

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE MOULOD MAMMERI DE TIZI-OUZOU

FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



THESE DE DOCTORAT

SPECIALITE : PHYSIQUE  
OPTION : PHYSIQUE DES MATERIAUX ET COMPOSANTS

Présentée par :

**Ghania BELKACEMI épouse AKEB**

Sujet :

***Transport de phonons par les interfaces et les lames atomiques minces insérées en sandwiches dans les systèmes cubiques***

Devant la commission d'examen composée de :

<b>Mr Slimane Hellal</b>	Professeur	U.M.M. Tizi Ouzou	Président
<b>Mr Boualem Bourahla</b>	Professeur	U.M.M. Tizi Ouzou	Rapporteur
<b>Mr Rachid Tigrine</b>	Professeur	U. A.DRAIA Adrar	Examineur
<b>Mr Mourad Djebli</b>	Professeur	U.S.T.H.B. Alger	Examineur
<b>Mr Rabah Chadli</b>	MCA	U.M.M. Tizi Ouzou	Examineur

Soutenue le : 03 /10/2015

## *Remerciements*

Cette thèse est le fruit d'un travail passionnant réalisé au sein du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique de l'université M. Mammeri de Tizi Ouzou, sous la direction scientifique de Monsieur le Professeur Boualem Bourahla.

Je suis heureuse de lui témoigner ici ma reconnaissance pour l'efficacité et la bienveillance avec lesquelles il m'a constamment guidée et encouragée au cours de la période de recherche que j'ai passé au sein du groupe « 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. J'ai été très marquée par ses qualités scientifiques et humaines. Qu'il trouve ici, l'expression de ma profonde gratitude.

Je tiens à remercier vivement les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail :

- Monsieur Slimane Hellal, Professeur de l'UMMTO pour m'avoir fait l'honneur d'accepter la présidence du jury de thèse.
- Messieurs : Rachid Tigrine, Professeur de l'Université AHMED DRAIA d'Adrar, Mourad Djebli Professeur de l'U.S.T.H.B et Rabah Chadli, Maître de conférences à l'UMMTO pour avoir accepté la qualité d'examineurs de mon travail.

Mes remerciements vont aux chercheurs de LPCQ (directeur et membres), aux thésards en général et aux membres de notre équipe de recherche en particulier pour nos discussions enrichissantes, leurs suggestions, conseils, et surtout pour l'ambiance amicale.

A mes parents, à toute ma famille je voudrais exprimer ma gratitude la plus profonde pour le leurs soutien et leurs encouragements, en particulier à ma sœur Louiza pour son aide précieuse.

Je dédie ce travail à mon mari et à mes enfants que je remercie de tout cœur pour leur amour, leur patience, et leur bonne humeur sans lesquels je n'aurais pas pu progresser dans mes recherches.

