

N° d'ordre :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE 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

THEME

**Effets d'une substitution sur la dynamique des films
monoatomiques ultramincés**

Présenté par : **MOUSSI**

PRENOM : Silia

Soutenu publiquement, le 20 /06 / 2019, devant le Jury composé de :

Nom et Prénom	Grade	Affiliation	Qualité
SAIT Smail	MC/B	UMMTO	Président
BOURAHILA Boualem	Professeur	UMMTO	Encadreur
KHEFFACHE Sedik	MC/B	UAMO/Bouira	Examineur
LATEB Yacine	MA/A	UMMTO	Examineur

Remerciements

A mon promoteur Mr Boualem Bourahla

Professeur à l'Université M. Mammeri de Tizi Ouzou.

Je tiens à lui exprimer ma profonde reconnaissance d'avoir accepté de diriger ce mémoire de Master, et pour l'efficacité et la bienveillance avec lesquelles il m'a constamment guidé et encouragé au cours de la période de stage que j'ai passé au sein du groupe de recherche « Equipe n° 4 : Excitations magnétiques et vibrationnelles des systèmes de basse dimensionnalité ».
Il a toujours su m'orienter et me proposer les choix scientifiques les plus adaptés à la résolution des problèmes que j'ai rencontrés. Veuillez trouver ici le témoignage de mon plus profond respect et ma plus vive reconnaissance.

A Mr Kheffach Sedik, Mr Chikh Anis et Mme Nafa Ouahiba

Je vous remercie pour les conseils et l'accueil très chaleureux et qui a facilité mon insertion dans le Laboratoire.

A Mr Sait Smail

Maitre de conférences à l'UNMTO

Je lui adresse mes plus vifs remerciements pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury.

A Mr Lateb Yacine

Maitre assistant à l'Université M. Mammeri.

Je lui adresse toute ma reconnaissance pour avoir accepté de faire partie de mon jury.

Dédicace

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

A mon cher père et ma très chère mère pour leur affection et leur amour et leur encouragement

Que dieu les garde et les protège

A mes sœurs Ouardia, Samia, Karima, Kahina et Katia

A mes frères Madjid, Hamid et Ghiles

A mes nièces mes neveux et ma belle sœur Meriem

A mes chères amis Yacine, Sabrina, Hassina, Ben slama Lamia, Anis, Amine et Samira,

A mes cousines et ma chère grande mère

Enfin, à tous ceux qui m'ont aidé à réaliser ce travail

Moussi Silia

Table de matières

Introduction générale	3
Chapitre1: Dynamique des films minces monoatomiques à trois plans parallèles parfaits	6
1.1) Introduction	6
1.2) Dynamique vibrationnelle d'une couche atomique parfaite	6
1.3) Description du film modèle étudié	6
1.4) Equations du mouvement et matrice dynamique	7
1.5) Courbes de dispersion	12
1.6) Discussion des courbes	13
Chapitre2: Spectres vibrationnels liés aux substitutions atomiques dans un film mince monoatomique à trois plans parallèles	14
2.1) Introduction	14
2.2) Défauts atomiques dans les films minces	14
2.3) Dynamique vibrationnelle d'un film mince perturbé	15
2.4) Description du film contenant le défaut	15
2.5) Méthodes théoriques employées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle	16
2.5.a) La méthode de raccordement	16
2.5.b) Principe de la méthode	17
2.6) Equations du mouvement et matrice dynamique du film perturbé	17
2.7) Matrice de raccordement	18
2.8) Calcul des grandeurs physiques	18
2.8.a) Coefficients de transmission et de réflexion	19
2.8.b) Conductance phononique	19
2.9) Résultats des simulations	20
2.9.1) Résultats des spectres de transmission et réflexion	20
2.9.1.a) Cas d'une masse légère	20
2.9.1.b) Cas d'une masse homogène	22
2.9.1.c) Cas d'une masse lourde	23
2.9.2) Résultats des conductances	24
2.10) Discussion des résultats	26
Conclusion générale	29
Références bibliographiques	30

Introduction générale

Le développement des nanosciences a vu l'émergence d'une nouvelle génération de matériaux et des smart-matériaux dans tous les domaines. La plupart de ces nouveaux matériaux sont obtenus par la réduction des dimensions des matériaux conventionnels. Ils sont dits nanomatériaux. Ils possèdent des propriétés physiques extraordinaires.

Aujourd'hui, la course est lancée, à l'échelle mondiale, afin de maîtriser leur utilisation industrielle. Ce qui a donné naissance aux nanotechnologies [1].

Parmi ces nanomatériaux, nous citons entre autres les films minces auxquels des nouvelles propriétés telles que la légèreté et la fiabilité sont associées.

Un film mince est une fine pellicule d'un matériau déposé sur un autre, dont l'une des dimensions qu'on appelle l'épaisseur est fortement réduite de telle sorte qu'elle varie de quelques nanomètres à quelque micromètre [2]. Cette faible distance entre les deux surfaces limites entraîne une perturbation de la majorité des propriétés physiques.

Très souvent un tel petit nombre de couches atomiques possède des propriétés très intéressantes. Dans ces conditions, le phénomène de réflexion optique ou d'absorption peuvent être connus de manière très précise, de même pour la conductivité électrique. La différence essentielle entre le matériau à l'état massif et celui en couches minces est liée au fait que dans l'état massif on néglige généralement avec raison le rôle des limites dans les propriétés, tandis que dans une couche mince ce sont au contraire les effets de confinement liés aux surfaces limites qui sont prépondérants. Il est assez évident que plus l'épaisseur sera faible plus cet effet de bi-dimensionnalité sera important. En revanche, lorsque l'épaisseur d'une couche mince dépassera un certain seuil l'effet d'épaisseur deviendra minime et le matériau retrouvera les propriétés bien connues des matériaux massifs classiques.

Les applications des couches minces dans le domaine technologique sont diverses et variées [3]. A titre d'exemples :

En optique, ces couches sont utilisées dans les revêtements anti-réflexion pour lentilles, cellules photovoltaïques, revêtements pour miroir aussi.

En chimie, sont insérés comme barrière de diffusion, protection anti corrosion, capteurs à gaz, revêtements catalytiques, couches protectrices, etc.

En mécanique, ils permettent la réduction de friction et l'amélioration de l'adhésion, la résistance mécanique et la dureté.

En magnétisme, ils représentent les éléments de stockage d'information (disque dur, mémoire vive RAM), dispositifs de sécurité.

En électronique, ils sont à la base des nano-résistances, capteurs piézoélectriques, transistors diodes, circuits intégrés miniaturisés dans les micros et téléphones portables, etc.

En médecine, ils sont incorporés dans les capteurs neurologiques, revêtements d'implants.

Le défi majeur, aujourd'hui, est que chaque film mince a ses propres propriétés. De plus, on ne peut pas étendre l'étude d'une couche à une autre. Dans chaque cas l'élaboration et la caractérisation et l'analyse sont à faire pour chaque couche séparément.

Il existe de nombreuses techniques de fabrication de ces couches minces [4]. Elles sont réparties : (i) méthodes physiques [5], telles que l'évaporation sous vide, ablation laser, MBE, pulvérisation cathodique et (ii) méthodes chimiques, comme spray pyrolyse, CVD, sol-gel [6]. L'étude des propriétés chimiques et physiques des matériaux, en général et des films minces en particulier, dépendent du comportement des électrons et de la dynamique des noyaux qui les composent. Dans le cadre de l'approximation Born-Oppenheimer, il est possible de découpler le mouvement des noyaux de ceux des électrons, donc les propriétés peuvent être découplées avec une bonne approximation [7], d'une part, celles liée aux électrons et d'autre part celles liée aux mouvements des noyaux autour de leurs positions d'équilibre.

On rappelle que la possibilité qu'ont les ions d'un métal ou d'un isolant de se déplacer autour de leur position d'équilibre est un élément qui doit être pris en compte dans la description des propriétés d'un matériau. De façon générale on peut dire que :

les vibrations des ions sont essentielles dans la détermination des propriétés d'un matériau qui ne sont pas dominées par la contribution des électrons (chaleur spécifique à des températures $T \approx 10$ K, dilatation thermique des solides, fusion). Ces vibrations participent au transport de l'énergie dans un solide (conductivité thermique des isolants, propagation des ondes acoustiques).

Les propriétés vibratoires permettent, aussi, de comprendre la variation du temps de relaxation des électrons introduit en relation avec les phénomènes de transport dans les métaux, en fonction de la température l'effet des vibrations du réseau sur l'interaction effective entre deux électrons d'un matériau est à la base de la compréhension de la supraconductivité. Les vibrations du réseau jouent un rôle dans la réponse d'un matériau, en présence d'une radiation telle que les rayons X, la lumière visible, les neutrons, etc. [8].

Dans ce travail, nous nous intéressons à la dynamique des atomes d'une couche mince bien précise, composée de trois plans monoatomiques parallèles, contenant une inhomogénéité atomique définie comme étant une substitution par un autre type d'atome. Nous déterminons la façon dont les sites vibrent et nous identifions les fréquences et les modes propres de vibration et nous donnons les relations de dispersion en fonction des grandeurs caractérisant les interactions de chaque atome avec son environnement dans le film mince. Notre étude est menée dans le cadre de l'approximation harmonique [9].

Nous déterminons principalement les coefficients de transmission et de réflexion via les atomes substitués [10]. La transmittance (conductance) phononique est aussi présentée [11]. On signale que, dans le cas des matériaux conducteur l'effet électronique est dominant, mais dans les semi-conducteurs et les isolants la conduction se fait par vibration du réseau cristallin (les électrons sont fortement liés au noyau).

Le mémoire est structuré comme suit :

Dans le premier chapitre, nous avons étudié la dynamique vibrationnelle d'un film mince monoatomique parfait, composés de trois plans parallèles.

Dans le second chapitre, nous avons réalisé une étude portant sur la dynamique vibrationnelle d'un film perturbé, présentant des sites atomiques substitués. Nous terminons le manuscrit par une conclusion générale.

Chapitre 1

Dynamique des films minces monoatomiques à trois plans parallèles parfaits

1.1) Introduction

Le problème à résoudre consiste en l'étude de la diffusion d'ondes vibratoires dans un cristal comportant un défaut de structure [12]. Nous devons, pour ce faire, d'abord nous analysons le comportement de l'onde qui se propage à travers un réseau parfait. De ce fait, il serait possible de construire un modèle contenant suffisamment de paramètres pour décrire avec une bonne précision un système réel. Cependant, ce travail ne cherche pas directement à obtenir une adéquation quantitative avec des grandeurs expérimentales, qui n'ont d'ailleurs pas été mesurées pour l'instant. L'objectif est de faire apparaître les phénomènes qui nous intéressent sans les noyer dans des difficultés numériques.

