

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOULOUD MAMMARI DE TIZI-OUZOU
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE CHIMIE



Domaine : **Sciences de la Matière**

Filière : **Chimie**

Spécialité : **Chimie-Physique**

MEMOIRE DE MASTER

Présenté par : **KHELF Aghilas**

Intitulé du sujet :

**Spectres vibrationnels associés à une substitution atomique
dans un assemblage atomique quasi-linéaire**

Soutenu, le Juillet 2021

Devant le jury composé de :

Mr CHEKNOUN Salem	MC/B	UMMTO	President
Mr BOURAHLA Boualem	Professeur	UMMTO	Encadreur
Mr SAIT Smail	MC/B	UMMTO	Examineur

Remerciements

Tout d'abord j'exprime mes remerciements à Dieu le clément qui m'a donné la force et le courage d'aller au bout de mon objectif. J'exprime ma profonde gratitude et mes vifs remerciements à Mr. Boualem BOURAHLA, mon promoteur pour ses conseils, ses orientations et surtout son temps ainsi que la confiance qu'il m'a témoigné, merci pour tous vos efforts.

*A mes parents (mère et père) et toute ma famille (frères et sœurs)
Je vous remercie pour votre soutien indéfectible.*

A Mr SAIT Smaïl, Mr SELLAH Syphax Mr MOULOUDJ Adberazak, Mme DJEBALA Lilia et Mme RADJA Thanina, je vous remercie pour les conseils et la précieuse aide pour mener à terme mon travail.

A Mr CHEKNOUN Salem, Maître de Conférences/classe B à l'UMMTO, je lui adresse mes plus vifs remerciements pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury.

A Mr SAIT Smaïl, Maître de Conférences/classe B à l'UMMTO, je lui adresse ma reconnaissance pour avoir accepté d'examiner mon travail de Master.

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 leurs encouragements*

Que dieu les garde et les protège

A mes sœurs Malika, Lynda, Adjia (Samira), Dyhia, Cilia, Liza et Yasmine

A mes frères Mohamad, Khelifa, Ramadan, Mouloud, Jugurtha et Omar

A mes chers amis Khaled, Amirouche, Moussa, Khaled, Abidi, Saïd, Djidji, Nina, Fawzi, Syphax, Abderazak, et les autres.

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

KHELF Aghilas

Table de matières

Introduction générale	3
Chapitre 1 : Dynamique des assemblages monoatomiques quasi-linéaires	6
Introduction	7
I. Dynamique vibrationnelle d'un assemblage atomique parfaite	7
II. Description de la structure 2D étudiée	7
III. Equations du mouvement et matrice dynamique	8
III.1. Equation du mouvement	8
III.1.1. Le site ($0\bar{1}$)	9
III.1.1.a) Projection suivant l'axe (Ox)	9
III.1.1.b) projection suivant l'axe (Oy)	10
III.2. Matrice dynamique	10
IV. Courbes de dispersion	11
V. Discussion des courbes	13
VI. Vitesses de groupe	14
Chapitre 2 : Effet d'une substitution atomique sur les propriétés vibrationnelles d'un assemblage quasi-linéaire	16
Introduction	17
I. Défauts de substitution dans les assemblages atomiques quasi-linéaires	17
I.1. Description du système modèle	17
I.2. Equations du mouvement et matrice dynamique u système substitué	18
I.2.a) Equation du mouvement	18
I.2.b) Matrice dynamique	18
II. Méthode de raccordement	19
II.1. Principe de la méthode	19
II.2. Matrice de raccordement	20
III. Calcul des grandeurs physiques	21
III.1. Coefficients de transmission et de réflexion	22
III.2. Conductance phononique	23
IV. Résultats des simulations	23
IV.1. Résultats des spectres de transmission et réflexion	23
IV.2. Résultats des conductances	29
VI. Discussion des résultats	31
Conclusion générale	34
Références bibliographiques	35

Introduction générale

Le développement technologique a vu l'émergence des matériaux miniaturisés polyfonctionnels dans tous les domaines [1-2]. Ces nouveaux matériaux sont obtenus par la réduction des dimensions des matériaux conventionnels [3]. Par conséquent, des effets dits quantiques peuvent commencer à dominer le comportement à l'échelle nanométrique et en modifier ainsi les propriétés physiques, telles que les propriétés électriques [4], magnétiques [5], optiques et autres [6].

A l'échelle planétaire, la course est lancée, afin de maîtriser leurs utilisations industrielles. Ce qui a donné naissance aux nanotechnologies.

L'élaboration, la caractérisation et l'analyse des matériaux de basse dimension se font par une gamme importante de techniques. Elles sont réparties : (i) méthodes physiques, telles que l'évaporation sous vide, ablation laser, MBE, pulvérisation cathodique et (ii) méthodes chimiques, comme spray pyrolyse, CVD, sol-gel.

La différence entre les matériaux à 3D et ceux miniaturisés (à basse dimension) est liée, principalement, au fait que dans l'état massif ou tridimensionnel on néglige généralement avec raison le rôle des limites dans les propriétés, tandis qu'aux dimensions réduites ce sont au contraire les effets de confinement liés aux surfaces limites qui sont prépondérants [7].

De plus, l'impact de l'épaisseur est notable dans les matériaux 1D et 2D. En revanche, lorsque l'épaisseur dépasse un certain seuil l'effet d'épaisseur deviendra minime et le matériau retrouvera les propriétés du bulk bien connues des matériaux massifs classiques.

Aujourd'hui, les structures de basses dimensionnalités trouvent des applications dans plusieurs domaines technologiques nous citons entre autre :

En magnétisme, ces structures sont utilisées comme éléments de stockage d'information (disque dur, mémoire vive), capteurs, dispositifs de sécurité, ...

En chimie, on les emploie comme barrière de diffusion et pour lutter contre la corrosion, on les insère comme capteurs à gaz, comme éléments de revêtements catalytiques, couches protectrices, etc.

En électronique, la miniaturisation des dispositifs est à la base des nano-résistances, capteurs piézoélectriques, transistors diodes, circuits intégrés dans les micros et téléphones portables.

En médecine, elles sont incorporées dans les capteurs neurologiques, revêtements d'implants.

En optique, elles sont employées dans les revêtements des surfaces anti-réflexion pour lentilles, cellules photovoltaïques, ainsi les revêtements pour les miroirs.

En mécanique, les structures de dimension réduite permettent de réduire la friction et d'améliorer adhésion des pièces et d'augmenter la résistance mécanique et la dureté.

Il est bien établi que l'étude des propriétés physico-chimiques des matériaux, quel que soit l'échelle de longueur, dépend du comportement des électrons et de la dynamique des noyaux qui les composent [8]. Dans le cadre de l'approximation Born-Oppenheimer, il est possible de séparer le mouvement des noyaux de celui des électrons, donc les propriétés, qui en résultent, peuvent être découplées avec une bonne approximation, d'une part, celles liées aux électrons en particulier aux mouvements des noyaux autour de leurs positions d'équilibre.

Le mouvement des noyaux autour de leurs positions d'équilibre définit ce qu'on appelle la dynamique du réseau [9]. Il est à noter que la dynamique du réseau (dite aussi vibrations atomiques) est à l'origine de la plupart des propriétés physiques d'un matériau donné [10]. Elle modifie fortement la réactivité d'un matériau, sa chaleur spécifique, ses coefficients de dilatation thermique, sa fusion, etc.

Les vibrations jouent un rôle capital dans la réponse d'un matériau à tout type d'excitation, comme la radiation des rayons X, la lumière visible, les neutrons, etc.

Nous signalons aussi que les vibrations atomiques participent à la diffusion et au transport de l'énergie dans un solide (conductivité thermique des isolants, propagation des ondes acoustiques). Les propriétés vibratoires permettent 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 [11-12].

Par exemple, 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.

Dans ce travail de master, nous nous intéressons à la dynamique des atomes d'une structure monoatomique de type A, composée de trois chaînes infinies et parallèles, contenant une inhomogénéité atomique définie comme étant une substitution par un autre type d'atome, noté B. Notre but est de déterminer la dynamique de la structure et de calculer les fréquences et les modes propres de vibrations, en traçant les relations de dispersion et les vitesses de groupe en fonction des grandeurs caractérisant les interactions de chaque atome avec son environnement. Notre étude est menée dans le cadre de l'approximation harmonique et des forces centrales.

Nous relevons principalement les empreintes caractéristiques des sites substitués dans les spectres de transmission et de réflexion. La conductivité de l'assemblage via les sites substitués est également déterminée et commentée, elle due à la contribution des modes de phonons simultanément.

Le manuscrit du mémoire est structuré comme suit :

Dans le premier chapitre nous avons abordé la dynamique vibrationnelle d'un assemblage monoatomique parfait, composé de trois chaînes infinies et parallèles.

Dans le second chapitre, nous avons examiné la dynamique vibrationnelle d'un assemblage monoatomique contenant des sites atomiques substitués.

Nous terminé le manuscrit par une conclusion générale.

Chapitre 1

*Dynamique des assemblages
monoatomiques quasi-linéaires*

Introduction

L'objectif principal de ce travail de master est de résoudre un problème de diffusion d'ondes vibratoires dans un assemblage atomique quasi-linéaire, comportant un défaut de substitution. Pour atteindre l'objectif, nous commençons par analyser le comportement des ondes élastiques dans le réseau parfait sans la substitution atomique.

Par la suite, nous introduisons l'homogénéité et nous construisons la matrice dynamique, puis par application de la méthode de raccordement [13-15], nous déterminons les spectres des vibrations générées par le défaut atomique localisé. Le phénomène sera étudié par modélisation et simulation numérique.

I. Dynamique vibrationnelle d'un assemblage atomique parfait

Pour étudier la vibration du réseau et déterminer la dynamique du système atomique sous étude dans ce travail, il est impératif de connaître sa matrice dynamique. Pour la construire, 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 projetées (écrites suivant les deux axes (Ox et Oy)).
- Au final, on regroupe l'ensemble des équations de mouvement sous forme d'une matrice et cette dernière est appelée « matrice dynamique ».

II. Description de structure model 2D étudiée

Le système étudié est un assemblage de trois chaînes atomiques infinies et parallèles (figure 1). Au niveau de chaque nœud, on place un atome de masse m . ce dernier est relié à ses voisins par des constantes de couplage k_1 et k_2 , qui sont respectivement interactions entre 1^{er} et 2^{ème} voisins. Les sites atomiques peuvent se mouvoir dans les deux directions cartésiennes Ox et Oy .

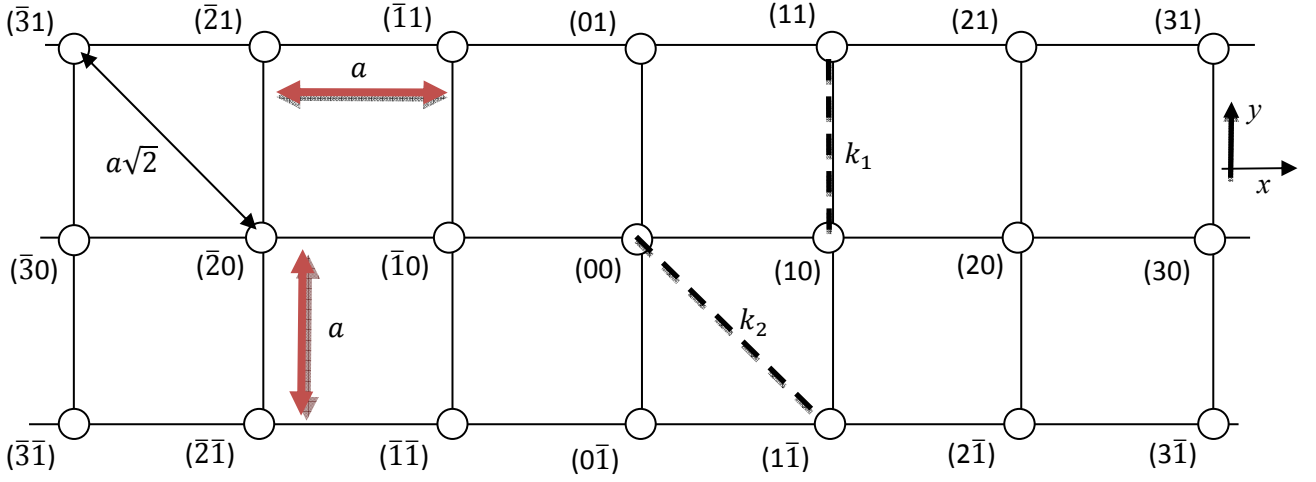


Figure 1. Représentation géométrique d'un assemblage monoatomique quasi-1D, constitué de trois chaînes parallèles. L'ensemble forme un guide d'ondes parfait.

