de caractéristiques améliorées, multifonctionnels moins coûteux, plus légers et plus fiables, en réalisant des revêtements atomiques.

## Références bibliographiques

- [1] Frenkel.J. Wave mechanics. ed T.i.s.o.m.o physics .1936 : oxford university press.
- [2] L.Richard, L. Weaver, I. O. Lobkis, J. Acoustical Society of America 113, 2611 (2003).
- [3] O. Nafa, Thèse de Doctorat, Université M.Mammeri de Tizi-Ouzou (2014).
- [4] B. Bourahla, Thèse de Doctorat, Université M.Mammeri de Tizi-Ouzou (2007).
- [5] F. Lekadir, Thèse de Doctorat, Université M.Mammeri de Tizi-Ouzou (2017).
- [6] G. Belkacemi, Thèse de Doctorat, Université M.Mammeri de Tizi-Ouzou (2015).
- [7] M. Boucherrab, Thèse de Doctorat, Université M.Mammeri de Tizi-Ouzou (2015).
- [8] F.Lekadir, Mémoire de magister, Université M.Mammeri de Tizi-Ouzou (2012).
- [9] S Kheffache, R Chadli, A Khater, Inter. J. Modern Phys. B 30, 1650126 (2016).
- [10] R Chadli, S Kheffache, A Khater, Surf. Rev. Lett. 23, 1650015 (2016).
- [11] B. Bourahla, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001).
- [12] S. Mokrani, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2009).
- [13] R. E. Allen, G. P. Alidrege, F. W. De Wette, Phys. Rev. 4, 1648 (1971).
- [14] R. A. Allen, Surf. Sci 76, 91 (1978).
- [15] R. E. Allen, G. P. Alldredge and F. W. De Wette, Phys. Rev. 4, 1648 (1971).
- [16] R. Challali, S. Sait, B. Bourahla, L. Ferrah, Spin 13, 2350001 (2023).
- [17] M. Boucherrab, O. Nafa, B. Bourahla, F. Chelli, J. Theo. Appl. Phys. 16, 162211 (2022).
- [18] L. Ferrah, B. Bourahla, S. Blizak, Spin 11, 2150028 (2021).
- [19] S. Sait, B. Bourahla, Inter. J. Modern Phys. B, 36, 2250012 (2022).
- [20] L. Djebala and B. Bourahla, Spin 11, 2150014 (2021).
- [21] S. Irene, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001).
- [22] M. Belhadi, R. Chadli, A. Khater, M. Abou Ghantous, Eur. Phys. J. Phys 37, 25 (2007).
- [23] George Green, J. für die reine und angewandte Mathematik 39 (1850).
- [24] J. C. Slater: *Quantum Theory of Molecules and Solids*, (M. C. Graw-Hill, New York, London, 1965).
- [25] P. Knippel B. M. Hall, Surf. Sci. 224, 983 (1989).
- [26] A. Kara, C. S. Jayanthi, S. Y. Wu et F. Ercolessi, Phys. Rev. Lett. 72, 2223 (1994).
- [27] E. J. Mele and M. V. Pykhtin, Phys. Rev. Lett. 75, 3878 (1995).
- [28] A. Kara, S. Durukanoglu and T. Rahim, Phys. Rev. B 53, 15489 (1995).
- [29] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 323 (1995).
- [30] H. Grimech and A. Khater, Surf. Sci. 341 (1995).
- [31] A. Virlouvet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec and K. Maschke, J. Phys. Condens. Matter, 8, 7589 (1996).
- [32] R. Tigrine, Thèse de doctorat d'état, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2004).
- [33] T. E. Feuchtwang, Phys. Rev. 155, 731 (1967).
- [34] J. Szeftel and A. Khater, Phys. Rev. C: Solid State Phys. 20, 4725 (1987).
- [35] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. D'Addatoet N. Auby, J. Phys. C: Solid State Phys. 21, 2113 (1988).
- [36] M. Bouatelli, Mémoire de magister, Université USTHB de Bab-Zouar (2007).
- [37] M. Rabia, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2008).
- [38] B. Bourahla, A. Khater. R. Tigrine. O. Rafil. M. Abou Ghantous, J. Phys. Condens. Matter. 19. 266208 (2007).
- [39] M. Belhadi and R.Chadli, Surf. Rev. Lett. 11, 321 (2004).
- [40] B. Bourahla, A. Khater. O. Rafil, R. Tigrine. J. Phys. Condens. Matter.18, 8683 (2006).
- [41] R. Tigrine, A. Khater, M. Belhadi. O. Rafil, Surf. Sci. 580,1 (2005).
- [42] M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, A.Virlouvet and K. Maschke, Eur. Phys J. B 15, 435 (2000).

- [43] R.Tigrine, F. Lekadir, A. Khater, Inter. J. Eng Inventions 6, 13 (2017).
- [44] F. Lekadir Fazia, R. Tigrine, A. Khater A, R. Chadli, Adv. Sci. Eng. Medicine 6, 1152 (2014).
- [45] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. D'Addatoet N. Auby, J. Phys. C: Solid State Phys. 21, 2113 (1988).
- [46] E. J. Garboczi and M. F. Thorpe, Phy. Rev. B.32, 7 (1985).
- [47] H. Yildirim, A. Kara, S. Durukanoglu and T. S. Rahman, Surf. Sci. 600, 484 (2006).
- [48] N. N. Chen and M. G. Cottam, Phy. Rev. B. 44, 14 (1991).
- [49] A.Virlouvet, H. Grimech, A. Khater, Y. Pennec, and K. Maschke, J. Phys.: Condens. Mat. 8, 7589 (1996).
- [50] R. Tigrine, Thèse de doctorat d'état, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2004).
- [51] B. Bourahla, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001).
- [52] R. Chadli, Thèse de Doctorat, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2012).
- [53] A. Ben Hadj Hamouda, Thèse de Doctorat, Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II. France (2007).
- [54] L. Rayleigh, Proc. Lond. Math. Soc. 17, 4 (1887).
- [55] A. E. H. Love, *Sorne Problems of Geodynamics*, (London, Cambridge University Press, 1911).
- [56] Y. S. Lee, K. Y. Lim, Y. D. Chung, C. N. Whang and Y. Jeon, Surf. Interf. Anal 30, 475 (2000).
- [57] S. Zhou, B. Varughese, B. Eichhorn, G. Jackson and K. McIlwrath, *Angewandt Chemie* 117, 4615 (2005).
- [58] J. S. Tsay, T. Mangen , K. Wandelt, Thin Solid Films 397, 152 (2001).
- [59] J. A. Rodriguez and M. Kuhn, J. Phys. Chem 98, 11251 (1994).
- [60] H. H. Brongersma and M. J. Sparnaay, Surf. Sci. 71, 657 (1978).
- [61] J. Banhart, P. Weinberger and J. Voitlander, J. Phys.: Condens. Matter 1, 7013 (1989).