1.2) Dynamique vibrationnelle d'une couche atomique parfaite

Pour déterminer la dynamique vibrationnelle d'un système atomique quelconque, il faudrait connaître sa matrice dynamique [13]. Pour construire cette dernière, on suit les étapes suivantes :

- Repérer la cellule unitaire du système,
- Ecrire les équations du mouvement de l'ensemble des sites atomiques constituant la cellule unitaire,
- Les équations doivent être écrites suivant les trois axes,
- Regrouper l'ensemble des équations de mouvement sous forme d'une matrice appelée matrice dynamique.

1.3) Description du film modèle étudié

Le modèle est assimilé à un triple plan (plan A, plan B, plan C) infini d'atomes qui représente un guide d'onde parfait quasi bidimensionnel. Les masses, dont les interactions sont modélisées par des ressorts harmoniques, sont disposées 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. Comme le montre la figure (1.1)

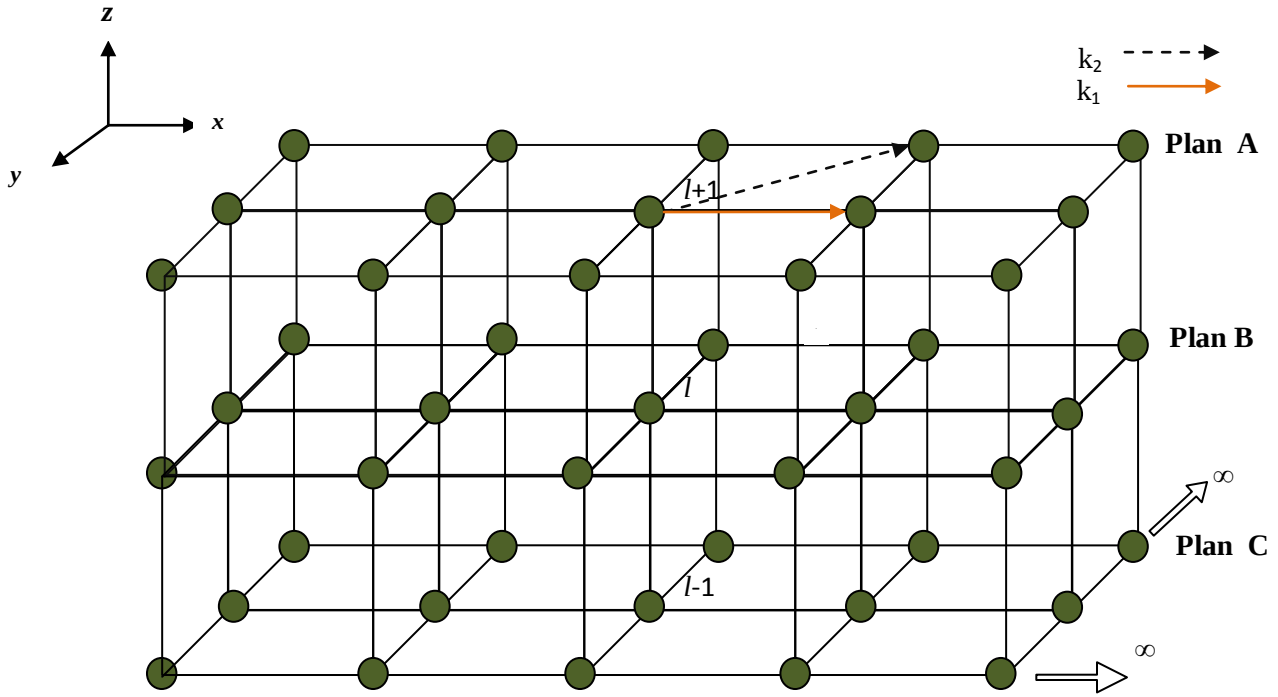


Figure 1.1 : Représentation d'un guide d'onde parfait, constitué de trois plans monoatomiques.

1.4) Equations du mouvement et matrice dynamique

Le mouvement des atomes dans notre système est décrit par l'équation dynamique de Newton [14],

$$\sum \vec{F} = m \cdot \vec{a}$$

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

ω est la fréquence propre d'oscillation, m est la masse de l'atome, $\vec{a}$ est l'accélération du mouvement, a est son amplitude et k est la constante de force entre sites.

L'équation du mouvement est donnée par l'équation suivante :

$$m_n \frac{d^2 \vec{u}(l, l')}{dt^2} = - \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} \right) k(l, l') [\vec{u}_{\beta}(l, t) - \vec{u}_{\beta}(l', t)] \quad (1.1)$$

Les indices α et β désignent les directions cartésiennes. m_n : est la masse de l'atome positionné au site l , et le vecteur $\vec{u}_{\beta}(l, t)$ décrit l'amplitude de vibration.

r_α est la composante cartésienne selon la direction α du vecteur $\vec{r}(l, l')$ joignant les positions d'équilibre des atomes l et l' et r est le module du vecteur $\vec{r}(l, l')$. Le $k(l, l')$ est la constante de force qui couple deux sites adjacents.

L'équation précédente doit être réécrite pour tous les N sites atomiques composant la cellule unitaire. Et ce dans les trois directions cartésiennes. On obtient un système de $3N$ équations pour N atomes. Dans ce travail, on dénombre trois ($N = 3$) atomes dans la cellule unitaire. Et en tenant compte du nombre de degré de liberté par site (3ddl), on aura neuf ($3N = 9$) équations.

Les solutions de ces équations du mouvement sont prises comme étant des ondes planes harmoniques [15], qui s'écrivent sous la forme

$$u_\alpha(l, t) = u_\alpha(l, \omega) e^{i\omega t} \quad (1.2)$$

En injectant la solution dans l'équation (1). Alors elle peut se mettre sous la forme :

$$\omega^2 m_n u_\alpha(l, \omega) = \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left[\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right] k(l, l') \{ u_\beta(l', \omega) - u_\beta(l, \omega) \} \quad (1.3)$$

Pour avoir les équations du mouvement, nous devons considérer les trois sites de la cellule unitaire et nous projetons chaque équation (Eq.1.3) suivant les trois directions (Ox , Oy et Oz).

i) Site atomique $l(i, j, k)$

a) Suivant la direction (Ox)

$$\begin{aligned} -m\omega^2 u_x(i, j, k) = & -(2k_1 + 4k_2)u_x(i, j, k) + k_1 u_x(i + 1, j, k) + k_1 u_x(i - 1, j, k) + \\ & \frac{k_2}{2} u_x \left(i + 1, j + 1, k \right) + \frac{k_2}{2} u_x(i - 1, j - 1, k) + \frac{k_2}{2} u_x(i + 1, j - 1, k) + \\ & \frac{k_2}{2} u_x(i - 1, j + 1, k) + \frac{k_2}{2} u_x(i + 1, j, k + 1) + \frac{k_2}{2} u_x(i - 1, j, k + 1) + \\ & \frac{k_2}{2} u_x(i + 1, j, k - 1) + \frac{k_2}{2} u_x(i - 1, j, k - 1) + \frac{k_2}{2} u_y(i + 1, j + 1, k) + \\ & \frac{k_2}{2} u_y(i - 1, j - 1, k) - \frac{k_2}{2} u_y(i - 1, j + 1, k) - \frac{k_2}{2} u_y(i + 1, j - 1, k) + \\ & \frac{k_2}{2} u_z(i + 1, j, k + 1) - \frac{k_2}{2} u_z(i - 1, j, k + 1) - \frac{k_2}{2} u_z(i + 1, j, k - 1) + \\ & \frac{k_2}{2} u_z(i - 1, j, k - 1) \end{aligned}$$

b) Suivant la direction (Oy)

$$\begin{aligned}
-m\omega^2 u_y(i, j, k) = & -(2k_1 + 4k_2)u_y(i, j, k) + k_1 u_y(i, j + 1, k) + k_1 u_y(i, j - 1, k) + \\
& \frac{k_2}{2} u_y(i + 1, j + 1, k) + \frac{k_2}{2} u_y(i - 1, j - 1, k) + \frac{k_2}{2} u_y(i + 1, j - 1, k) + \\
& \frac{k_2}{2} u_y(i - 1, j + 1, k) + \frac{k_2}{2} u_y(i, j + 1, k + 1) + \frac{k_2}{2} u_y(i, j - 1, k + 1) + \\
& \frac{k_2}{2} u_y(i, j + 1, k - 1) + \frac{k_2}{2} u_y(i, j - 1, k - 1) + \frac{k_2}{2} u_x(i + 1, j + 1, k) + \\
& \frac{k_2}{2} u_x(i - 1, j - 1, k) - \frac{k_2}{2} u_x(i + 1, j - 1, k) - \frac{k_2}{2} u_x(i - 1, j + 1, k) + \\
& \frac{k_2}{2} u_z(i, j + 1, k + 1) - \frac{k_2}{2} u_z(i, j + 1, k - 1) - \frac{k_2}{2} u_z(i, j - 1, k - 1) + \\
& \frac{k_2}{2} u_z(i, j + 1, k - 1)
\end{aligned}$$

c) Suivant la direction (Oz)

$$\begin{aligned}
-m\omega^2 u_z(i, j, k) = & -(2k_1 + 4k_2)u_z(i, j, k) + k_1 u_z(i, j, k + 1) + k_1 u_z(i, j, k - 1) + \\
& \frac{k_2}{2} u_z(i + 1, j, k + 1) + \frac{k_2}{2} u_z(i - 1, j, k + 1) + \frac{k_2}{2} u_z(i + 1, j, k - 1) + \\
& \frac{k_2}{2} u_z(i - 1, j, k - 1) + \frac{k_2}{2} u_z(i, j + 1, k + 1) + \frac{k_2}{2} u_z(i, j - 1, k + 1) + \\
& \frac{k_2}{2} u_z(i, j + 1, k - 1) + \frac{k_2}{2} u_z(i, j - 1, k - 1) + \frac{k_2}{2} u_x(i + 1, j, k + 1) - \\
& \frac{k_2}{2} u_x(i - 1, j, k + 1) + \frac{k_2}{2} u_x(i - 1, j, k - 1) - \frac{k_2}{2} u_x(i + 1, j, k - 1) + \\
& \frac{k_2}{2} u_y(i, j + 1, k + 1) - \frac{k_2}{2} u_y(i, j - 1, k + 1) + \frac{k_2}{2} u_y(i, j - 1, k - 1) - \\
& \frac{k_2}{2} u_y(i, j + 1, k - 1)
\end{aligned}$$

De la même manière, on écrit les autres équations du mouvement des sites atomiques $(l+1)$ et $(l-1)$.