Pour avoir la dynamique du système, il est impératif d'écrire les équations du mouvement des atomes repérés en $\{(0, \bar{1}); (0, 0) \text{ et } (0, 1)\}$ qui forment la cellule unitaire.

III. Equations du mouvement et matrice dynamique

III.1. Equations du mouvement

Le mouvement des atomes dans un système atomique quelconque est décrit par la deuxième loi de Newton : $\sum \vec{F} = m \cdot \vec{a}$ [16-17],

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

ω désigne la fréquence d'oscillation, m est la masse de l'atome, a est l'accélération du mouvement, et \vec{F} constitue la somme des forces extérieures.

L'accélération s'exprime par : $\vec{a} = \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2}$, (s'exprime par la dérivée des déplacements atomiques).

La relation caractéristique du mouvement harmonique s'écrit par : $\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = -\omega^2 \vec{u}$,

D'autre part, on sait que : $\vec{u} = \vec{u}_0 e^{-j\omega t}$,

Donc

$$-m\omega^2 u(l, l') = \sum_{l \neq l'} \sum_{\beta} k(l, l') \frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} [u_{\beta}(l') - u_{\beta}(l)] \quad (1)$$

k est la constante des forces, \vec{u} : est le vecteur décrit par l'amplitude de vibration ;

r est la composante des atomes selon la direction α de vecteur $\vec{r}(l, l')$ joignant les positions d'équilibre des atomes l et l' ; α et β : les indices qui désignent les directions cartésiennes ;

$k(l, l')$: la constante de force qui couple entre deux sites adjacents.

- L'équation précédente (1) doit être réécrite pour tous les N sites atomes qui composent la cellule unitaire, et dans les deux (02) directions cartésiennes. Donc, on obtient un système de deux N ($2N$) équations pour les N atomes de la cellule unitaire.

Dans notre travail on dénombre $N = 3$ atomes dans la cellule unitaire et deux (02) degrés de liberté par site. Donc, on aura : 03 sites \times 2 degrés de liberté (ddl) par site. Alors on aura six (06) équations à écrire. Pour avoir les équations du mouvement, nous devons considérer les trois sites de la cellule unitaire avec projection suivant les directions Ox et Oy .

III.1.1. Le site ($0\bar{1}$)

III.1.1.a) Projection suivant l'axe Ox

$$-m\omega^2 u_x(0\bar{1}) = k_1[u_x(1\bar{1}) - u_x(0\bar{1})] + k_2[u_x(\bar{1}\bar{1}) - u_x(0\bar{1})] + \frac{k_2}{2}[u_x(10) - u_x(0\bar{1})] \\ + \frac{k_2}{2}[u_x(\bar{1}0) - u_x(0\bar{1})] + \frac{k_2}{2}[u_y(10) - u_y(0\bar{1})] - \frac{k_2}{2}[u_y(\bar{1}0) - u_y(0\bar{1})]$$

On peut la simplifier comme suit

$$[m\omega^2 - 2k_1 - k_2]u_x(0\bar{1}) + k_1 u_x(1\bar{1}) + k_1 u_x(\bar{1}\bar{1}) + \frac{k_2}{2} u_x(10) + \frac{k_2}{2} u_x(\bar{1}0) + \frac{k_2}{2} u_y(10) - \\ \frac{k_2}{2} u_y(\bar{1}0) = 0 \quad (2)$$

Les relations entre les déplacements atomiques sont les suivantes :

$$u(1\bar{1}) = zu(0\bar{1}) \\ u(\bar{1}\bar{1}) = z^{-1}u(0\bar{1}) \\ u(10) = zu(00) \\ u(\bar{1}0) = z^{-1}u(00) \\ u(11) = zu(01) \\ u(\bar{1}1) = z^{-1}u(01)$$

Avec le rabattement, l'équation (02) prendra la forme suivante :

$$[m\omega^2 - 2k_1 - k_2 + k_1(z + z^{-1})]u_x(0\bar{1}) + \left[\frac{k_2}{2}(z + z^{-1})\right]u_x(00) - \left[\frac{k_2}{2}(z - z^{-1})\right]u_y(00) = 0 \quad (3)$$

De façon similaire, on aboutit à (suivant la direction Oy)

III.1.1.b) Suivant la direction Oy

$$-m\omega^2 u_y(0\bar{1}) = k_1[u_y(00) - u_y(0\bar{1})] + \frac{k_2}{2}[u_y(10) - u_y(0\bar{1})] + \frac{k_2}{2}[u_y(\bar{1}0) - u_y(0\bar{1})] \\ + \frac{k_2}{2}[u_x(10) - u_x(0\bar{1})] - \frac{k_2}{2}[u_x(\bar{1}0) - u_x(0\bar{1})]$$

On peut la simplifier comme suit :

$$[m\omega^2 - k_1 - k_2]u_y(0\bar{1}) + k_1 u_y(00) + \frac{k_2}{2}u_y(10) + \frac{k_2}{2}u_y(\bar{1}0) + \frac{k_2}{2}u_x(10) - \frac{k_2}{2}u_x(\bar{1}0) = 0 \quad (4)$$

En tenant compte de la relation exprimant le lien entre les différents déplacements, l'équation (04) prendra la forme qui suit

$$[m\omega^2 - k_1 - k_2]u_y(0\bar{1}) + \left[k_1 + \frac{k_2}{2}(z + z^{-1})\right]u_y(00) + \left[\frac{k_2}{2}(z - z^{-1})\right]u_x(00) = 0 \quad (5)$$

Le même travail doit être fait pour les deux (02) autres sites atomiques.

Remarque

La base vectorielle du système est formée des déplacements atomiques des sites $\begin{pmatrix} 0\bar{1} \\ 00 \\ 01 \end{pmatrix}$.

(Pour chaque site, on écrit deux déplacements relatifs aux directions cartésiennes $u_x(0\bar{1}); u_y(0\bar{1}); u_x(00); u_y(00); u_x(01); u_y(01)$).

III.2. Matrice dynamique

Pour obtenir la dynamique du système parfait, il suffit d'écrire la matrice dynamique de la cellule unitaire composée de trois sites atomiques identiques $[(0\bar{1}), (00), (01)]$.

Puisque, il y a trois sites dans la cellule unitaire et deux ddl par sites, on obtient alors une matrice carré, appelée « matrice dynamique (Md)» de taille (6×6) .

Ses éléments non nuls sont les suivants :

$$\begin{aligned}
\text{Md}(1,1) &= m\omega^2 - 2k_1 - k_2 + k_1(z + z^{-1}) ; \text{Md}(1,3) = \frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; \\
\text{Md}(1,4) &= \frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; \text{Md}(2,2) = m\omega^2 - k_1 - k_2 ; \\
\text{Md}(2,3) &= \frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; \text{Md}(2,4) = k_1 + \frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; \\
\text{Md}(3,1) &= \frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; \text{Md}(3,2) = -\frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; \\
\text{Md}(3,3) &= m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 + k_1(z + z^{-1}) ; \text{Md}(3,5) = \frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; \\
\text{Md}(3,6) &= \frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; \text{Md}(4,1) = -\frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; \\
\text{Md}(4,2) &= k_1 + \frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; \text{Md}(4,4) = m\omega^2 - 2k_1 - 2k_2 ; \\
\text{Md}(4,5) &= \frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; \text{Md}(4,6) = k_1 + \frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; \\
\text{Md}(5,3) &= \frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; \text{Md}(5,4) = -\frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; \\
\text{Md}(5,5) &= m\omega^2 - 2k_1 - k_2 + k_1(z + z^{-1}) ; \text{Md}(6,3) = -\frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; \\
\text{Md}(6,4) &= k_1 + \frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; \text{Md}(6,6) = m\omega^2 - k_1 - k_2.
\end{aligned}$$

Les autres éléments sont des zéros.

IV. Courbes de dispersion

Pour avoir le mouvement vibratoire du système étudié, on doit diagonaliser la matrice dynamique, [18], par la relation suivante :

$$[\omega^2 I - Md(\vec{q}, \gamma)] = 0 \quad (6)$$

I : matrice identité de même rang que la matrice dynamique ;

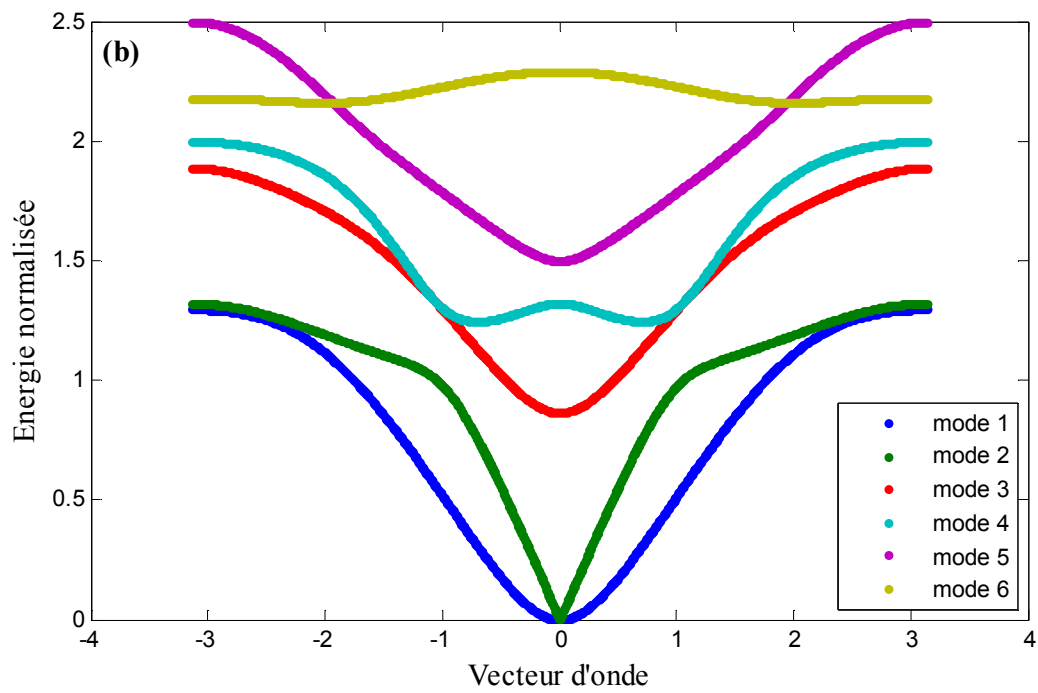
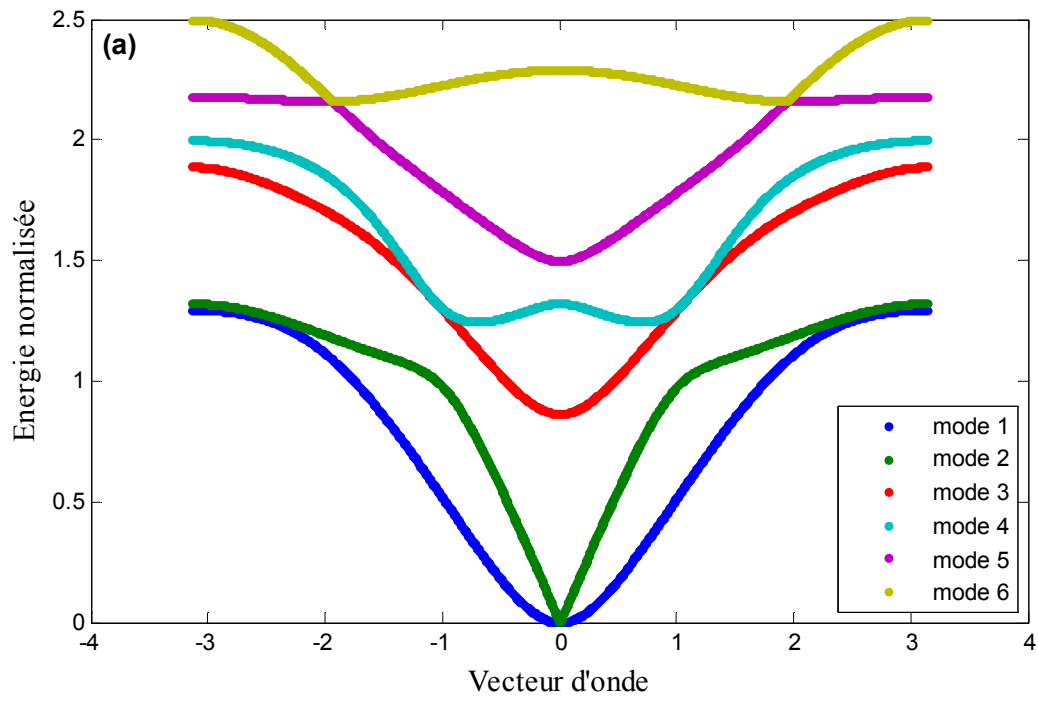
$Md(\vec{q}, \gamma)$: matrice dynamique de taille (6×6) ;