Comme l'onde propageante est une onde plane harmonique [9], on introduit les notations suivantes :

$$u_\alpha(i \mp 1, j, k) = Z_1^{\mp 1} u_\alpha(i, j, k) \quad (1.4)$$

Où Z_1 et Z_2 sont les facteurs de phase satisfaisant la condition de propagation suivant les axes x et y . Ils sont donnés par :

$$Z_1 = \exp(iq_x \times a) = e^{i\phi_x} \text{ Et } Z_2 = \exp(iq_y \times a) = e^{i\phi_y}.$$

En tenant compte de ces nouvelles notations, les équations du mouvement prendront la forme suivante :

Suivant la direction (Ox)

$$\begin{aligned} & [m\omega^2 - 2k_1 - 4k_2 + (k_1 + k_2 \cos \phi_y)(Z_1 + Z_1^{-1})]u_x(i, j, k) \\ & + ik_2 \sin \phi_y (Z - Z^{-1})u_y(i, j, k) + \frac{k_2}{2}(Z_1 + Z_1^{-1})u_x(i, j, k - 1) \\ & + \frac{k_2}{2}(Z_1 + Z_1^{-1})u_x(i, j, k + 1) - \frac{k_2}{2}(Z_1 - Z_1^{-1})u_z(i, j, k - 1) \\ & + \frac{k_2}{2}(Z_1 - Z_1^{-1})u_z(i, j, k + 1) = 0 \end{aligned}$$

Suivant la direction (Oy)

$$\begin{aligned} & [m\omega^2 - 2k_1 - 4k_2 + (k_1 + k_2 \cos \phi_y)(Z_1 + Z_1^{-1})]u_y(i, j, k) \\ & + ik_2 \sin \phi_y (Z - Z^{-1})u_x(i, j, k) \\ & + k_2 \cos \phi_y u_y(i, j, k + 1) + k_2 \cos \phi_y u_y(i, j, k - 1) + k_2 \sin \phi_y u_z(i, j, k + 1) \\ & - k_2 \sin \phi_y u_z(i, j, k - 1) = 0 \end{aligned}$$

Suivant la direction (Oz)

$$\begin{aligned} & [m\omega^2 - 2k_1 - 4k_2]u_z(i, j, k) + (k_1 + k_2 \cos \phi_y + \frac{k_2}{2}(Z_1 + Z_1^{-1}))u_z(i, j, k - 1) \\ & + (k_1 + k_2 \cos \phi_y + \frac{k_2}{2}(Z_1 + Z_1^{-1}))u_z(i, j, k + 1) \\ & + ik_2 \sin \phi_y u_y(i, j, k + 1) - ik_2 \sin \phi_y u_y(i, j, k - 1) \\ & - \frac{k_2}{2}(Z_1 - Z_1^{-1})u_x(i, j, k - 1) + \frac{k_2}{2}(Z_1 - Z_1^{-1})u_x(i, j, k + 1) = 0 \end{aligned}$$

(*) Le même travail doit être fait pour les deux autres sites.

L'ensemble des équations peut être regroupé sous forme d'une matrice D , appelée matrice dynamique. Elle est de taille (9×9). Elle décrit le mouvement du système parfait composé de trois plans parallèle.

La matrice dynamique est donnée sous la forme suivante

$$D \begin{bmatrix} D(1,1) & D(1,2) & 0 & D(1,4) & 0 & D(1,6) & 0 & 0 & 0 \\ D(2,1) & D(2,2) & 0 & 0 & D(2,5) & D(2,6) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D(3,3) & D(3,4) & D(3,5) & D(3,6) & 0 & 0 & 0 \\ D(4,1) & 0 & D(4,3) & D(4,4) & D(4,5) & 0 & D(4,7) & 0 & D(4,9) \\ 0 & D(5,2) & D(5,3) & D(5,4) & D(5,5) & 0 & 0 & D(5,8) & D(5,9) \\ D(6,1) & D(6,2) & D(6,3) & 0 & 0 & D(6,6) & D(6,7) & D(6,8) & D(6,9) \\ 0 & 0 & 0 & D(7,4) & 0 & D(7,6) & D(7,7) & D(7,8) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D(8,5) & D(8,6) & D(8,7) & D(8,8) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D(9,4) & D(9,5) & D(9,6) & 0 & 0 & D(9,9) \end{bmatrix}$$

Les éléments constituant la matrice sont données ci-après

$$\begin{aligned} D(1,1) &= D(7,7) = 2k_1 + 3k_2 (Z_1 + Z_1^{-1})(k_1 + k_2 \cos \phi_y), \\ D(1,2) &= D(2,1) = -ik_2 \sin \phi_y (Z_1 - Z_1^{-1}), \\ D(1,6) &= -D(6,1) = -k_2/2 (Z_1 - Z_1^{-1}), \\ D(2,2) &= D(8,8) = 2k_1 + 3k_2 \cos \phi_y (2k_1 + k_2 (Z_1 + Z_1^{-1})), \\ D(2,5) &= D(5,2) = D(5,8) = D(8,5) = -k_2 \cos \phi_y, \\ D(3,3) &= D(9,9) = k_1 + 2k_2, \\ D(3,4) &= -D(4,3) = -k_2/2 (Z_1 - Z_1^{-1}), \\ D(3,5) &= -D(5,3) = -ik_2 \sin \phi_y, \\ D(3,6) &= -D(6,3) = k_1 + k_2 \cos \phi_y + k_2/2 (Z_1 + Z_1^{-1}), \\ D(4,4) &= 2k_1 + 4k_2 (Z_1 + Z_1^{-1})(k_1 + k_2 \cos \phi_y), \\ D(4,7) &= D(7,4) = D(4,1) = D(1,4) = -k_2/2 (Z_1 + Z_1^{-1}), \\ D(4,9) &= -D(9,4) = -k_2/2 (Z_1 - Z_1^{-1}), \\ D(5,5) &= 2k_1 + 4k_2 \cos \phi_y (2k_1 + k_2 (Z_1 + Z_1^{-1})), \\ D(5,9) &= -D(9,5) = D(2,6) = -D(6,2) = D(6,8) = D(8,6) = -ik_2 \sin \phi_y, \\ D(6,6) &= 2k_1 + 4k_2, \\ D(6,7) &= -D(7,6) = -k_2/2 (Z_1 - Z_1^{-1}), , \\ D(6,9) &= D(9,6) = -(k_1 + k_2 \cos \phi_y + k_2/2 (Z_1 + Z_1^{-1})), \\ D(7,8) &= D(8,7) = D(4,5) = D(5,4) = -ik_2 \sin \phi_y (Z_1 - Z_1^{-1}) \end{aligned}$$

Pour avoir les caractéristiques du mouvement vibratoire du système étudié, on doit chercher les valeurs et vecteurs propres. Pour y accéder on diagonalise la matrice dynamique. Elle est donnée par la relation suivante :

$$[\omega^2 I - D(\vec{q}, \gamma)]|u\rangle = 0 \quad (1.6)$$

Où : $D(\vec{q}, \gamma)$ est la matrice dynamique de taille (9×9) , 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 $|\vec{u}\rangle$ le vecteur propre des déplacements.

Pour que le système homogène ait des solutions non triviales en ω^2 , on calcule :

$$\det(\omega^2 I - D(\vec{q}, \gamma)) = 0.$$

On peut déterminer ainsi, pour chaque vecteur d'onde $\vec{q}$ de la première zone de Brillouin [16] les différents modes de vibration dans le système considéré.

1.5) Courbes de dispersion

Pour faciliter le tracé des courbes de dispersion, on introduit les grandeurs normalisées.

L'équation aux valeurs propres précédente prend la nouvelle forme :

$$[\Omega^2 I - D(Z_1, Z_2, \gamma)]|\vec{u}\rangle = 0$$

Où : $\Omega^2 = \frac{m\omega^2}{k_1} = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2$ est la fréquence normalisée ; $\gamma = k_2/k_1$ est le rapport entre les constantes de forces des deuxièmes et premiers voisins du réseau parfait.

Les valeurs propres de la matrice donnent les fréquences propres de vibration Ω en fonction de ϕ_x telle que $\phi_x = q_x a$. Lorsque $\vec{q}_x$ balaie la première zone de Brillouin.

Sur la figure (1.2), nous avons représenté la courbe de dispersion en fonction de q_x pour une incidence fixe $q_y = 0$.

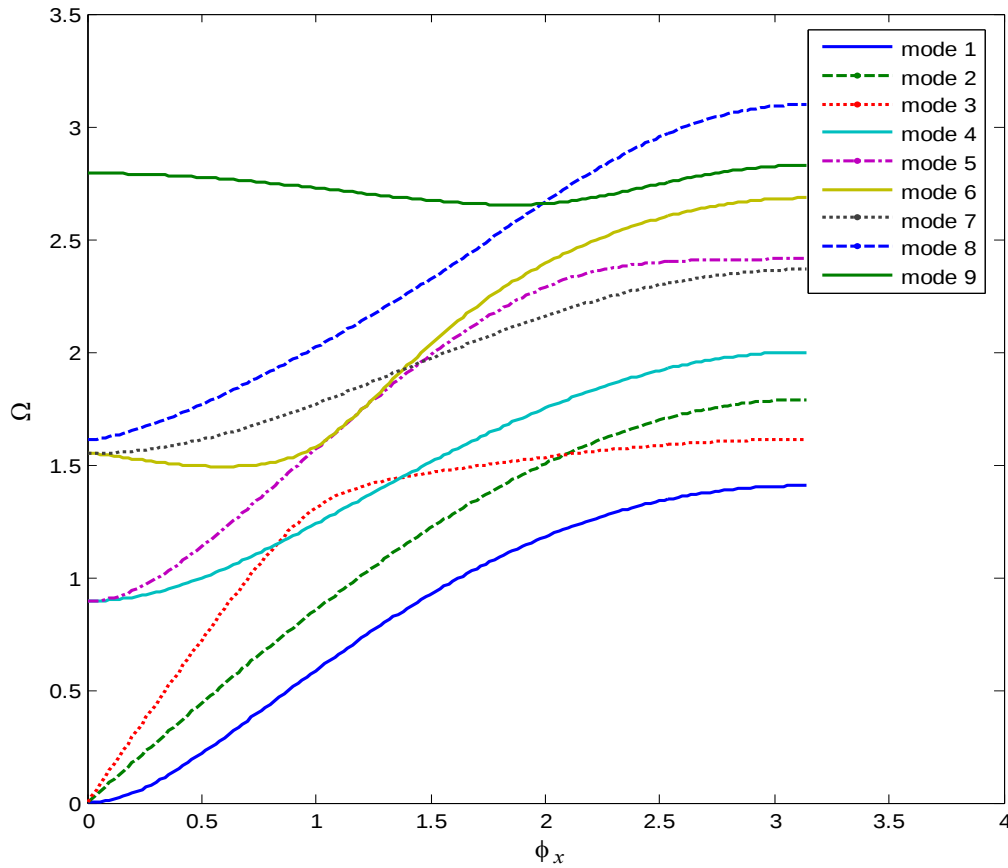


Figure 1.2 : Courbes de dispersion d'un guide d'onde parfait composé de trois plans monoatomiques parallèles.

1.6) Discussion des courbes

On signale que les courbes sont symétriques par rapport à l'axe vertical. Dans ce travail, nous n'avons représenté que la moitié.

Au total, il y a neuf (9) branches correspondant aux neuf modes de vibrations (mathématiquement les neuf valeurs propres de la matrice dynamique de l'équation (4)).

Chaque mode se propage dans son propre intervalle de fréquence. Ces derniers sont résumés sous forme d'un tableau.

Mode	Intervalle de propagation
Mode 1	$\Omega \in [0.00, 1.41]$
Mode 2	$\Omega \in [0.00, 1.80]$
Mode 3	$\Omega \in [0.00, 1.61]$
Mode 4	$\Omega \in [0.90, 2.00]$
Mode 5	$\Omega \in [0.90, 2.41]$
Mode 6	$\Omega \in [1.55, 1.50, 2.70]$
Mode 7	$\Omega \in [1.55, 2.36]$
Mode 8	$\Omega \in [1.61, 3.10]$
Mode 9	$\Omega \in [2.80, 2.65, 2.82]$

On constate qu'il y a deux types de modes :

- i) Ceux pour lesquels leurs fréquences tendent vers zéro, lorsque le vecteur d'onde tend vers zéro. On les appelle modes acoustiques [17].
- ii) Les modes pour lesquels leurs énergies sont différentes de zéro lorsque tend vers le centre de la zone de Brillouin. On les nomme modes optiques [18].

La forme des modes n'est pas linéaire. Et le calcul des pentes des tangentes à ces courbes donne les vitesses de groupe (chaque mode on lui associé une vitesse).

Ces vitesses sont exprimées analytiquement par la formule suivante :

$$v_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} \quad \text{Soit } \vec{v}_g = \overrightarrow{\text{grad}}[\Omega(\vec{q})] \quad (1.7)$$

Nous rappelons que ces vitesses sont indispensables pour étudier la diffusion et la propagation des ondes élastiques dans le guide d'onde considéré.

Chapitre 2

Spectres vibrationnels liés aux substitutions atomiques dans un film mince monoatomique à trois plans parallèles

2.1) Introduction

Malgré la maîtrise des moyens de fabrication des films ultraminces, ces derniers ne sont jamais parfaits. Des inhomogénéités sont constatées en présence des surfaces/interfaces et des défauts atomiques [19]. Ces inhomogénéités gouvernent une grande partie des propriétés physiques des films. Ces défauts étaient souvent négligés par les modèles théoriques. Car leur étude pose des problèmes théoriques compliqués à résoudre, qui sont liés essentiellement à la brisure de symétrie. Ainsi, fallait-il trouver des méthodes appropriées pour leurs études ?.

2.2) Défauts atomiques dans les films minces

Certaines propriétés des matériaux dépendent essentiellement de la structure et des défauts. En revanche, les propriétés sont fortement influencées par la nature et la concentration des défauts qu'ils contiennent. Ces derniers peuvent être classés en quatre catégories : ponctuels, linéaires, surfaciques et volumiques [20-22].

- Défauts ponctuels (0 D)

Ce sont des perturbations du réseau à l'échelle atomique. Parmi ces défauts citons : les lacunes, les interstitiels, les défauts extrinsèques, amas de défauts, ...

Les défauts ponctuels influencent le comportement mécanique à chaud, la diffusion de la matière et de la chaleur, ainsi que la conductivité électrique. Dans les cristaux transparents, les défauts ponctuels ou leurs associations peuvent former des centres colorés en modifiant les niveaux d'énergie et les longueurs d'ondes absorbées et donc la couleur visible.

- Défauts linéaires (1D)

Ce sont les défauts atomiques à une dimension. Ils correspondent à une discontinuité dans l'organisation de la structure cristalline. On les appelle souvent les dislocations et on distingue : dislocation coin, dislocation vis, dislocation mixte.

Les dislocations définissent plusieurs propriétés physiques des matériaux, comme la propagation de la déformation plastique. Elles sont responsables de leur ductilité et permettent la mise en forme des pièces métalliques. Les déformations du réseau cristallin qu'elles induisent facilitent la diffusion d'atomes, elles permettent ainsi l'installation de défauts à ses

alentours ce qu'on appelle nuage de Cottrell. Comme elles influencent aussi les propriétés électroniques des semi-conducteurs.

- Défauts surfaciques (2D)

Ce sont des défauts à deux dimensions, on peut trouver : les joints de grains, les défauts d'empilement et les macles.

- Défauts volumiques (3D)

Les défauts volumiques sont des défauts à trois dimension est le remplacement d'une partie du cristal par un volume d'un composé étranger. Ce dernier peut différer du cristal par sa nature chimique et/ou cristallographique et peut être : les précipités, inclusion.

On signale que les défauts volumiques n'ont pas les mêmes propriétés mécaniques, en particulier, le même module de Young que le reste du matériau. Il s'ensuit des concentrations de contrainte et donc un amorçage de rupture possible. Ils n'ont pas non plus les mêmes propriétés chimiques. Il peut donc se produire des corrosions localisées. Enfin, ce sont des obstacles aux dislocations.

Actuellement, plusieurs études sont menées pour comprendre leurs influences sur les propriétés physiques d'une façon générale. Notre contribution, porte sur l'étude de l'impact d'une substitution atomique sur la dynamique vibrationnelles des films minces.

2.3) Dynamique vibrationnelle d'un film mince perturbé

Afin d'étudier la dynamique vibrationnelle d'un système perturbé, il faudrait connaître la matrice dynamique du film mince D_D en présence de la partie défaut.

2.4) Description du film contenant le défaut

Il est obtenu par la substitution d'un rangé d'atome suivant l'axe (Oy) au niveau du premier plan, noté plan A. Une illustration est donnée sur la figure 3.

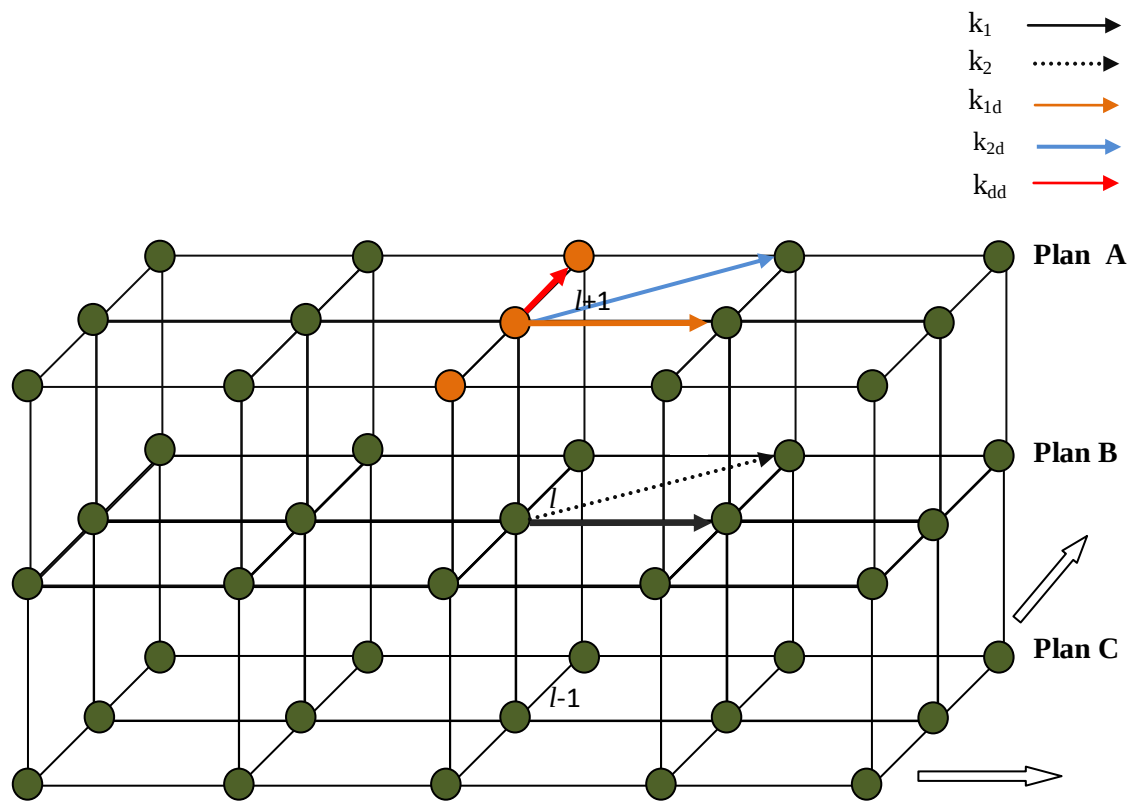


Figure 2.3 : Représentation d'un guide d'onde perturbé, composé de trois plan atomiques parallèles et contenant une substitution atomique.

2.5) Méthodes théoriques employées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle

Dans l'étude de la dynamique vibrationnelle, différentes méthodes théoriques sont employées. Parmi ces méthodes, on cite la méthode de Slab [23, 24], la méthode de Green [25, 26] et la méthode de raccordement.

Dans notre étude, nous avons utilisé la méthode de raccordement [27].

2.5.a) La méthode de raccordement

Cette méthode a été introduite pour la première fois par l'allemand Feuchtwang lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini à trois dimensions [28]. Elle a été reprise en 1987 par les deux chercheurs Antoine Khater et Jacob Szeftel dans deux articles ; le premier étant un développement du formalisme mathématique utilisé et le second une application aux surfaces Ni(100) et Ni(100) + c (2×2).

Depuis, la méthode de raccordement a contribué à l'étude de la dynamique vibrationnelle d'un grand nombre de systèmes physiques nanostructurés.

2.5.b) Principe de la méthode

Cette méthode consiste à décrire le mouvement de vibration des atomes par un nombre fini d'équations. Son application exige que le système considéré soit devisé en trois zones.

- ❖ **zone parfaite** : zone loin du défaut, elle est caractérisée par une périodicité 3D et c'est-elle qui permet le tracé des courbes de dispersion.
- ❖ **zone de défaut (perturbée)** : c'est la région qui renferme tous types de nanostructures, de défauts et dans cette zone la périodicité est brisée.
- ❖ **zone de raccordement** : composée des atomes situés entre les régions parfaites et les atomes de la zone perturbée. Elle permet dans la modélisation théorique de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut avec les états de vibration.