\vec{q} : le vecteur d'onde dépendant des constantes des forces entre les différents atomes ;

$\gamma = k_2/k_1$: le rapport entre les deux constantes de forces du système parfait,

(avec k_1 et k_2 : la constante de force de 1^{er} et 2^{ème} atome voisin d'un réseau parfait).

Nous avons simulé la dispersion des ondes élastiques dans le guide d'ondes parfait, constitué de triple chaînes parallèles pour une valeur de $\gamma = 0.75$. Les résultats obtenus sont plotés sur la figure 2 (a, b et c) ci-après.



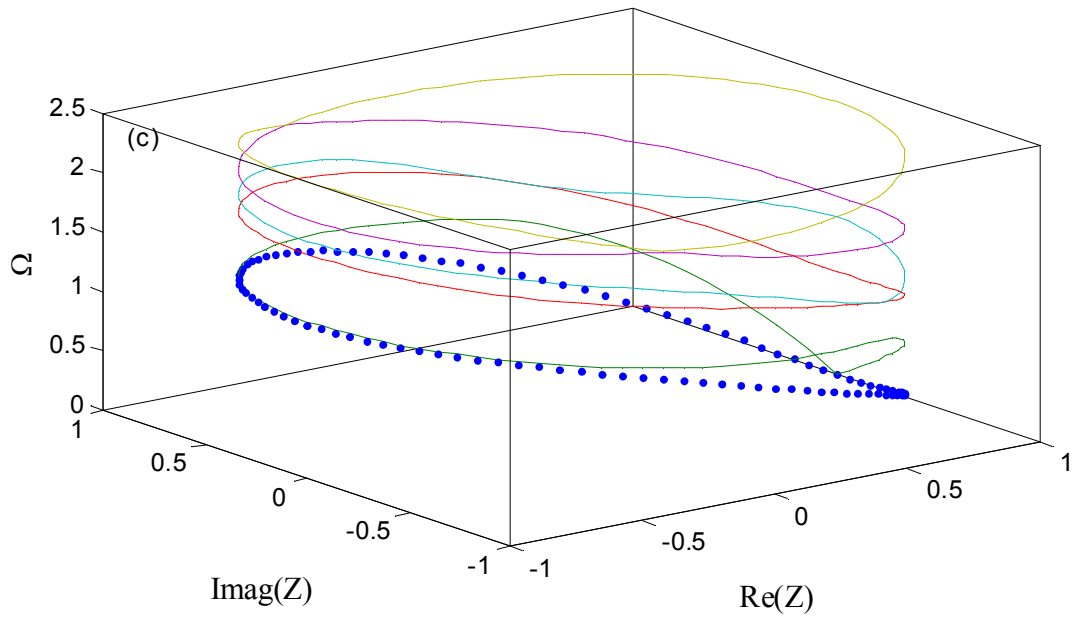


Figure 2. Courbes de dispersion d'ondes élastique dans le guide d'ondes parfait.
 (a) Les courbes sans le tri, (b) Les courbes avec le tri, (c) Dispersion à 3D.

V. Discussion des courbes

On signale que les courbes sont symétriques par rapport à l'origine.

On dénombre six (06) branches différentes correspondant aux six modes propres de vibration. Elles correspondent aux six modes de propagation.

Parmi ces modes, il y a deux modes acoustiques les quatre autres sont optiques.

Les modes sont classés de bas en haut d'une façon arbitraire, certains modes sont symétriques et d'autres sont antisymétriques. Les vecteurs propres obtenus par la résolution du système aux valeurs propres permettent de distinguer l'un pour l'autre.

Les courbes de dispersion peuvent être assimilées au spectre des énergies possibles pour les phonons en fonction de leur impulsion.

Le spectre des énergies représente les impulsions que le réseau est susceptible de fournir ou d'absorber lorsqu'il interagit avec un autre système.

Chaque mode se propage dans son propre intervalle de fréquence. Elles sont résumées dans le tableau suivant :

Modes	Intervalle de propagation
Mode 1	[0.00 ; 1.29]
Mode 2	[0.00 ; 1.32]
Mode 3	[0.87 ; 1.89]
Mode 4	[1.25 ; 2.00]
Mode 5	[1.50 ; 2.50]
Mode 6	[2.18 ; 2.29]

TAB I : Représentation d'intervalle de vibration des modes de la figure 1b.

Les modes de vibration sont générés d'une façon aléatoire. Pour les classer bien il est impératif de trier les valeurs des facteurs de phase (comparer entre la fig.1a et fig.1b).

Remarque

La forme des modes n'est pas linéaire, et le calcul des pentes des tangentes à ces courbes donne accès aux vitesses de groupe.

VI. Les vitesses de groupe

On peut associer, à chaque mode de vibration, une vitesse de groupe, qui est définie comme étant la vitesse du paquet d'ondes avec laquelle se déplace dans le milieu [19]. Ces vitesses sont exprimées par la formule suivante

$$v_g = \frac{\partial z}{\partial \varphi_x} = \frac{\partial \Omega}{\partial q} \quad \text{Soit } v_g = \text{grad}[\Omega(\vec{q})] \quad (7)$$

$$\text{Avec } z = e^{jkax} = e^{j\varphi_x}$$

Ω : la fréquence de réseau ; v_g : vitesse de groupe, z : le facteur de phase reliant deux sites voisins.

Les éléments non nuls de la matrice dérivée de la matrice dynamique du système parfait sont donnés ci-après :

$$v_g(1; 1) = jk_1(z - z^{-1}) ; v_g(1; 3) = j\frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; v_g(1; 4) = j\frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ;$$

$$v_g(2; 3) = j\frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; v_g(2; 4) = j\frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ;$$

$$v_g(3; 1) = j\frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; v_g(3; 2) = -j\frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ; v_g(3; 3) = jk_1(z - z^{-1}) ;$$

$$v_g(3; 5) = j\frac{k_2}{2}(z - z^{-1}) ; v_g(3; 6) = j\frac{k_2}{2}(z + z^{-1}) ;$$

$$v_g(4; 1) = -j \frac{k_2}{2} (z + z^{-1}) ; v_g(4; 4) = j \frac{k_2}{2} (z - z^{-1}) ;$$

$$v_g(4; 5) = j \frac{k_2}{2} (z + z^{-1}) ; v_g(4; 6) = j \frac{k_2}{2} (z - z^{-1}) ;$$

$$v_g(5; 3) = j \frac{k_2}{2} (z - z^{-1}) ; v_g(5; 4) = -j \frac{k_2}{2} (z + z^{-1}) ; v_g(5; 5) = j k_1 (z - z^{-1}) ;$$

$$v_g(6; 3) = -j \frac{k_2}{2} (z + z^{-1}) ; v_g(6; 4) = j \frac{k_2}{2} (z - z^{-1}).$$

Les courbes des vitesses de groupe dans les six modes en fonction de la fréquence de diffusion Ω du système sont tracées sur la figure (3).

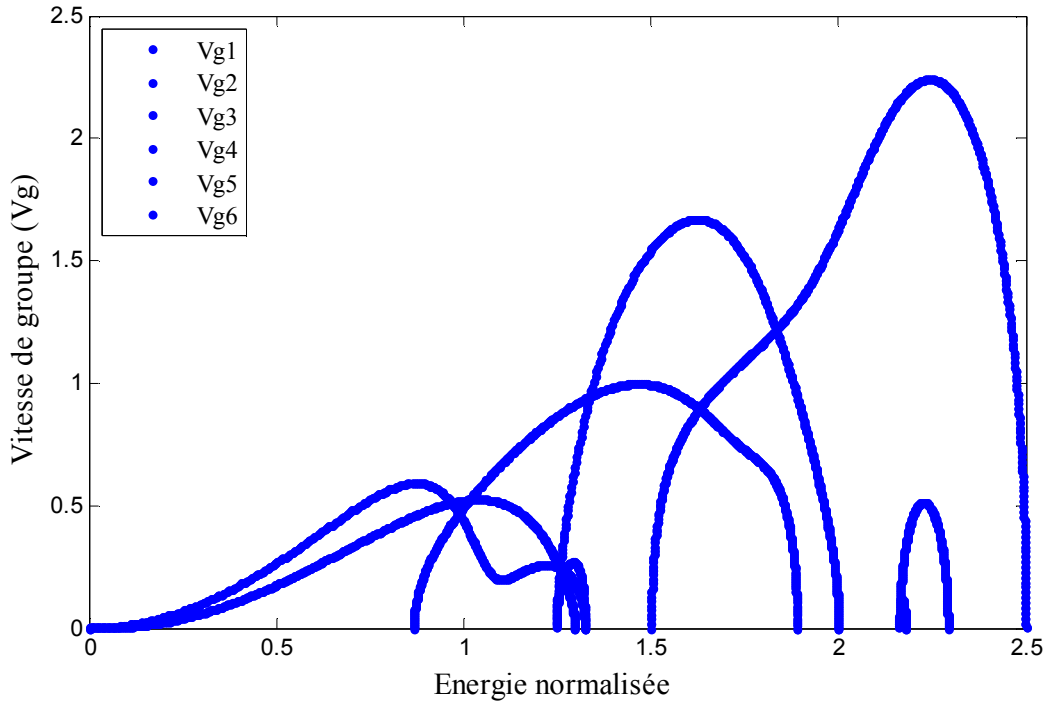


Figure 3. Illustration des vitesses de groupe dans un assemblage monoatomique à triple chaînes parallèles.

Discussions

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

La vitesse de groupe correspond à la pente des courbes de dispersion.

Signifie que l'onde incidente se propage bien sans changement de direction dans le système.

Les intervalles de fréquence où la vitesse de groupe $v_g \neq 0$ se rapporte bien à celle des modes propageant.

Chapitre 2

*Effet d'une substitution atomique
sur les propriétés vibrationnelles
d'un assemblage quasi-linéaire*

Introduction

Dans ce chapitre, nous étudions la diffusion des ondes élastiques (phonons) à travers une inhomogénéité structurale, représentée par un défaut de substitution, dans un assemblage atomique quasi-linéaire. Nous nous intéressons, en particulier, à l'impact d'une substitution atomique sur les propriétés dynamiques de l'assemblage atomique, constitué de trois chaînes atomiques parallèles. L'étude sera menée dans le cadre du modèle des forces centrales [20-21]; comme décrit précédemment, dans le chapitre 1.

L'objectif de cette étude est de relever les spectres de vibrations en présence des sites atomiques substitués, et de savoir comment cette configuration influence-t-elle la propagation des ondes et son effet sur les modes propres de vibration. Nous rappelons que les propriétés des matériaux dépendent de leur structure cristalline et de leurs défauts atomiques [22]. Les propriétés sont fortement influencées par la concentration des défauts ; qui se présentent en quatre catégories : ponctuelles (0D) ; linéaires (1D) ; surfaciques (2D) et volumiques (3D). Dans ce travail, nous examinons un défaut localisé de type substitution (remplacement).

I. Défaut de substitution dans les assemblages atomiques quasi-linéaire

I.1. Description du système modèle

La substitution atomique est effectuée suivant l'axe (Oy). Présenté sur la figure suivante :

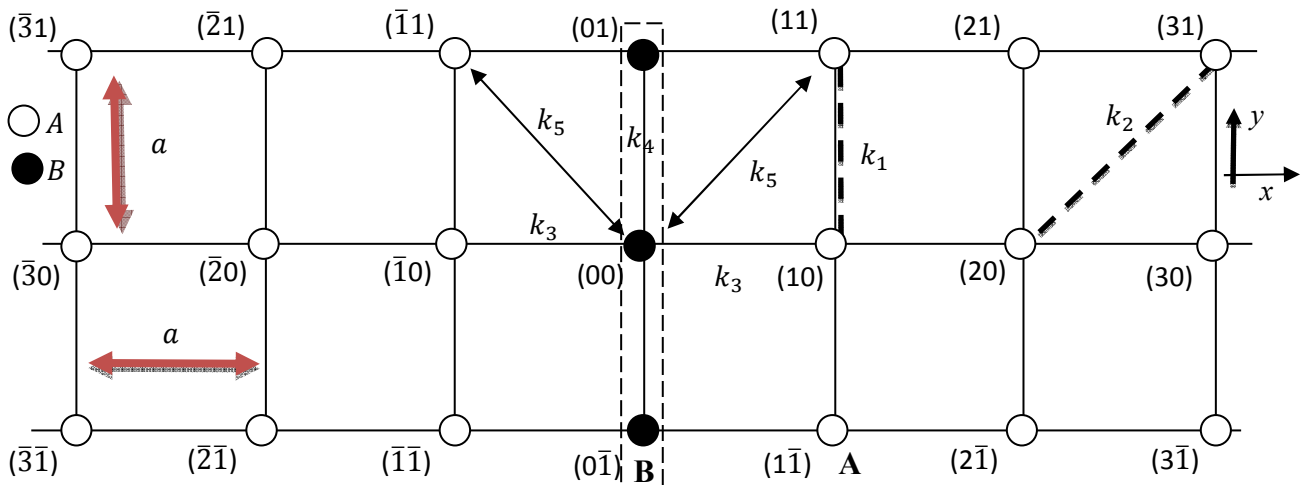


Figure 4. Substitution d'une rangée d'atomes A par une autre rangée d'atomes de type B suivant l'axe (Oy), dans un assemblage monoatomique quasi-linéaire.

Remarque

Les constantes de forces dans la zone de défaut peuvent être différentes de celles de la zone parfaite, donc on les note k_3 et k_5 pour les atomes 1^{er} et 2^{ème} voisins, respectivement, et k_4 entre elle-même.

I.2. Equations du mouvement et matrice dynamique du système perturbé

Pour étudier la dynamique d'un système quelconque perturbé, il faudrait connaître sa matrice dynamique.

I.2.a) Equation de mouvement

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

I.2.b) La matrice dynamique du système perturbé

La matrice est obtenue en écrivant les équations du mouvement des atomes de la zone de défaut (zone notée par la lettre M) + celles des atomes des zones de raccordement qui se trouvent aux frontières séparant les deux zones parfaites de la zone dite défaut.

On obtient alors, une matrice rectangulaire, Sa taille dépend du nombre d'atome qui se trouve dans la zone M ; (dans notre cas, il y a deux (02) ddl par site).

Dans façon générale, on note la matrice qui regroupe toutes les équations du mouvement par $Mdd(m, n)$. Cette dernière est appelée matrice dynamique du système perturbé (de défaut) ;

$m = \{\text{le nombre d'atomes dans la zone } M + \text{ceux des zones de raccordement multiplier par le nombre ddl par site}\}$, (il y a 2 ddl/site).

$n = \{m + \text{le nombre d'atomes qui sont reliés directement aux atomes de raccordement multiplier par le nombre de ddl par site}\}$, (il y a aussi 2 ddl/site).

Dans notre système sous étude, on a :

Dans la zone M trois (3) atomes et deux ddl ($3 \times 2 = 6$) donc six équations à écrire.

Dans les régions de raccordement (RG et RD), on a six atomes et aussi deux ddl ($6 \times 2 = 12$) douze équations à écrire.

Au total : dix-huit équations à écrire.

Comme les deux régions de raccordement (RG et RD) font intervenir le déplacement des deux (2) guides d'onde parfaits (GOG et GOD), avec deux degrés de liberté (ddl)/site, Nous atteindrons alors 30 inconnues. Donc, on obtient une matrice dynamique de taille (18×30).

Exprimée par :

$$[Mdd]|u\rangle = |0\rangle \quad (8)$$

$[Mdd]$: matrice dynamique d'un système perturbé, $|u\rangle$ c'est le vecteur contenant tous les déplacements atomiques du système perturbé.

Le vecteur des déplacements atomiques de la zone perturbé $|u\rangle$ peut être décomposé comme suit :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \quad (9)$$

La partie $|irr\rangle$: est constituée des déplacements des atomes des sites irréductibles, formant la zone de défaut,

La partie $|rac\rangle$: est composé des déplacements des atomes des sites qui assurent la jonction entre les 2 zones (défaut et les guides d'onde parfaits situés de part et d'autre).

Donc, l'équation (8) (matrice dynamique du système perturbé) peut se réécrire aussi sous la forme :

$$[Mdd](18 \times 30)|u\rangle = [Mdd](18 \times 30) \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (10)$$

II. Méthode de raccordement

L'étude de la dynamique vibrationnelle des structures perturbées se base, principalement sur trois (03) méthodes théoriques différentes. Ces méthodes sont : méthode de Slab [23], méthode de Green [24] et la méthode de raccordement [13-15]. Dans ce mémoire, nous utilisons la dernière.

La méthode de raccordement a été introduite par l'allemand Feuchtwang lors d'une étude portant sur l'équilibre d'une structure statique d'un réseau cubique semi-infini à trois (03) dimensions. Elle a été reprise, en 1987, dans deux articles publiés par les chercheurs français Antoine Khater et Jacob Szeftel. Le premier article étant un développement du formalisme mathématique utilisé et le deuxième est une application aux surfaces Ni(100) et Ni(100) + c (2x2). Depuis cette date, la méthode a contribué à l'étude de la dynamique vibrationnelle et magnétique d'un certain nombre de systèmes physiques [25-27].

II.1. Principe de la méthode

La méthode de raccordement est une méthode analytique, qui consiste à décrire le mouvement de vibration des atomes par un nombre fini d'équations. Son application exige que l'espace du système soit divisé en trois (03) zones (parfaite, défaut et zones de raccordement).

Une illustration du concept de la méthode est donnée sur la figure 5, le système est divisé en trois zones : zones gauche et droite (G et D) représentant le système parfait (A), et la zone du milieu notée M , correspond au système de défaut (perturbé B).

Les guides d'ondes parfaits à gauche et à droite (GOG et GOD) sont reliés à la zone de défaut par deux zones de raccordement (RG et RD).

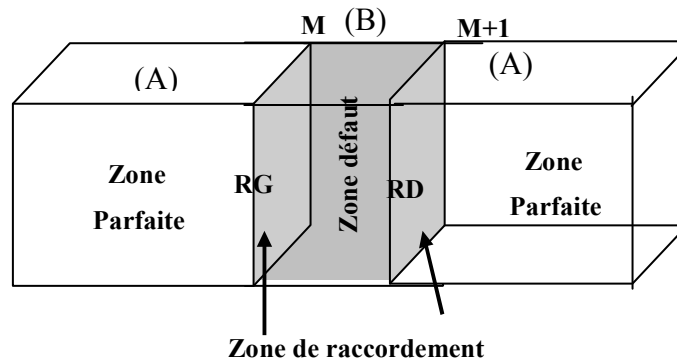


Figure 5. Représentation schématique d'un système atomique perturbé.

i) Zone parfaite

Cette zone se trouve hors de portée de tous les effets de défaut. Elle est caractérisée par une périodicité et s'est-elle qui permet de tracer les courbes de dispersion.

ii) Zone de défaut (perturbé)

C'est la zone qui renferme tous types de défaut, et dans cette zone la périodicité est brisée.

iii) Zone de raccordement

La zone de raccordement est composée des atomes situés entre les deux zones (parfaite et de défaut), elle permet, dans la modélisation théorique, de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut, aux états de vibrations évanescentes de la zone parfaite.

II.2. Matrice de raccordement

Le rôle de cette matrice est d'établir les relations qui permettent de raccorder les déplacements vibrationnels des atomes appartenant au domaine du défaut et les champs vibratoires des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits situés des côtés de la zone perturbée.

Dans ce travail, il y a deux régions de raccordement (RG à gauche et RD à droite) qui connectent la zone de défaut (M) aux guides d'ondes parfaits.

Pour atteindre l'objectif, nous devons définir deux bases distinctes $\{R\}$ et $\{T\}$, la première sera utilisée pour l'étude du mouvement des atomes de la zone de raccordement à gauche, et la deuxième utilisée pour l'étude dynamique des atomes de la deuxième zone de raccordement (à droite). Pour cela, on peut représenter les déplacements atomiques par une combinaison

linéaire des vecteurs de bases $\{R \text{ et } T\}$, définissant un espace fini, est ses dimensions sont liées au nombre des modes évanescents obtenus lors de l'étude de la dynamique du système parfait. Nous avons obtenus six modes de vibrations, l'espace est de dimensions six (06) aussi. La matrice de raccordement est une matrice rectangulaire, notée M_R , avec une dimension inverse de la dimension de la matrice dynamique du système perturbé. Donc, on écrit $M_R(30 \times 18)$. On peut écrire, analytiquement, la matrice de raccordement par l'expression suivante :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [M_R] \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \quad (11)$$

$[M_R]$ est la matrice de raccordement de taille (30×18) , I_d est une matrice identité de défaut de taille (6×6) par rapport à notre système, et R_1, R_2, R_3 et R_4 sont des sous matrices carrées qui dépendent du nombre de modes propagateurs du système parfait, leurs dimensions est de (6×6) . Ces dernières sont exprimées en fonctions des facteurs de phases (z) et cofacteurs.

Remarque

Le produit matriciel entre la matrice dynamique du système perturbé et la matrice de raccordement donne une matrice carrée D de taille (18×18) .

$$[Mdd(18 \times 30)][M_R R(30 \times 18)] \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [D(18 \times 18)] \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = 0 \quad (12)$$

Les états vibrationnels localisés dans le système perturbé sont déterminés par le calcul du déterminant de la matrice carrée, issue du produit matriciel, on écrit :

$$\det[D(18 \times 18)] = 0 \quad (13)$$

III. Calcul des grandeurs physiques

Le système matriciel fournis les informations nécessaires pour décrire l'effet d'un défaut quelconque sur une onde incidente quelconque, puisqu'elle contient les facteurs de couplage entre tous les modes (à gauche et à droite), pris deux à deux. A partir d'eux, on obtient les grandeurs physiques intéressantes telles que, les coefficients de transmissions, réflexions et la conductance phononique.