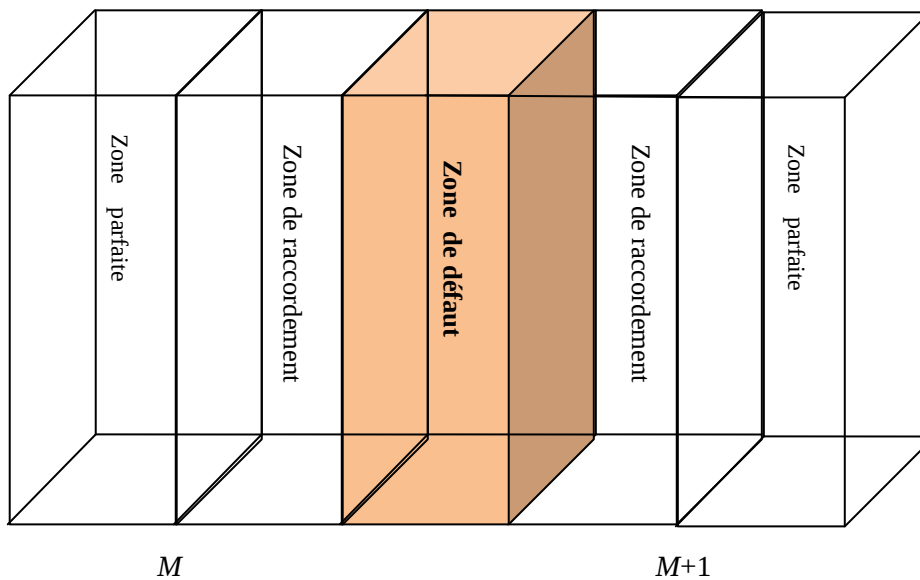


Figure 2. 4 : Représentation schématique d'un solide en présence d'un défaut selon le concept de la méthode de raccordement.

2.6) Equations du mouvement et matrice dynamique du film perturbé

Pour écrire les équations du mouvement on fait appel à l'équation 3 du chapitre 1.

Pour ces systèmes l'écriture des équations du mouvement des atomes qui se trouvent entre les colonnes (M) et ($M+1$) (atomes des zones défaut et de raccords), permettent d'aboutir à la matrice dynamique D_D du système perturbé. Elle à une forme rectangulaire, elle s'écrit sous la forme :

$$[D_D]|u\rangle = [D_D] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (2.8)$$

Où le vecteur $|u\rangle$ représente les déplacements de tous les sites appartenant à la zone comprise entre les colonnes (M) et ($M+1$) de la figure (4). Il est composé deux parties : la première $|irr\rangle$ constituée par les déplacements des sites irréductibles formant la région défaut, et la seconde $|rac\rangle$ formée par les déplacements associés aux sites raccordés (colonnes M et $M+1$). Cette matrice constitue un point de départ incontournable pour le calcul d'importantes grandeurs physiques.

Dans notre cas, on aboutit à une matrice de taille (27×45).

2.7) Matrice de raccordement

Comme la matrice dynamique du film perturbé est rectangulaire, on doit utiliser un moyen pour avoir accès aux propriétés dynamique du film. L'une des solutions possible est l'emploi de la méthode de raccordement. Cette dernière consiste à relier analytiquement les amplitudes du mouvement des sites adjacents aux mouvements des sites de raccordement via les grandeurs dites de raccordement (poids pondérés). Ces derniers sont issus de l'étude de la dynamique du film parfait sans défaut. On obtient une autre matrice rectangulaire, notée R , de dimension inverse de la matrice dynamique [29].

Dans ce travail, la matrice de raccordement est de taille (45×27).

- Le produit matriciel entre la matrice dynamique et la matrice de raccordement permet d'obtenir une matrice carrée. Cette dernière matrice permet de calculer toutes les grandeurs physiques voulues.

$$[D_D(27 \times 45)] \cdot [R(45 \times 27)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [S(27 \times 27)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

2.8) Calcul des grandeurs physiques

Dans ce travail, on s'est intéressé à la diffusion des ondes élastiques via la chaîne atomique substituée. En particulier, nous calculons les coefficients de transmission et de réflexion et la conductance des phonons.

2.8.a) Les coefficients de transmission et de réflexion

Les coefficients de réflexion et de transmission sont donnés, respectivement, par :

$$r_{\nu\bar{\nu}} = |\rho_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \frac{V_{\nu}}{V_{\bar{\nu}}} |R_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (2.10a)$$

$$t_{\nu\bar{\nu}} = |\tau_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \frac{V_{\nu}}{V_{\bar{\nu}}} |T_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (2.10b)$$

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 soulignons 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 (un).

$$\sum_{\nu} (t_{\nu\bar{\nu}} + r_{\nu\bar{\nu}}) = 1 \quad (2.11)$$

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

2.8.b) Conductance phononique

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

$$\sigma(\Omega) = \sum_{\nu, \bar{\nu}} t_{\nu\bar{\nu}} \quad (2.12)$$

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 propageant 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 défauts.

2.9) Résultats des simulations

2.9.1) Résultats des spectres de transmission et de réflexion de phonons

Les courbes représentent les coefficients de transmission et de réflexion de la structure en présence d'un défaut.

Les simulations sont réalisées pour trois cas de valeurs de rapport de masse ($e=m_B/m_A$). Et pour chaque rapport de masse e , nous avons testé l'effet des constantes de force sur la propagation des ondes (on a retenu 3 autres cas, de l'adoucissement, en passant par l'homogénéité au durcissement des contraintes).

2.9.1.a) Cas d'une masse légère (le rapport des masses $e = 0.5$)

i) Adoucissement des constantes de force

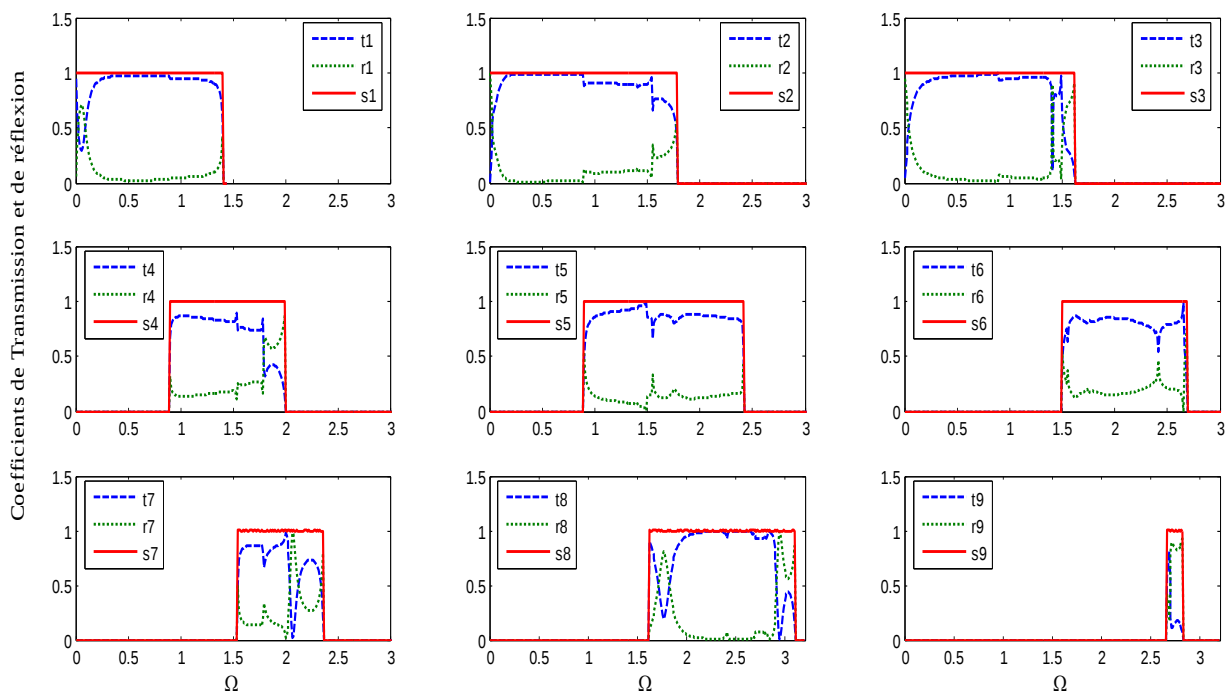


Figure 2. 5 : Transmission et réflexion d'ondes élastiques via un défaut de substitution dans le cas d'adoucissement des constantes de force, cas d'une masse légère.

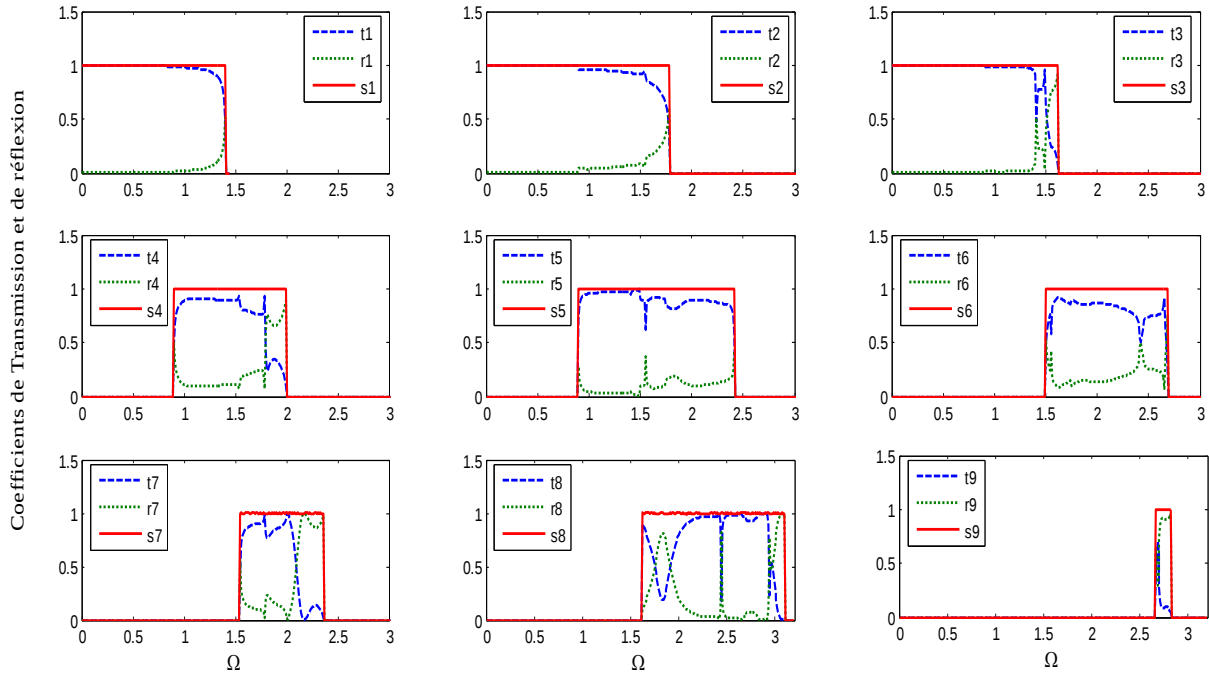
ii) *Homogénéité des constantes de force*

Figure 2.6 : Transmission et réflexion d'ondes élastiques via un défaut de substitution dans le cas d'homogénéité des constantes de force, cas d'une masse légère.

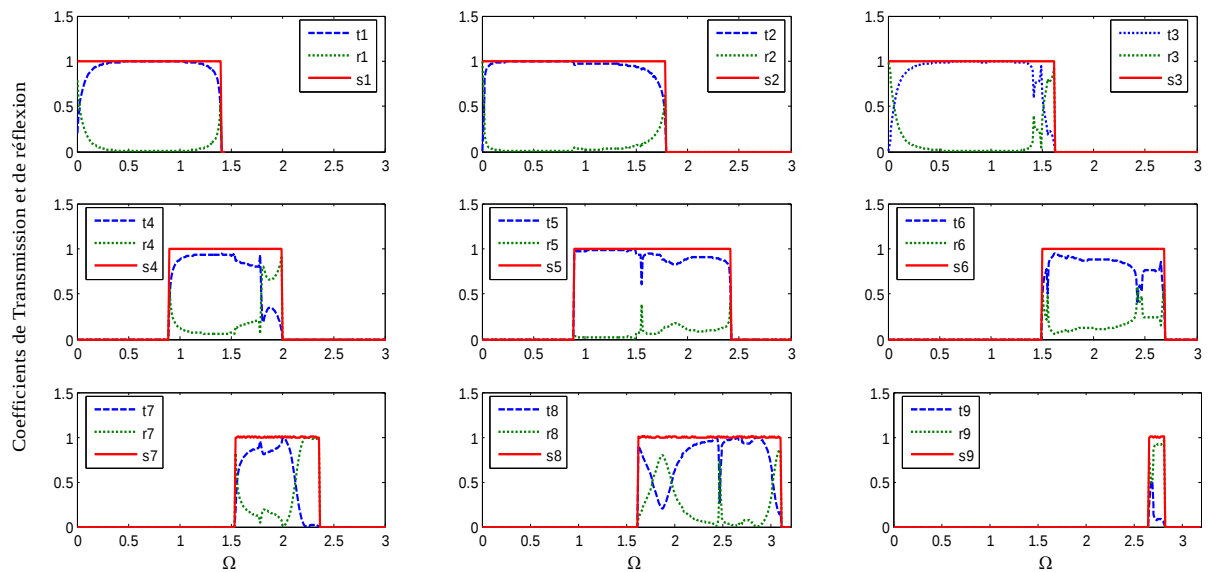
iii) *Durcissement des constantes de force*

Figure 2.7 : Transmission et réflexion d'ondes élastiques via un défaut de substitution dans le cas du durcissement des constantes de force, cas d'une masse légère.

2.9.1.b) Cas d'une masse homogène (les masses sont comparables $e \approx 1$)

i) Adoucissement des constantes de force

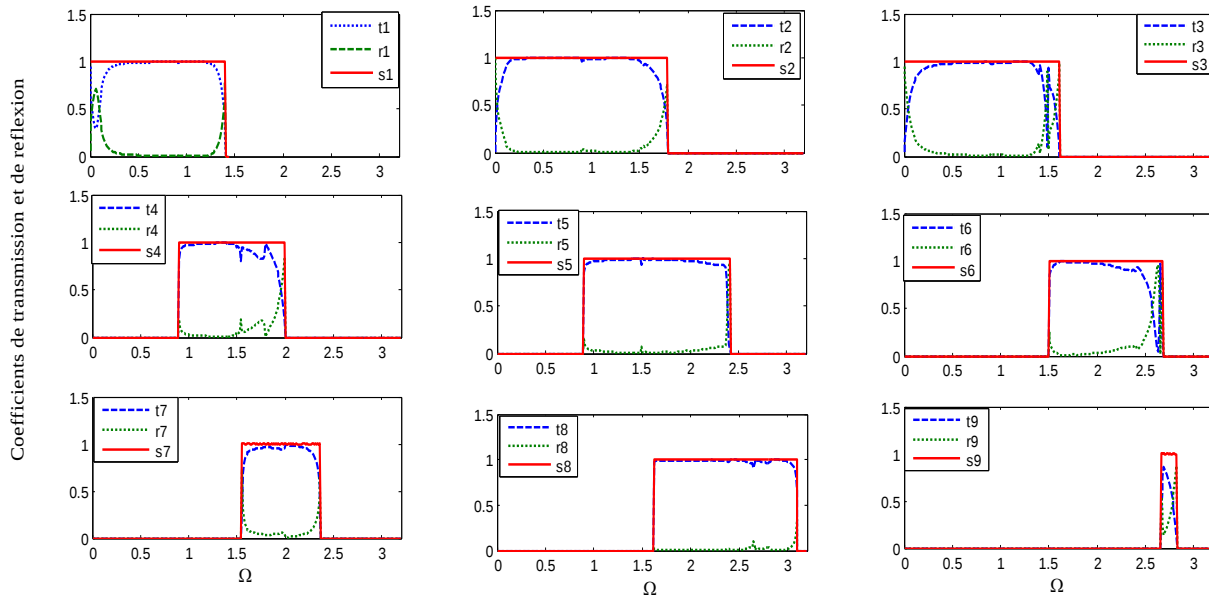


Figure 2.8 : Transmission et réflexion d'ondes élastiques via un défaut de substitution dans le cas d'adoucissement des constantes de force, cas d'une masse proche.

ii) Durcissement des constantes de force

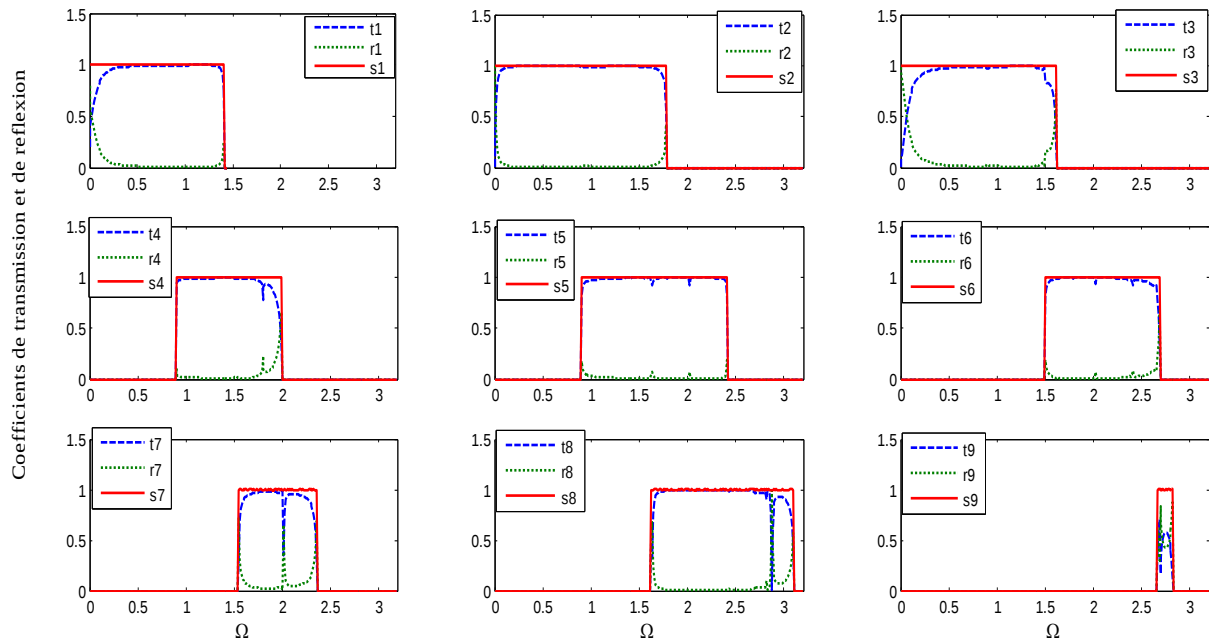


Figure 2.9 : Transmission et réflexion d'ondes élastiques via un défaut de substitution dans le cas de durcissement des constantes de force, cas d'une masse proche.

2.9.1.c) Cas d'une masse lourde (le rapport des masses $e=1.5$)

i) Adoucissement des constantes de force

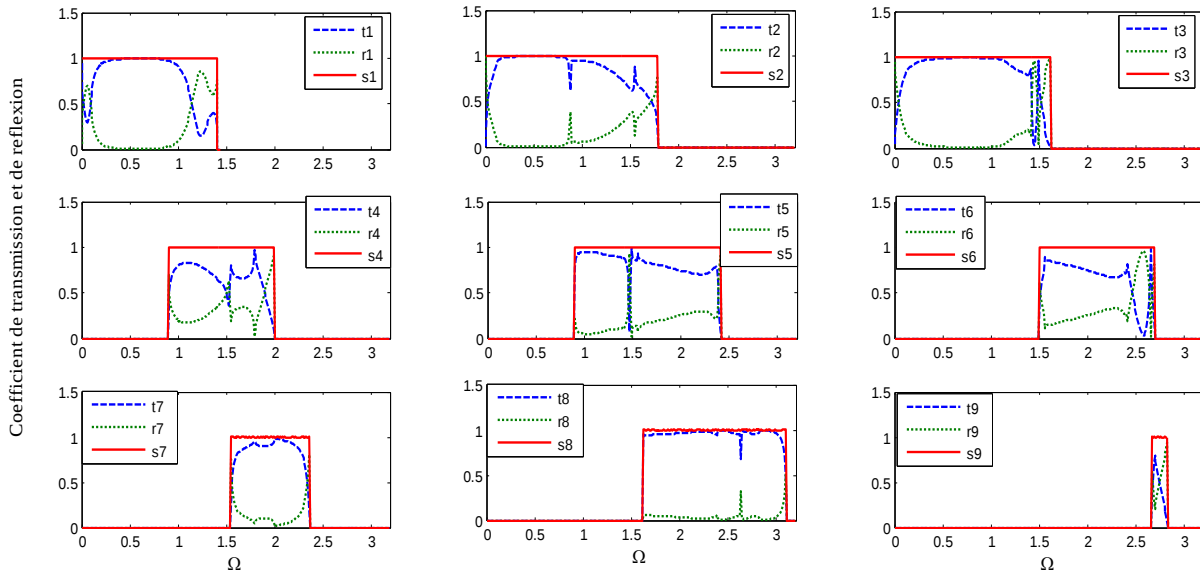


Figure 2.10 : Transmission et réflexion d'ondes élastiques via un défaut de substitution dans le cas d'adoucissement des contraintes, cas d'une masse lourde.