III.1. Coefficients de transmission et de réflexion

Les déplacements atomiques dans les sous-espaces peuvent être exprimés comme une combinaison linéaire des modes propres de vibration du guide d'onde parfait, à la même fréquence [28] :

Après la zone de défaut, pour $i \geq M+1$, on aura :

$$\vec{u}_T^i = \sum_v T_{v\bar{v}} (Z_v)^i \vec{u}_{v\bar{v}} \quad (14)$$

Avant la zone de défaut, pour $i \leq M$, on aura :

$$\vec{u}_R^i = \sum_v R_{v\bar{v}} (Z_v)^{-i} \vec{u}_{v\bar{v}} \quad (15)$$

$R_{v\bar{v}}$ et $T_{v\bar{v}}$ sont des facteurs qui permettent de calculer les coefficients de réflexion ($r_{v\bar{v}}$) et de transmission ($t_{v\bar{v}}$), déterminés, après normalisation par les vitesses de groupe. La notation \bar{v} désigne un mode propageant incident. Les coefficients de réflexion et de transmission s'expriment par :

$$r_{v\bar{v}} = |\rho_{v\bar{v}}|^2 = \frac{v_v}{v_{\bar{v}}} |R_{v\bar{v}}|^2 \quad (16)$$

$$t_{v\bar{v}} = |\tau_{v\bar{v}}|^2 = \frac{v_v}{v_{\bar{v}}} |T_{v\bar{v}}|^2 \quad (17)$$

Ici v désigne un mode propageant, ρ et τ sont les éléments de matrice de diffusion (dites probabilités de transmission et de réflexion, respectivement).

Si v est un mode atténué, les coefficients t et r sont nuls car à longue portée loin de la zone de défaut, l'impact du défaut est négligeable.

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

$$\sum_v (t_{v\bar{v}} + r_{v\bar{v}}) = 1 \quad (18)$$

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

III.2. Conductance phononique

La conductance phononique $\sigma(\Omega)$ d'un défaut donné, est une grandeur physique définie par analogie avec la conductance électronique [29], dans les phénomènes de diffusion électronique, elle est définie par :

$$\sigma(\Omega) = \sum_{v,\bar{v}} t_{v\bar{v}} \quad (19)$$

La somme est effectuée sur tous les modes se propageants à la fréquence Ω .

Pour un guide d'ondes parfait, sans défaut, σ est un entier qui donne le nombre de modes propageants à la fréquence Ω considérée.

On peut dire, la présence du défaut crée un écart entre la conductance idéal (σ) et sa valeur provenant du processus de diffusion. Cet écart donne une mesure de la réflexion causée par la présence des défauts dans le système.

IV. Résultats des simulations

IV.1. Résultats des spectres de transmission et de réflexion

Nous avons, réalisé des simulations numériques, pour déterminer les coefficients de transmission (t) et de réflexion (r), en fonction de la fréquence normalisée Ω , et ce dans les différents cas de contraintes possibles :

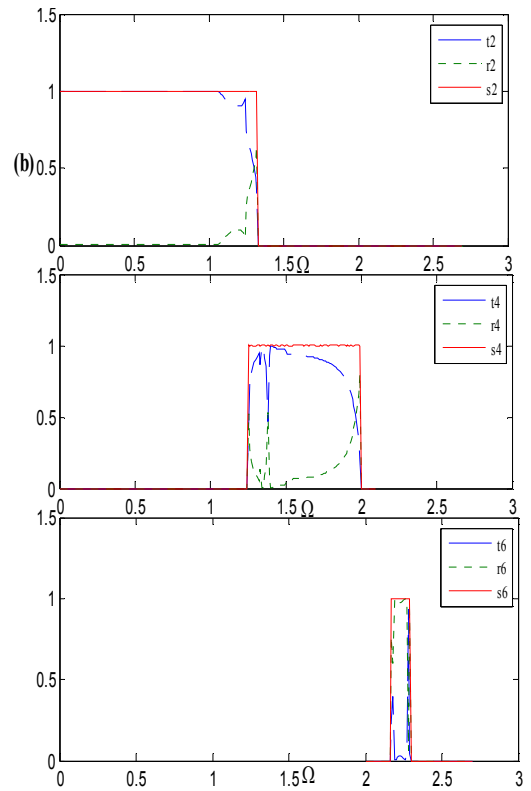
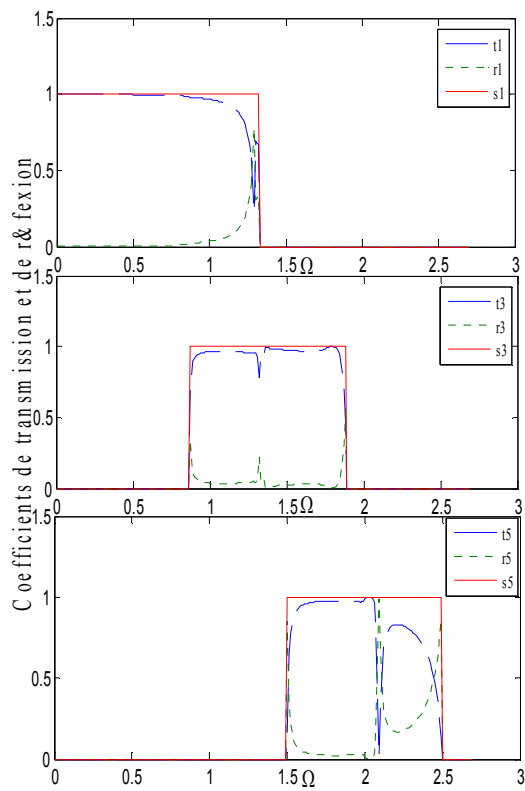
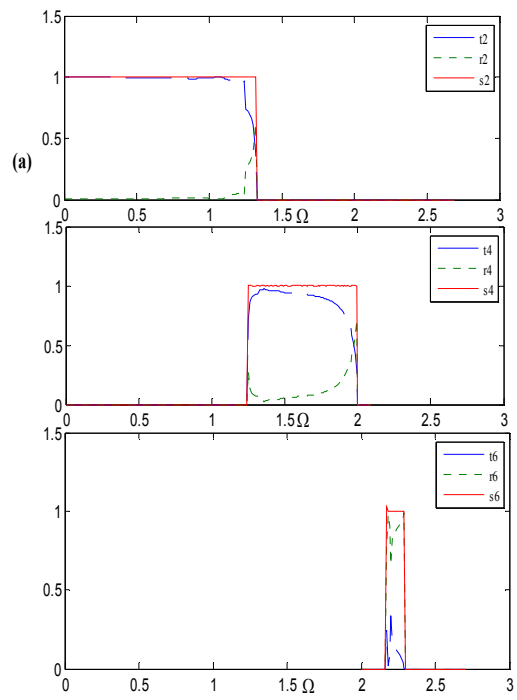
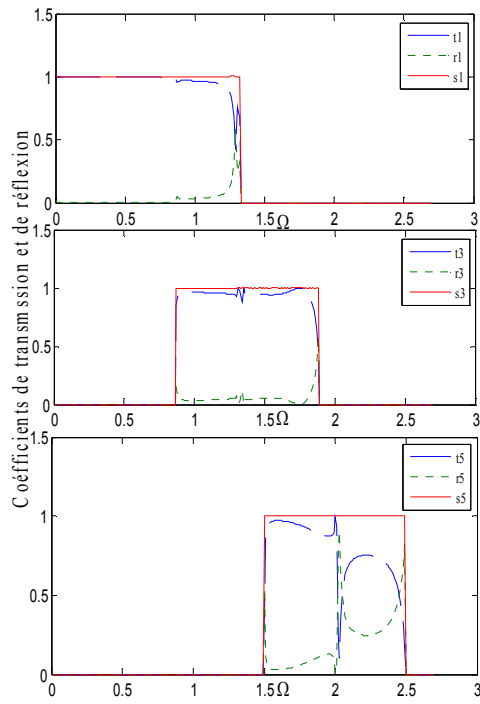
- i)* L'adoucissement correspond au cas où les constantes d'interactions dans la zone M sont inférieures à celles de la zone parfaite.
- ii)* L'homogénéité décrit le cas où l'ensemble des paramètres de couplage sont identiques.
- iii)* Le durcissement décrit le cas où les interactions entre les sites atomiques dans la zone défaut sont supérieures à celles de la zone parfaite (le contraire de l'adoucissement).

Nous avons aussi relevé l'impact de la masse de l'atome substituée sur les spectres de vibrations, en particulier, les calculs sont effectués pour trois cas de rapport de masse :

$m_A > m_B$ (masses légères), $m_A = m_B$ (comparables) et $m_A < m_B$ (masses lourdes).

Pour chaque rapport de masse et de constante de force, nous avons tracé les résultats obtenus sur les figures (6,7 et 8) suivantes :

i) Cas d'une masse légère ($m_B < m_A$)