ii) Homogénéité des constantes de force

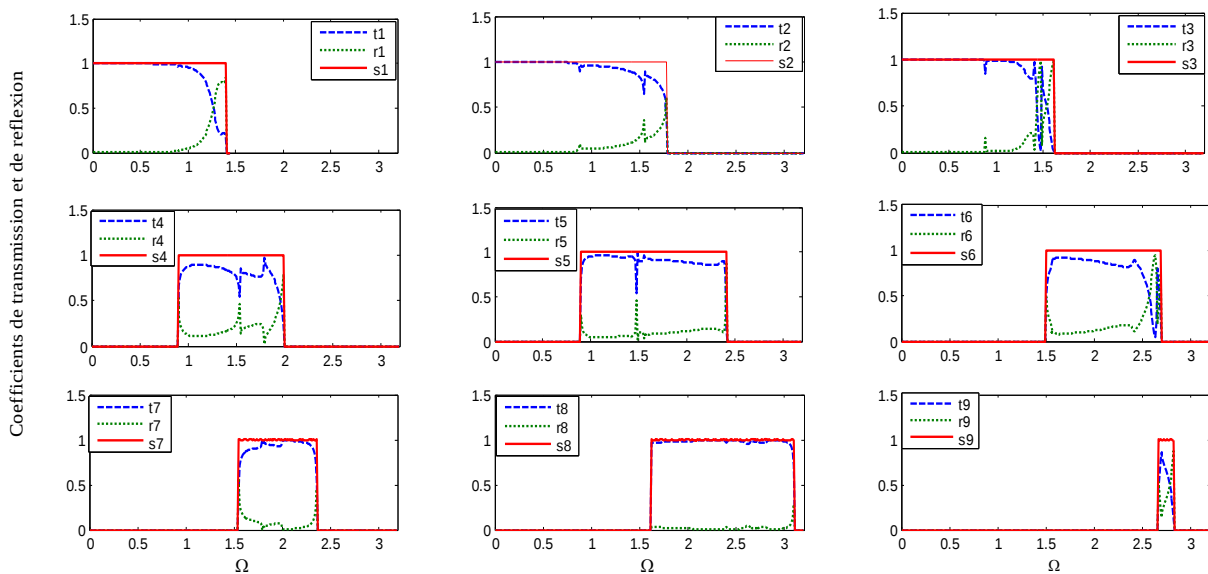


Figure 2.11 : Transmission et réflexion d'ondes élastiques via un défaut de substitution dans le cas d'homogénéité des constantes de force, cas d'une masse lourde.

iii) Durcissement des constantes de force

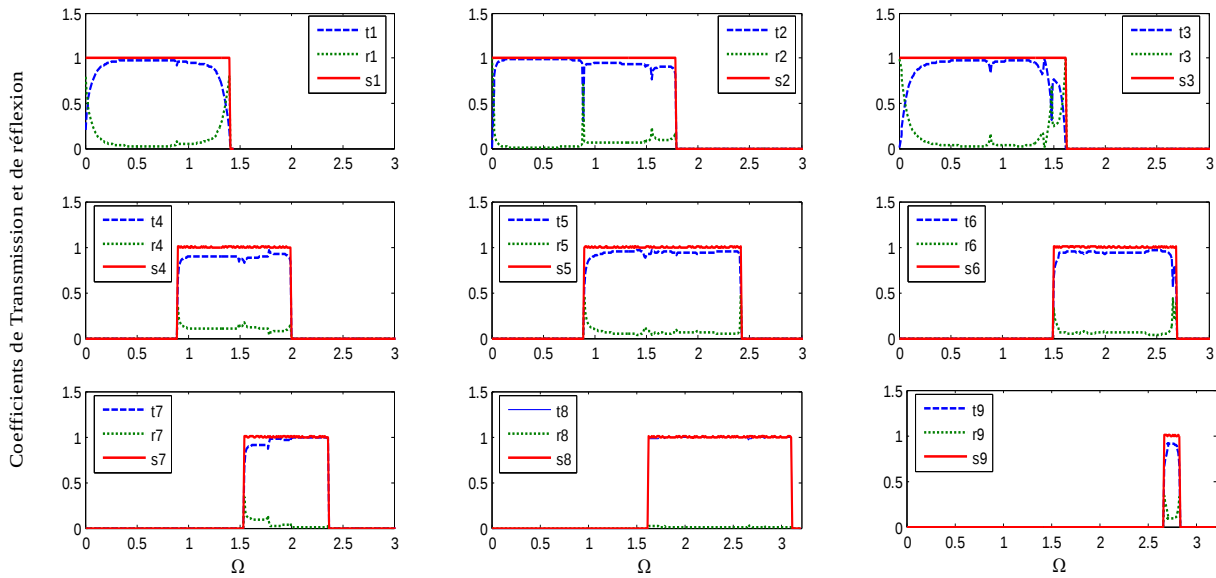


Figure 2.12 : Transmission et réflexion d'ondes élastiques via un défaut de substitution dans le cas du durcissement des constantes de force, cas d'une masse lourde.

2.9.2) Courbes des conductances phononiques

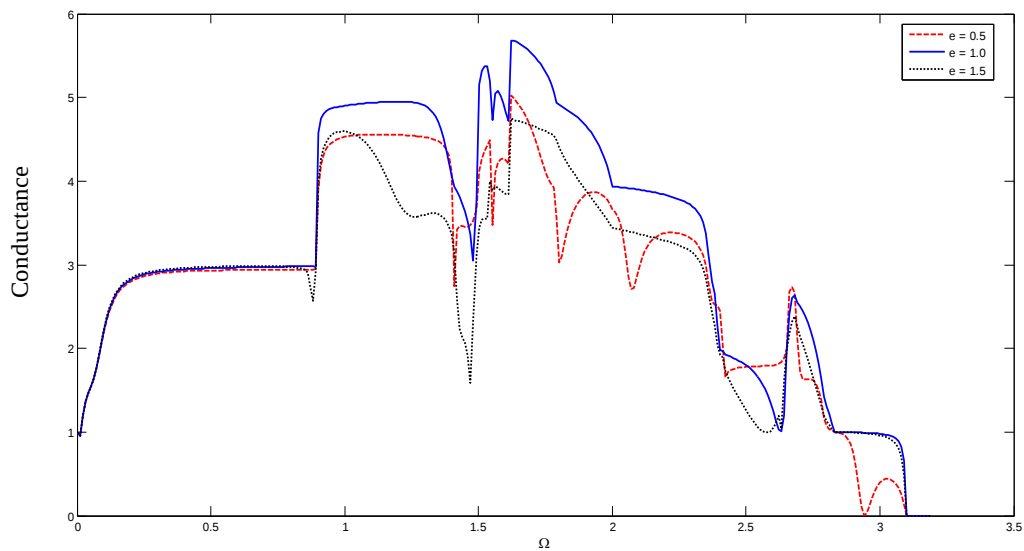


Figure 2.13 : Conductance phononique via un défaut de substitution, dans le cas de l'adoucissement des contraintes dans la zone perturbée.

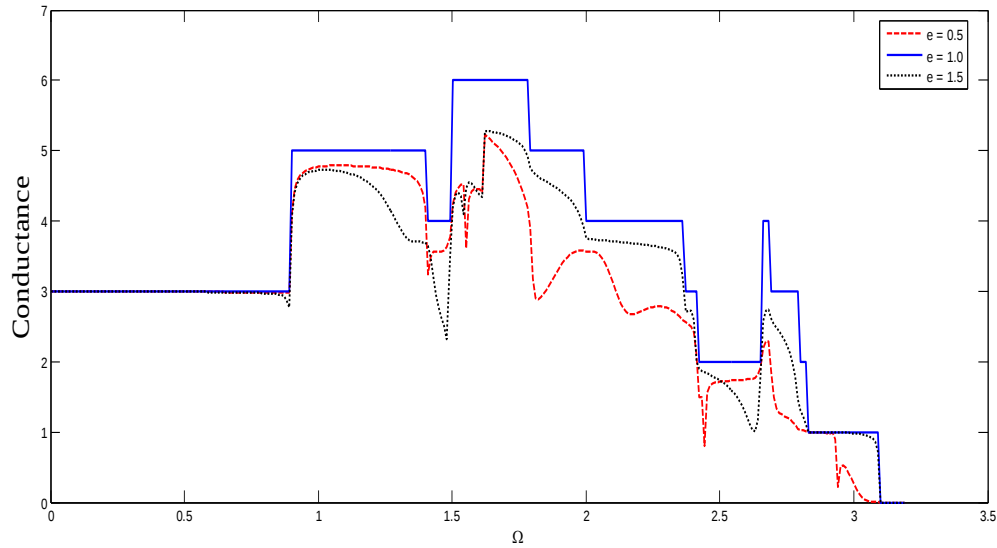


Figure 2.14 : Conductance phononique via un défaut de substitution, dans le cas de l'homogénéité des contraintes dans la zone perturbée.

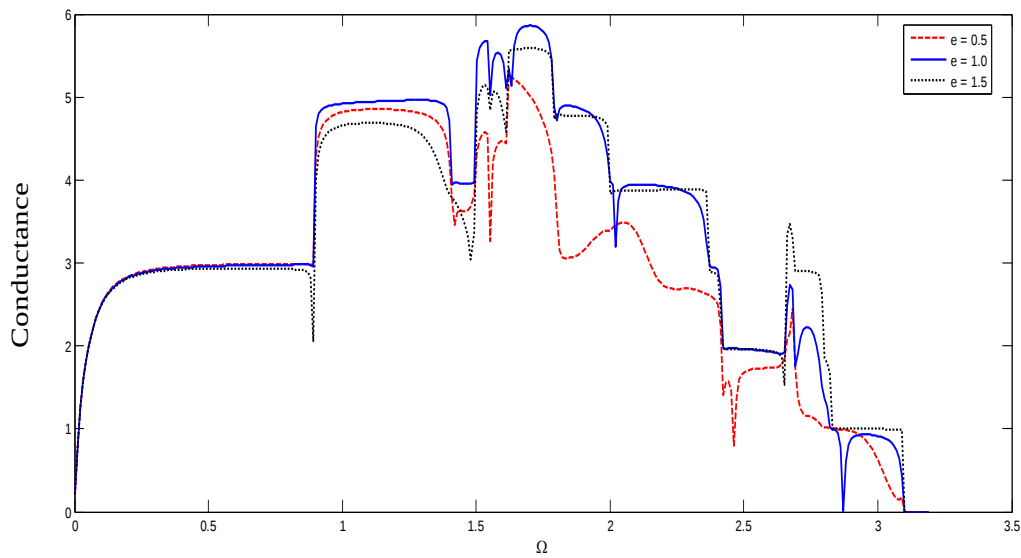


Figure 2.15 : Conductance phononique via un défaut de substitution, dans le cas de durcissement des contraintes dans la zone perturbée.