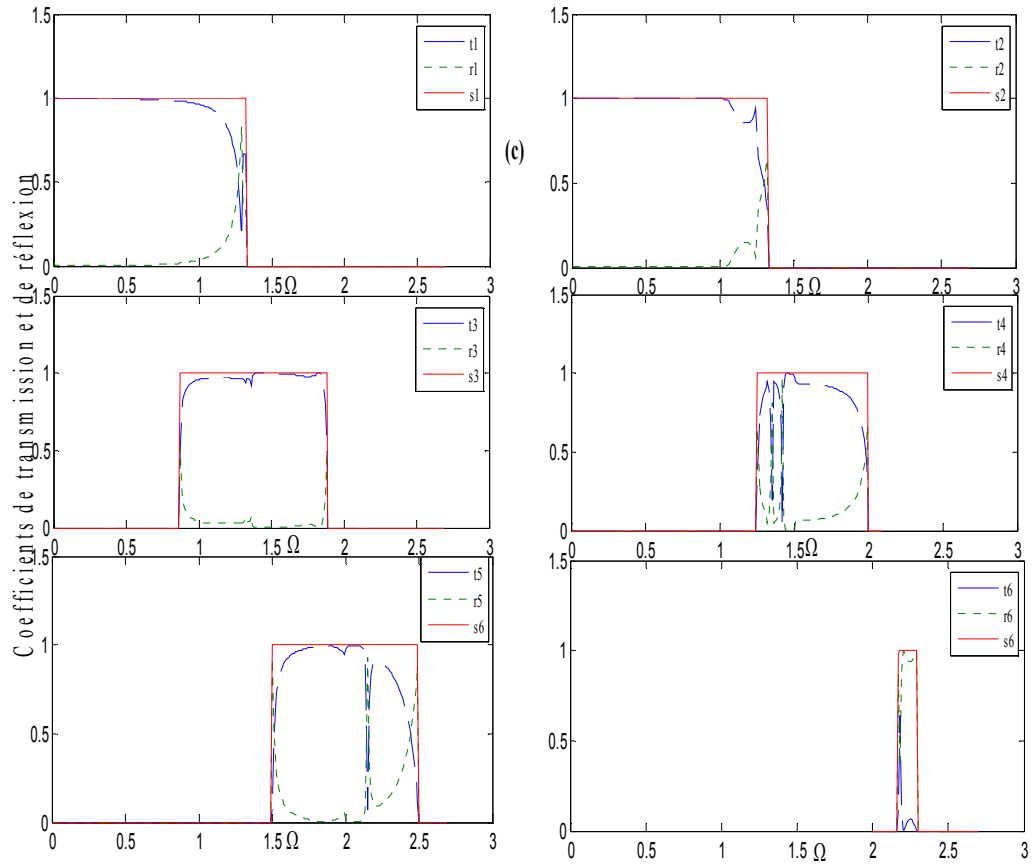
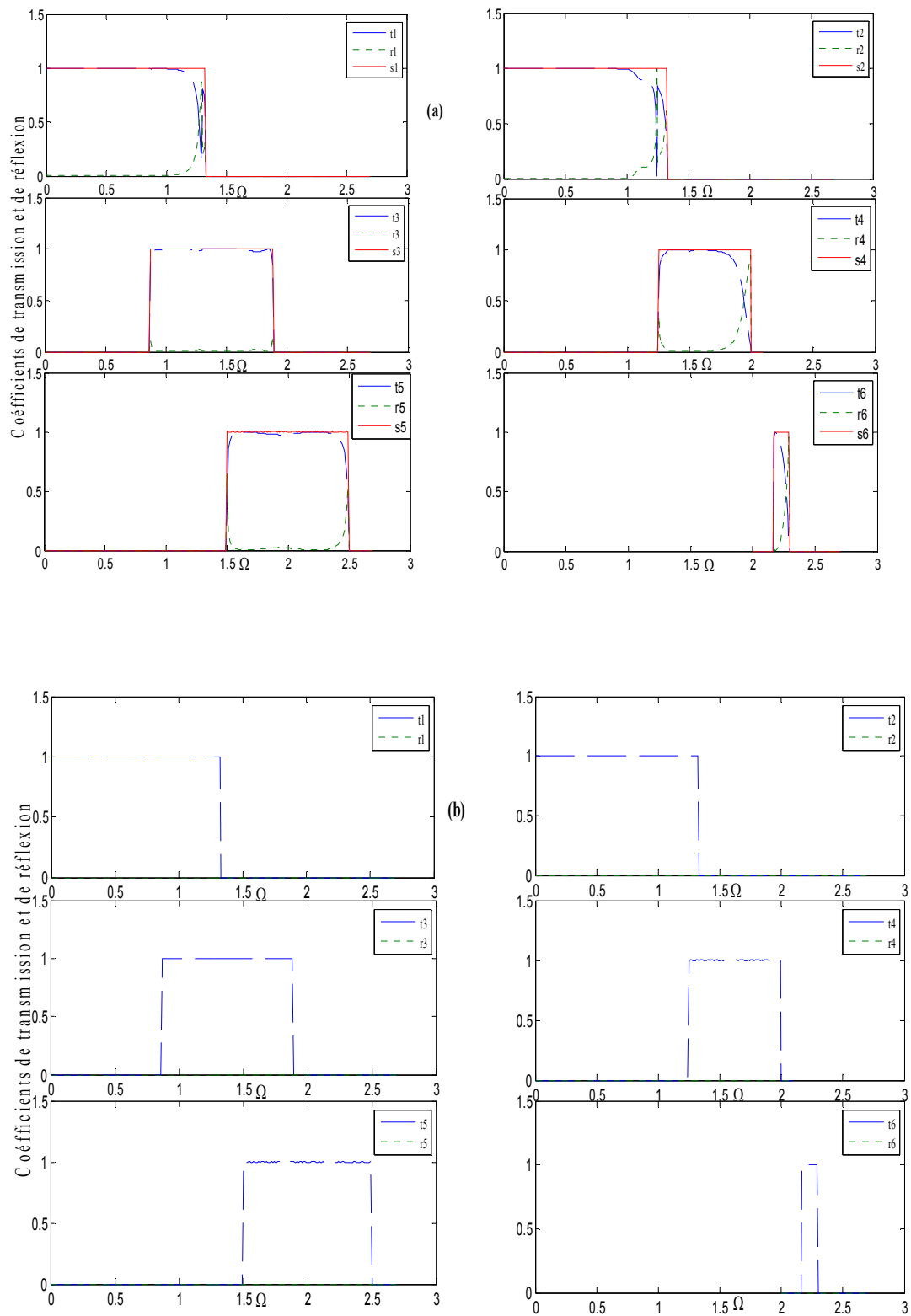


Figure 6. Les spectres de transmission (t_i) de réflexion (r_i) et leur somme (s_i), en présence des sites substitués, dans les six modes de vibrations, $i = 1, \dots, 6$. Dans une substitution à masse légère ($m_B < m_A$).

- (a) Simulation du cas de l'adoucissement des contraintes,
- (b) Simulation du cas de l'homogénéité des interactions,
- (c) Simulation du cas de durcissement des forces.

ii) Cas d'une masse homogène ($m_B \approx m_A$)



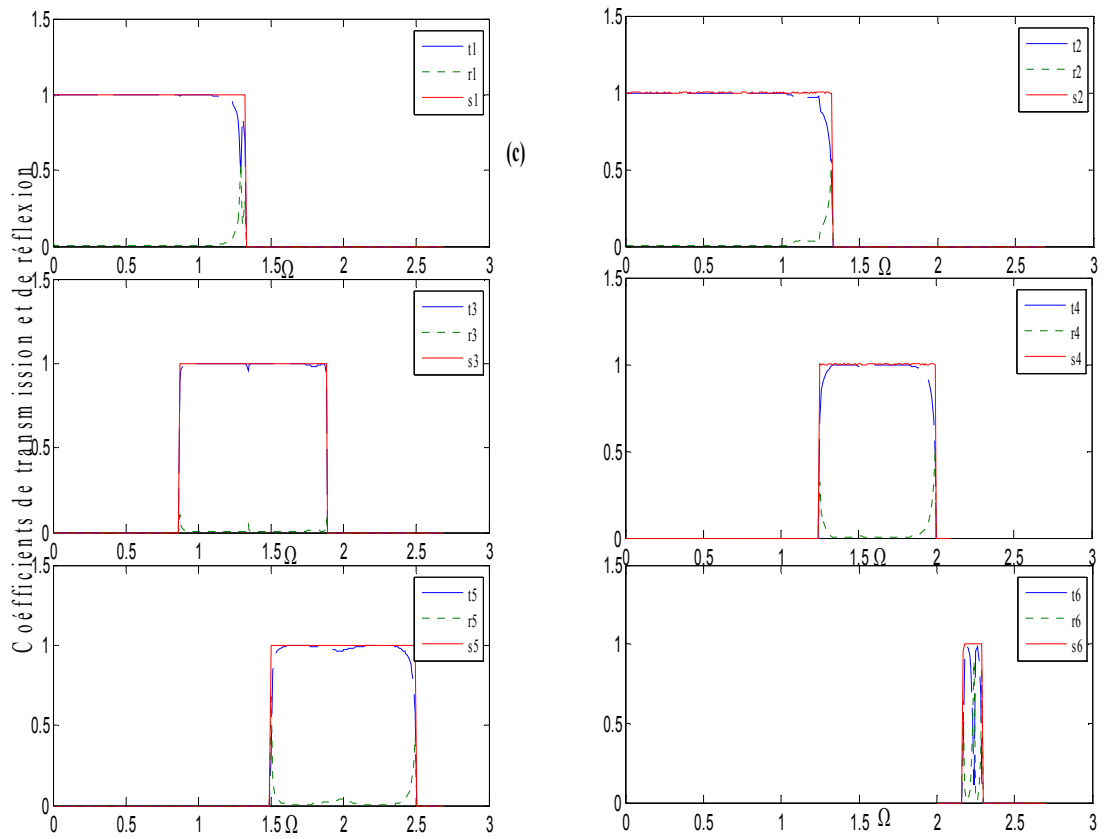
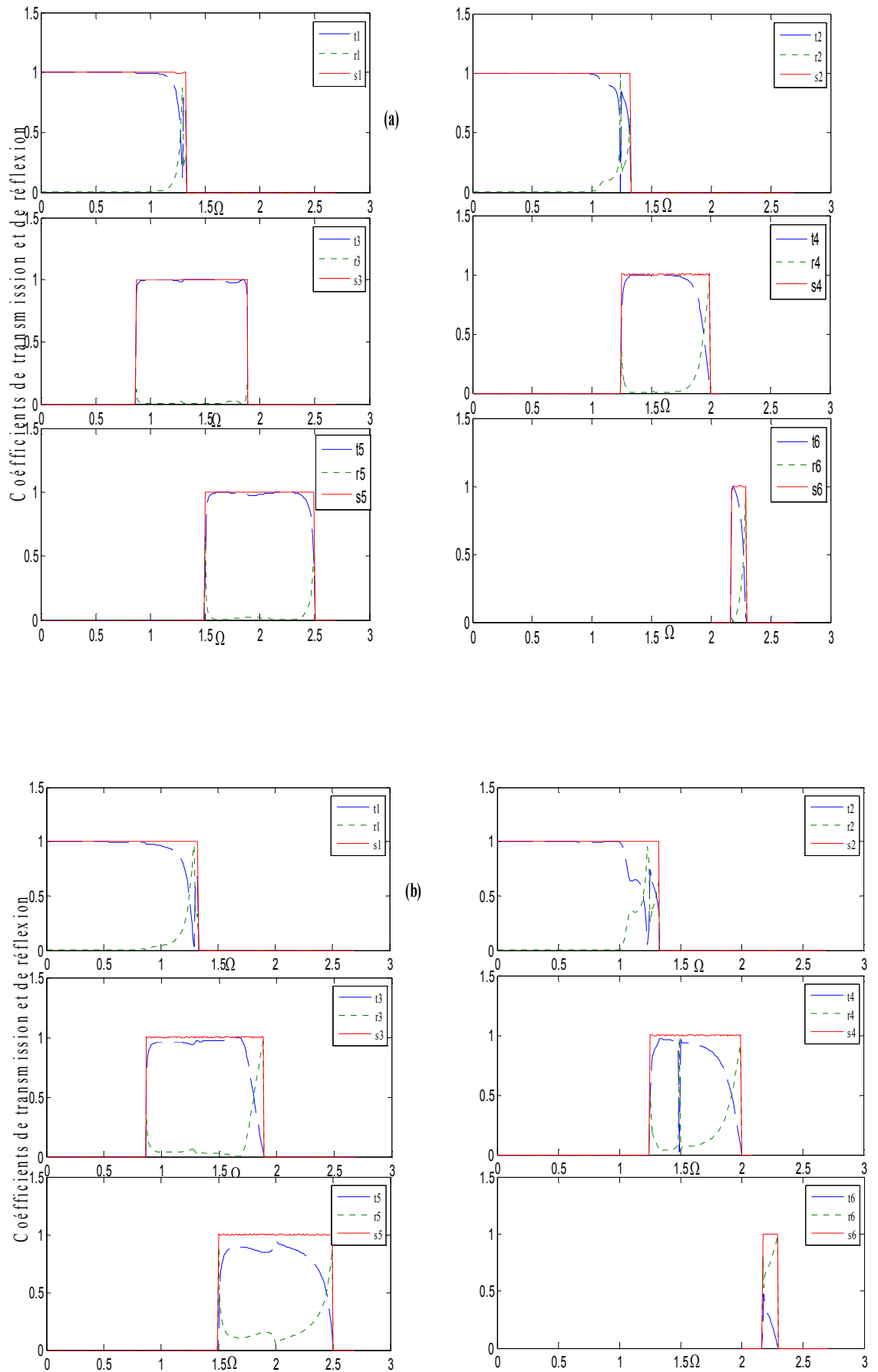


Figure 7. Les spectres de transmission (t_i) et de réflexion (r_i) et leur somme (s_i), en présence des sites substitués, dans les six modes de vibrations, $i = 1, \dots, 6$. Dans une substitution à masse comparable à celle du système parfait ($m_B \approx m_A$).