2.10) Discussion des résultats

Dans ce travail, nous avons calculé les valeurs numériques des coefficients de transmission et de réflexion et la transmittance des phonons, en fonction de la fréquence de diffusion, et ce par la simulation de la propagation des ondes élastiques par des atomes substitués dans un film mince. Ce dernier est composé de trois plans monoatomiques parallèles. Les atomes du film parfait sont du type A et ceux des sites substitués sont du type B.

Dans tous les cas examinés (pour la diffusion), les résultats numériques présentés sont obtenus pour un angle d'incidence $\phi_y = 0$.

i) Courbes des spectres de transmission et de réflexion

Pour relever l'effet de la masse des sites substitués sur la dynamique du film mince, nous avons examiné les trois possibilités de la masse m_B (à savoir : $m_B < m_A$, $m_B \approx m_A$ et $m_B > m_A$) ; appelées, respectivement, défaut de masse : légère, homogène et lourde.

Pour chaque défaut de masse considéré, nous avons aussi simulé l'impact des constantes de force sur les propriétés vibrationnelles du film.

En particulier, nous avons étudié trois possibilités des contraintes de force dans le domaine perturbé, en allant de l'adoucissement au durcissement en passant par l'homogénéité des constantes de force.

- L'adoucissement correspond au cas où les constantes d'interaction k_{ij} dans la zone perturbée sont prises comme étant inférieures à celles du film parfait.
- L'homogénéité est décrite par une situation où l'ensemble des paramètres de couplages sont comparables partout (zones parfaite et perturbée).
- Le durcissement correspond au cas où les k_{ij} de la zone défaut sont supérieures à celles de la zone parfaite.

Lors de l'étude de la dynamique du film mince parfait, composé de trois plans parallèles, nous avons noté l'existence de neuf modes de vibrations. Pour avoir la contribution individuelle de chaque mode, nous avons tracé les coefficients de transmission et de réflexion.

Les spectres de transmissions et les réflexions sont tracés sur les Figs. 5-12.

On constate que l'on retrouve bien les plages de fréquence des neuf modes propageants du film mince parfait, où s'effectuent la transmission et la réflexion, dans l'ensemble des cas considérés.

On remarque l'existence des pics dans certains modes. Ces pics observés sont liés à la présence d'états discrets aux positions de fréquences correspondantes. Celles qui sont asymétriques sont identifiées comme étant des résonances de type Fano, dues à une interaction entre les états localisés dans la région du défaut et les modes propageant du film parfait qui se trouvent de part et d'autre de la zone perturbée.

On constate que les spectres de transmission sont plus réguliers dans le cas des modes acoustiques, ceci s'explique par le fait que les longueurs d'ondes sont de l'ordre de grandeur du paramètre du réseau. La transmission s'annule aux limites des zones des hautes fréquences.

La transmission dans le cas des contraintes homogènes est uniquement sensible à la masse. En effet, la région du défaut retrouve l'environnement élastique du reste du film.

La transmission est plus favorable dans le cas d'un défaut de masse légère que dans le cas d'un défaut de masse lourde. Ce comportement de la transmission peut être dû à l'insuffisance de l'énergie des ondes élastiques à basse fréquences pour franchir le défaut dans le cas des grandes masses. Par contre, dans le cas des masses légères, les ondes élastiques au cours de leurs déplacements acquièrent une énergie supplémentaire en interagissant avec les modes localisés dans la zone défaut. De plus, ces 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.

Dans le cas des contraintes homogènes, on observe une diminution de la transmission avec le durcissement des constantes de force dans la zone perturbée, ce s'explique par la fréquence d'oscillation d'un oscillateur harmonique, qui varie inversement avec la masse.

En conclusion, les paramètres utilisés (défaut de masse et contraintes d'interaction) pour examiner le comportement des phonons dans le film mince en présence des atomes substitués B, nous renseignent sur la possibilité d'utiliser ces sites substitués pour augmenter (amplifier) ou bien diminuer (voir filtrer) certains phonons dans des fenêtres de fréquences bien déterminées.

Pour une masse homogène et contraintes homogènes, le défaut n'a pas d'influence sur les spectres vibrationnels pour les neuf modes de vibration et la transmission totale. Par conséquent, on a jugé inutile de tracer une telle courbe. Et on s'est contenté de le faire pour les transmittances.

On signale qu'expérimentalement, on n'a pas accès aux coefficients de transmission et de réflexion (notion purement théorique) par contre, la conductance phononique est une grandeur mesurable.

ii) Courbes des conductances photoniques

De la même façon que les spectres de transmission et réflexion des phonons, nous avons tracé la contribution des neuf modes de vibrations en même temps. Dans ce cas on parle de transmittance (ou conductance). Les résultats sont représentés sur les Figs (2.13), (2.14) et (2.15).

Le maximum de la totale transmission (conductance) est obtenu pour dans le cas où plusieurs modes de phonons se chevauchent. Elle s'annule à la limite de l'intervalle de fréquence dans tous les cas étudiés (masses : légère, homogène et lourde).

A très basses fréquences, on observe plus de transmittance dans le cas de l'adoucissement des contraintes (Fig.2.13), en comparaison, avec le durcissement des contraintes (Fig.2.15). Par contre, aux hautes fréquences de vibrations, les modes optiques produisent l'effet inverse, à cause de l'énergie du système.

Dans le cas de la masse homogène et contraintes homogènes, la conductance présente un certain nombre de paliers. Ces derniers donnent, pour chaque intervalle de fréquence de définition, le nombre de modes de phonons qui peuvent être excités.

Nous remarquons que les résonances de Fano se produisent aux mêmes fréquences observées dans le cas des spectres de transmission et de réflexion.

En fonction des constantes de force, la conductance présente des différences notables et dans les trois possibilités de défaut de masses considérées, en introduisant un décalage dans les spectres de conductances. Ce comportement complexe est intéressant, car on peut utiliser les masses des sites substitués et leurs interactions avec l'environnement pour fabriquer matériellement des amplificateurs ou bien des filtres pour phonons selon notre souhait.

Conclusion générale

Les couches atomiques minces d'une façon générale et les films minces semi-conducteurs à nanostructures, en particulier, représentent une nouvelle classe de matériaux qui rentrent dans plusieurs domaines industriels.

L'intérêt que porte le milieu scientifique à ces matériaux (qualifiés d'intelligents), remonte à la fin des années 80 et aux débuts des années 90. Ceci s'explique par plusieurs raisons, dont on cite :

- i) Pousser la miniaturisation des dispositifs atomiques quantiques le plus loin possible, afin de rendre les appareils légers, performants et facilement transportables.
- ii) Les propriétés physiques des nanomatériaux sont extrêmement intéressantes en allant vers l'infiniment petit. Souvent, elles s'écartent notablement des caractéristiques des mêmes matériaux à l'état massif. Ceci est dû en grande partie aux effets de surface dans les nano structures, qui ne peuvent pas être négligés.
- iii) Les films minces présentent, un intérêt particulier dans la résolution des problèmes d'actualité dans la mesure où elles permettent d'allier une économie de matière et d'encombrement à une grande souplesse d'emploi.

Avant toute utilisation de ces nanomatériaux par les nanotechnologies, il est indispensable de maîtriser toutes leurs propriétés physiques.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés vibratoires, en examinant la propagation des ondes élastiques dans des films de basses dimensions perturbés par l'existence d'une inhomogénéité de type substitution.

Nous avons relevé que la substitution conduit à des changements dans les propriétés physiques tels que : l'induction d'états localisés au voisinage du défaut, modifiant ainsi la transmittance phononique du film.

La simulation a permis de remonter aux propriétés vibrationnelles d'un film mince composé de trois plans atomiques parallèles, en se basant sur la méthode de raccordement. Cette dernière a donné accès aux caractéristiques extraordinaires du film mince perturbé par la présence de plusieurs sites atomiques substitués.

Dans le domaine de la chimie, ce genre de films minces est utilisé dans le revêtement des surfaces et devenir comme élément de la catalyse.

La substitution, de sites atomiques dans un film mince, permet de contrôler la conductance du film, en fabriquant matériellement des amplificateurs ou des filtres pour phonons, en jouant sur la masse et les constantes de force.

Références bibliographiques

- [1] B.feltz, F.thoreau, Nanotechnologies « au-delà des fantasmes », La revue nouvelle, 66ème année ,n°11,(2011).
- [2] S. Hariech, Mémoire Master, université Mantouri Constantine (2009).
- [3] N. Rahmani, S. Belgacem, Mémoire Master, université Djilali Bounaama Khmis Meliana (2017)
- [4] G. Belkacemi, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2015).
- [5] H. Isselé, Thèse de doctorat, université de Grenoble (2016).
- [6] M. Tinouche, Mémoire Magister, université Ferhat Abbas – Sétif (2010).
- [7] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin. Physique des solides. EDP sciences (2002).
- [8] J. A. Thomas, R. M. Iutzi, J. H. Mc Gaughey, Phys. Rev. B 79, 62 (2011).
- [9] C. Kittel, Introduction à la Physique de l'Etat Condensé, Dunod édition (1995).
- [10] R. Landauer, Phys. Scr. T42, 110 (1992).
- [11] A. Felly, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlouvet and A. Khater, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997).
- [12] R. Chadli. Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2012).
- [13] A. Chikh, Mémoire de Master, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2016).
- [14] J. Szeftel and A.khater, Phys. Rev. C : Solid State Phys.20, 4725 (1987).
- [15] O. Balosso, Thèse de doctorat, Université de Toulouse, France (2014).
- [16] R. Laundauer, J. Phys. Condensed Matter, 1, 8099 (1989).
- [17] I. Dan, Note de cour LP201 Ondes mécaniques et lumineuses, Chapitre 5 UPMC(2010/2011).
- [18] D. C. Giancoli, Physique générale : ondes, optique et physique moderne, De Boeck (1993).
- [19] M. Belhadi, R. Chadli, A. Khater and M. Abou Ghantous, Eur. Phys. J. Phys 37, 25 (2007).
- [20] H. Guérault, Thèse de doctorat, Université du Maine, France (2000).
- [21] R. W. Siegel, Appl. Phys. 11, 173 (1994).
- [22] R. W. Siegel, Nanostruct. Mater, 3. 1 (1993).
- [23] R. E. Allen, G. P. Alidrege, et F. W. De Wette, Phys. Rev. 4, 1648 (1971).
- [24] R. A. Allen, Surf. Sci. 76, 91 (1978).
- [25] G. Green, J. für die reine und angewandte Mathematik n° 39 (1850).
- [26] E. J. Mele and M. V. Pykhtin, Phys. Rev. Lett. 75, 3878 (1995).
- [27] . E. Feuchtwang, Pys. Rev, 155, 731 (1967).
- [28] B. Bourahla, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri (2007).
- [29] O. Nafa. Mémoire de Magister, Université M. Mammeri, (2010).