- (a) Simulation du cas de l'adoucissement des contraintes,
- (b) Simulation du cas de l'homogénéité des interactions,
- (c) Simulation du cas de durcissement des forces.

iii) Cas d'une masse lourde ($m_B > m_A$)



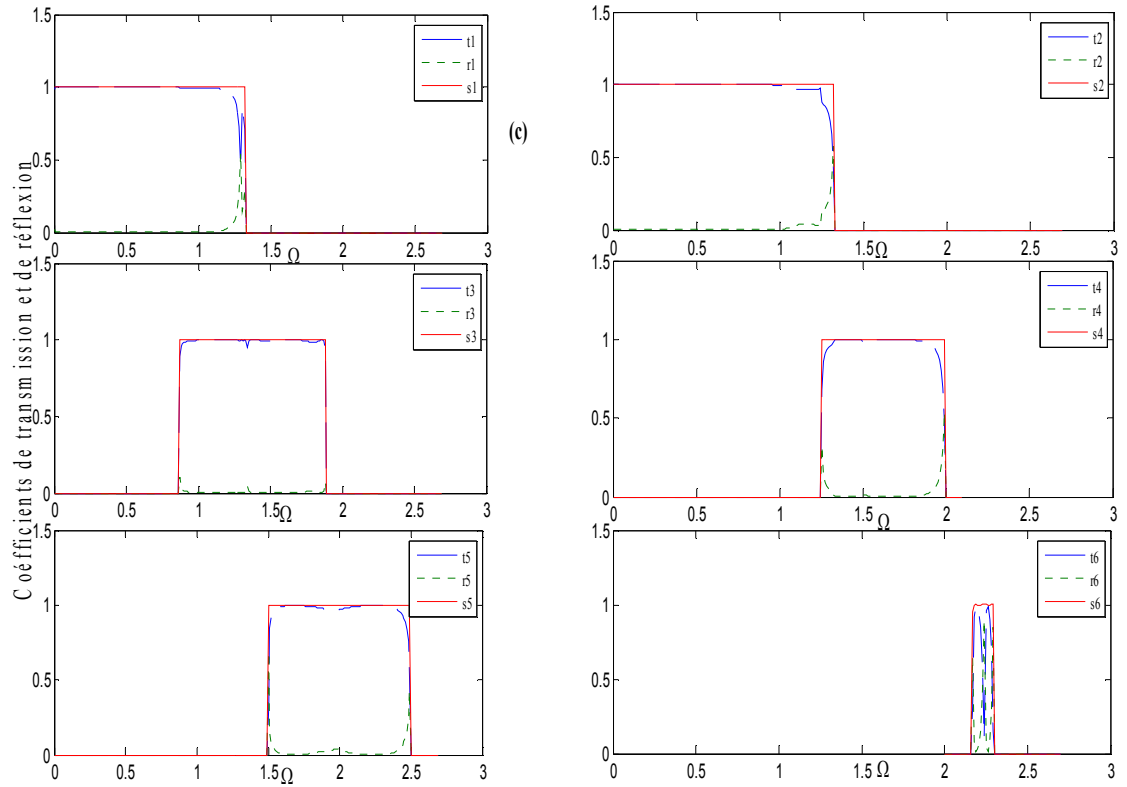


Figure 8. Les spectres de transmission (t_i) de réflexion (r_i) et leur somme (s_i), en présence des sites substitués, dans les six modes de vibrations, $i = 1, \dots, 6$.

Dans une substitution à masse lourde ($m_B > m_A$).

- (a) Simulation du cas de l'adoucissement des contraintes,
- (b) Simulation du cas de l'homogénéité des interactions,
- (c) Simulation du cas de durcissement des forces.

IV.2. Résultats des conductances phononiques

Pour l'information sur la contribution des six modes de phonons en même temps, nous avons calculé numériquement les conductances phononiques (σ) en fonction de la fréquence normalisée Ω dans les différents cas de rapport de masse et les différents cas de constante de force dans la zone de défaut.

Les résultats obtenus sont représentés sur les figures (9,10 et 11) suivantes :

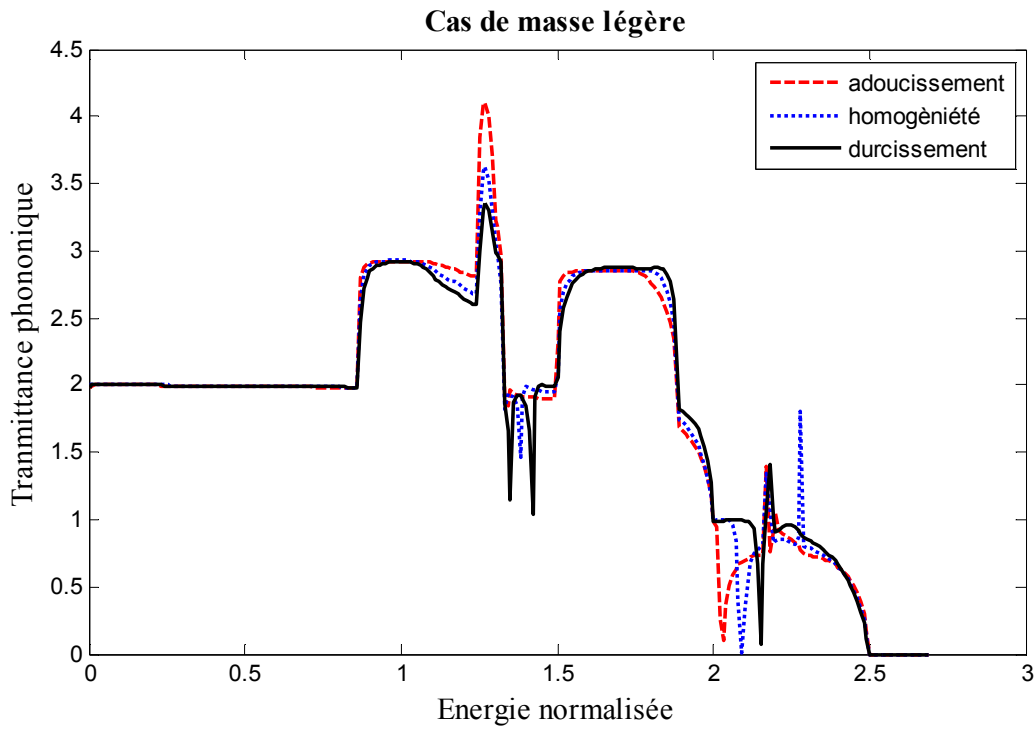


Figure 9. Spectres de transmittance phononique, dans le cas d'une substitution ayant une masse légère ($m_B < m_A$).

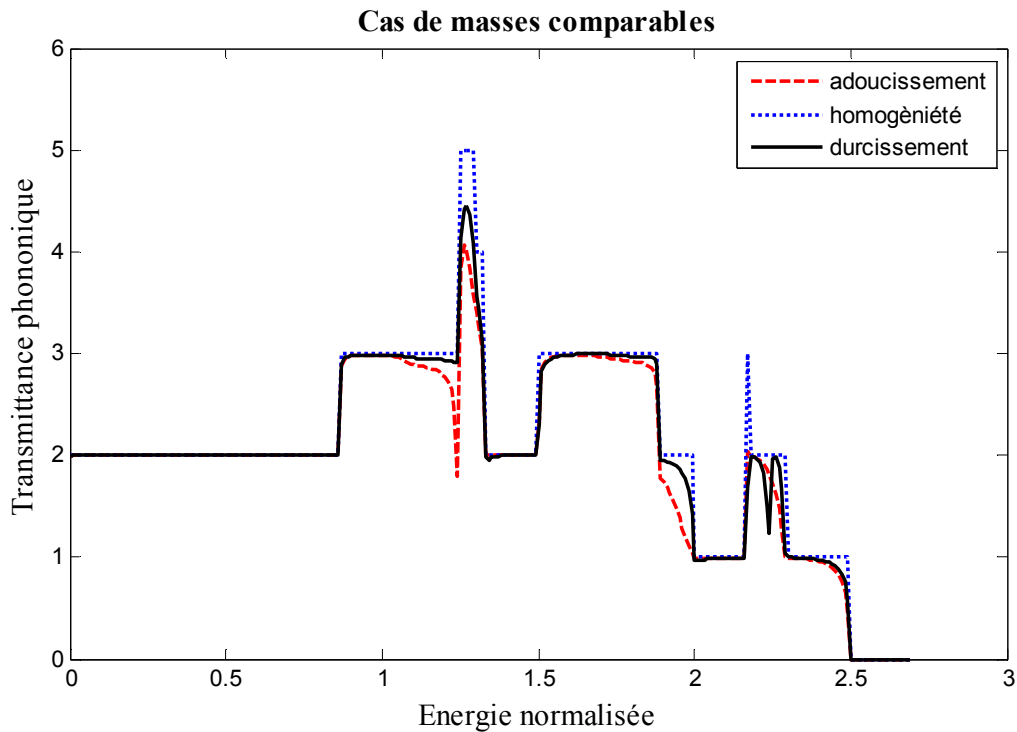


Figure 10. Spectres de transmittance phononique, dans le cas d'une substitution ayant une masse comparable à celle du guide d'ondes parfait ($m_B \approx m_A$).

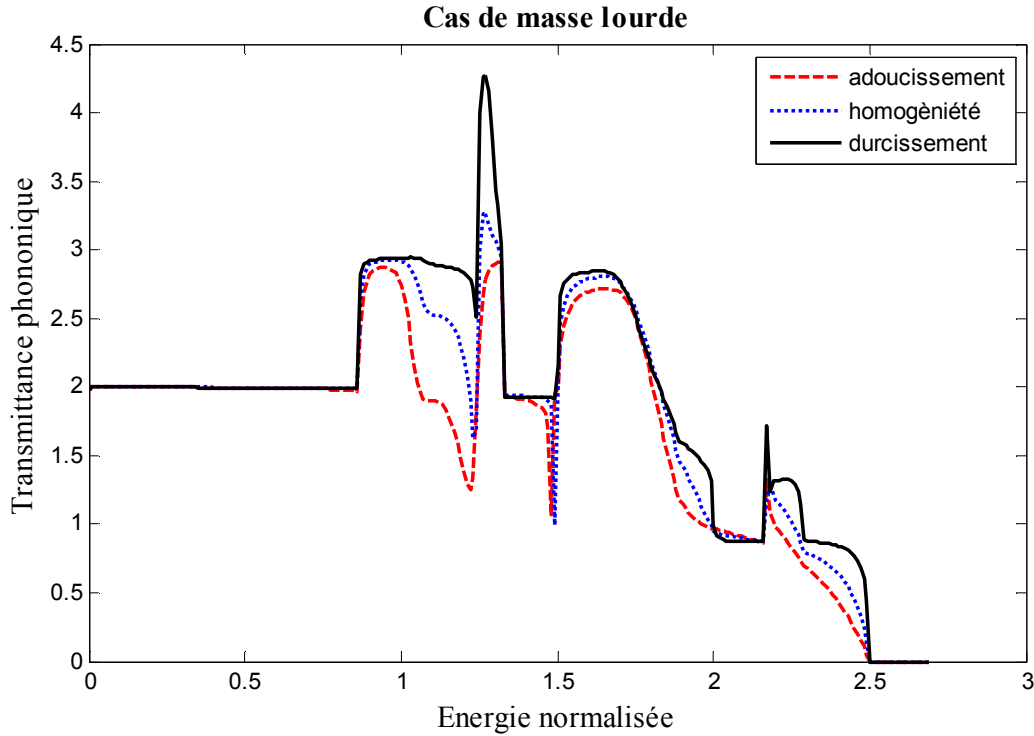


Figure 11. Spectres de transmittance phononique, dans le cas d'une substitution ayant une masse lourde ($m_B > m_A$).

V. Discussion des résultats

Les figures (de 6 à 11) montrent, les résultats des calculs numériques des coefficients de transmission, réflexion et de la conductance phononique, en fonction de la fréquence normalisée Ω , là où les vitesses de groupes sont non nulles.

La contribution de chaque mode de phonon individuellement, dans les six modes propres de vibration, à la propagation des ondes élastiques et leur diffusion par les sites substitués dans l'assemblage quasi-linéaire (quasi-1D), composé par trois chaînes monoatomiques parallèles est relevée.

Les trois premières figures, 6, 7 et 8, montrent l'allure des coefficients de transmission et de réflexion dans les six modes de vibration individuellement, et ce pour les trois possibilités de défaut de masse : légère ($m_B < m_A$), homogène ($m_B \approx m_A$) et lourde ($m_B > m_A$).

Dans chaque défaut de masse considéré, surtout pour chaque modes sur les figures la somme (s_i) est égale à l'unité un ($s_i = t_i + r_i = 1$), avec ($i = 1, \dots, 6$). Ceci est utilisé comme un test de contrôle pour nos calculs numériques.

Les notations (a), (b) et (c), dans la même figure, décrivent les possibilités des contraintes de forces dans la zone de défaut, d'aller de l'adoucissement au durcissement, en passant par l'homogénéité des interactions.

On constate que, les deux premières modes (notés t_1 et t_2) sont symétriques et sont aussi acoustiques, ils s'annulent uniquement à la limite supérieure (vers la fin), des modes présentent moins d'oscillations par rapport aux quatre autres modes qui sont asymétrique et optiques.

Les oscillations asymétriques sont identifiées comme étant des résonances de type Fano. Elles sont dues à une interaction entre les états localisés dans la région perturbée et les modes propageant du système parfait.

On observe dans les figures (6,7 et 8) que les spectres de transmission sont plus réguliers dans les cas des modes acoustiques, ceci s'explique par le fait que les longueurs d'onde sont de l'ordre de grandeur des paramètres de réseaux (a).

De plus, la transmission est plus favorable dans le cas d'une masse légère, que dans le cas d'une masse lourde, ce comportement dans la transmission est expliqué par, l'insuffisance de l'énergie des ondes à basses fréquences, pour franchir le défaut lourd dans le cas des grandeurs des masses, dans le cas des masses légères les ondes élastiques au cours de leurs propagation due à qui en interagissant avec les ondes localisées dans la zone de défaut.

Dans le cas de masses homogènes, la transmission est totale dans le cas des contraintes homogènes (on retrouve le système parfait sans défaut).

Les ondes peuvent interférer entre elles dans la région perturbée, et donnent naissance à des ondes résultantes avec des longueurs d'onde particulières, suite aux réflexions multiples par les limites de défaut.

On remarque sur les différentes figures (6,7 et 8) que, pour un défaut donné parmi les trois types examinés, la réflexion est très sensible à la variation des valeurs des constantes de forces au niveau du domaine de défaut, et on dénombre beaucoup plus de fluctuations avec le durcissement des constantes élastiques.

Dans le cas de l'adoucissement des contraintes, on remarque une diminution de la distance entre les pics de réflexion (ou de transmission) dans les six modes de vibrations, par contre, le cas de durcissement les spectres des deux coefficients s'éloignent l'un de l'autre.

Nous rappelons que, expérimentalement nous n'avons pas accès aux coefficients de transmission et réflexion (notion purement théorique). Par contre la conductance (transmittance) phononique est une grandeur mesurable.

De façon similaire, aux coefficients de transmission et de réflexion des phonons, nous avons tracé la conductance phononique pour les trois configurations de défaut de masse, et dans les trois possibilités (adoucissement, homogène et durcissement). Les résultats sont représentés sur les figures (9, 10 et 11).

Dans tous les cas étudiés, la transmittance s'annule à la limite de la plage de propagation des phonons. On remarque sur les courbes de conductances phononiques, des oscillations complexes, elles sont dues aux multiples réflexions sur les bords de la zone de défaut.

Les résultats prouvent que la transmittance de différentes configurations est une fonction dépendante de l'énergie de diffusion de la structure.

Aux plus basses fréquences, les conductances commencent par les valeurs maximales, puis elles diminuent au fur et à mesure qu'on parte vers la limite de l'intervalle de Ω (Fig.9).

Dans le cas d'une masse comparable, pour des contraintes homogènes, (fig. 10) la transmittance phononique présente un certain nombre de paliers. Ces derniers donnent pour chaque intervalle de fréquence définir le nombre de modes de phonons qui peuvent être excités simultanément.

Nous retrouvons également les pics de résonances respectifs exactement aux mêmes positions trouvées sur les figures (6,7 et 8) des coefficients de transmission et réflexion.

Ces fluctuations sont une caractéristique de l'interaction entre les modes de phonons propageants du système parfait et les modes localisés générés par le domaine du défaut lui-même.

Aux hautes fréquences de vibration, les modes optiques produisent l'effet inverse à cause de l'énergie élevée du système.

Conclusion générale

La compréhension des phénomènes physiques à l'échelle nanométrique est devenue indispensable au progrès des technologies de pointe. Des simulations basées sur la connaissance de la structure électronique, l'environnement atomique et de l'énergie totale des systèmes nanostructures, donnent accès à plusieurs propriétés, qui peuvent être confrontées à l'expérience, qui sont importantes voire fondamentales pour de nombreuses applications.

L'influence de la géométrie des défauts sur les phénomènes de transport et de diffusion des phonons dans les systèmes de basse dimension est relevée grâce à l'application de la technique de raccordement, et ce en tenant compte des différents paramètres caractérisant le domaine perturbé (constantes de force, les masses, anisotropie, ...).

Le contrôle des propriétés de la matière à l'échelle nanométrique contribuera à l'usinage de structures améliorées, plus légères et de caractéristiques plus fiables. Notons aussi que la diffusion d'ondes élastiques est complexe et cela est dû au caractère vectoriel du champ de déplacement des phonons.

Les spectres obtenus par les expériences de diffusion d'ondes contiennent des informations sur la structure, et nous renseignent sur l'importance des réflexions multiples générées par le défaut. La substitution de quelques sites atomiques, dans un assemblage quasi-linéaire, conduit à l'apparition de résonances supplémentaires sur les spectres de vibration (transmission et transmittance des phonons). Les oscillations observées sont dues aux interactions entre les états propageant du système parfait et les états localisés créés autour des sites substitués. La dynamique du système et la diffusion des phonons via le défaut de substitution est examinée spécifiquement dans les trois possibilités des masses atomiques : légère, comparable et lourde. De plus, pour chacun des trois cas de masse, nous avons simulé les trois possibilités des constantes de force dans la zone perturbée.

Selon les paramètres utilisés (variation de la masse et/ou des constantes d'interactions) pour examiner le comportement des phonons dans l'assemblage atomique à triple chaînes, en présence des sites substitués, nous enseignent sur la possibilité d'utiliser ces sites substitués pour augmenter (amplifier la transmittance) ou bien pour diminuer (filtrer la transmission) de certains phonons dans certaines gammes ou intervalles de fréquences.

Avec l'adoucissement des constantes de force au niveau de la zone de défaut, les maximums des spectres de vibration se localisent aux basses fréquences, ce qui est contraire de l'effet produit avec le durcissement des contraintes. Ce comportement est complexe et intéressant, car la substitution peut être utile dans les capteurs fonctionnels.

Références bibliographiques

- [1] C. Charles, B. Bonello, F. Ganot, *Ultrasonics* 44, e1209 (2006).
- [2] Y.F. Wang, Y.S. Wang, C. Zhang, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 47, 485102 (2014).
- [3] P. Pazhamalai, K. Krishnamoorthy, S. Sahoo, V. K. Mariappan, S.-J. Kim, *ACS Appl. Mater. Interf.* 11, 624 (2019).
- [4] S. M. Hus, A.P. Li, *Prog. Surf. Sci.* 92, 176 (2017);
- [5] B. Zheng, B. Xia, R. Wang, Z. Chen, J. Zhao, Y. Zhao and H. Xu, *Phys. Rev. B* 101, 100303 (2020).
- [6] L. Djebala and B. Bourahla, Accepted Paper in *Spin* (2021).
Doi: 10.1142/S2010324721500144
- [7] X. Li, R. Yang, *Phys. Rev. B* 86, 054305 (2012).
- [8] Bourahla and A. Belayadi, *Inter. J. Mod. Phys. B* 35, 2150066 (2021).
- [9] S. J. Gardiner, *Harmonic Approximation*, Cambridge University Press, UK (1995).
- [10] Q. Tang, Z. Zhou, *Progress in Materials Science* 58, 1244 (2013).
- [11] G. Belkacemi, B. Bourahla, A. Khater, *Inter. J. Modern Phys. B* 28, 1450072 (2014).
- [12] G. Belkacemi, B. Bourahla, *J. Phys. Chem. Solids* 75, 732 (2014).
- [13] T. E. Feuchtwang, *phy. Rev.* 155, 731 (1967).
- [14] J. Szeftel and A. Khater, *J Phys C: Solid State Phys.* 20, 4725 (1987).
- [15] B. Bourahla, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, *J. Phys. Condensed Matter* 18, 8683 (2006).
- [16] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater, R. Tigrine, *Physica E* 43, 1213 (2011).
- [17] B. Bourahla, O. Nafa, R. Tigrine, *Physica B* 406, 725 (2011).
- [18] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater and R. Tigrine, *Tech. Mech.* 32, 2 (2012).
- [19] G. Belkacemi, B. Bourahla, *Intern.l J. Modern Phys. B* 31, 1750155 (2017).
- [20] M. Born et T. Von Karman, *Z. Physik* 13, 297 (1912).
- [21] G. I. Stegemann and F. Nizolli, *Surface Excitation*, ed. V. M. Agronovich and R. London, Amsterdam: North Holland (1984).
- [22] B. S. Mun, C. Lee, V. Stamenkovic, N. M. Markovic, P. N. Ross, *Phys. Rev. B* 71, 115420 (2005).
- [23] R. A. Allen, *Surf. Sci* 76, 91 (1978).
- [24] George Green, *J. für die reine und angewandte Mathematik* 39 (1850).
- [25] A. Belayadi, B. Bourahla, *Surf. Sci.* 675, 1 (2018).
- [26] A. Belayadi, B. Bourahla, A. Mougari, *Spin* 09, 1950005 (2019).
- [27] A. Belayadi, B. Bourahla, *Comput. Condens. Matter* 24, e00493 (2020).
- [28] C. Kittel, *Introduction à la Physique de l'état Condensé*, Dunod édition (1995).
- [29] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, A. Khater, *Phys. Rev. B* 55, 1707 (1997).

Résumé

Les investigations théoriques et expérimentales présentent un intérêt technologique et aussi un intérêt fondamental, dans la mesure où la modélisation du comportement dynamique des dispositifs atomiques reste un sujet ouvert. Ainsi, à l'échelle atomistique, pour modéliser ou simuler le comportement dynamique de dispositifs atomiques fonctionnels, nous avons besoin de connaître les interactions interatomiques entre différents sites et les masses des atomes en mouvement. Dans ce travail, nous nous proposons d'étudier les propriétés vibrationnelles d'un assemblage monoatomique quasi-linéaire. Nous relevons, particulièrement, les transmittances phononiques liées à une substitution atomique dans un assemblage monoatomique quasi-linéaire. Les spectres de vibration sont déterminés et discutés en fonction de la masse du site atomique substitué et des constantes élastiques dans la zone perturbée.

Mots clés : Spectres vibrationnels, Substitution atomique, Assemblage quasi-linéaire

Abstract

Theoretical and experimental investigations present a technological interest, and a fundamental interest, insofar as modeling of the dynamic behavior of atomic devices remains an open subject. Thus, at the atomic scale, to model or to simulate the dynamic behavior of functional atomic devices, we need to know the interatomic interactions between different sites and the masses of the moving atoms. In this work, we propose to study the vibrational properties of a quasi-linear monatomic assembly. We note that the phononic transmittances linked to an atomic substitution in a quasi-linear monatomic assembly. The vibration spectra are determined and discussed as a function of the mass of the substituted atomic site and the elastic constants in the disturbed zone.

Keywords: Vibrational spectra; atomic substitution; Assembly quasi-linear