*G. Belkacemi*

**Table des matières**

<b>Introduction générale</b> .....	1
<b>Chapitre I : Cadre théorique de la dynamique des réseaux cristallins</b> .....	5
I. Rappels cristallographiques .....	6
I.1. Réseau cristallin .....	6
I.2. Détermination expérimentale des structures cristallines.....	8
I.3. Les liaisons atomiques .....	9
I.4. Les défauts cristallins.....	10
II. Dynamique du réseau .....	13
II.1. Notions de vibration cristalline.....	13
II.2. Construction de l'Hamiltonien et approximations.....	14
II.2.1. Approximation de Born Oppenheimer .....	15
II.2.2. Hypothèses fondamentales .....	16
II.2.3. Approximation harmonique.....	16
II.2.4. Les constantes de force.....	17
III. Dynamique vibrationnelle d'un système parfait .....	19
III.1. Méthode classique .....	19
III.2. Zone de Brillouin .....	21
IV. Dynamique vibrationnelle d'un système perturbé .....	22
IV.1. Méthodes théoriques .....	22
IV.2. Principe de la méthode de raccordement .....	23
IV.3. Etats localisés de phonons.....	24
IV.5. Densité spectrale et densité d'état vibrationnelle.....	25
V. Etude de la diffusion.....	27
V.1. Coefficients de transmission et de réflexion .....	28
V.2. La conductance phononique .....	28
VI. Approche quantique .....	29
Références du chapitre I.....	30
<b>Chapitre II : Propriétés vibrationnelles des interfaces atomiques dans les structures cc et cfc</b> .....	31
Introduction .....	32
I. Etude de la diffusion dans le système parfait .....	33
I.1. Modèles parfaits à cristallisations cc et cfc .....	33
I.2. Détermination des modes propageants .....	34
I.2.1. Equations du mouvement.....	34
I.2.2. Courbes de dispersion .....	38
Discussion des résultats obtenus .....	39
I.2.3. Vitesses de groupe .....	40
Discussion des résultats obtenus .....	41
I.3. Les modes évanescents .....	41
I.3.1. Courbes de dispersion 3D .....	42
II. Etude de la diffusion dans un système présentant une interface .....	43
II.1. Modèles perturbés à cristallisation cc et cfc .....	43
II.1.1. Matrice dynamique .....	44
II.1.2. Matrice de raccordement .....	44
II.1.3. Spectres obtenus .....	46

Discussion des résultats obtenus .....	56
Conclusion .....	61
Références du chapitre II.....	62
<b>Chapitre III : Impact des lames nanométriques insérées en sandwich sur les propriétés vibrationnelles des structures cc et cfc .....</b>	<b>63</b>
Introduction .....	64
I. Techniques d'élaboration des couches minces .....	64
I.1. Techniques de dépôt physique en phase vapeur .....	65
I.2. Techniques de dépôt chimique en phase vapeur .....	67
II. Diffusion des phonons via un film mince inséré en sandwich dans une structure cubique .....	69
II.1. Nanojonction de type A/B/A .....	70
II.1.1. Résultats obtenus pour le réseau cc .....	71
II.1.2. Résultats obtenus pour le réseau cfc.....	75
III. Effet de la variation du nombre de films ultraminces sur la dynamique du réseau .....	78
III.1. Nanojonction de type A/B/A/B/A .....	79
III.1.1. Résultats obtenus pour le réseau cc.....	79
III.1.2. Résultats obtenus pour le réseau cfc .....	83
Discussion des résultats .....	87
Conclusion .....	90
Références du chapitre III .....	91
<b>Chapitre IV : Transfert thermique par une lame métallique mince insérée en sandwich dans un système cubique semi-conducteur .....</b>	<b>92</b>
Introduction .....	93
I. Chaleur spécifique et conductivité thermique des phonons .....	94
I.1. Estimation de la chaleur spécifique .....	94
I.2. Conductivité thermique .....	96
II. Formalisme mathématique du transport des phonons .....	97
II.1. Diffusion des ondes élastique et vitesses de groupe.....	99
II.2. Application Si/Al/Si .....	99
II.2.1. Système modèle .....	102
II.2.2. Résultats obtenus .....	103
Discussion des résultats obtenus .....	105
Conclusion .....	108
Références du chapitre IV .....	109
<b>Conclusion générale .....</b>	<b>110</b>

## **Introduction générale**

De l'échelle de l'univers à celle de l'atome, les ondes constituent un moyen privilégié d'accès à la connaissance et à l'exploration du monde qui nous entoure. L'étude de la propagation des ondes intéresse différents domaines : génie civil, géologie, isolation vibratoire, télécommunications, stockage de données, capteurs, etc. L'intérêt porté à leur propagation remonte à plus de trois siècles. Historiquement, cela concernait la propagation des ondes à la surface de l'eau, la description du mouvement des navires sur la houle, ou encore les effets de marée. L'avènement de la science des matériaux a joué un rôle capital dans le développement et l'intégration de nouvelles applications technologiques. Ainsi, dans le domaine de l'acoustique, les ondes de pression se propageant dans l'air donnent naissance au son. Les ondes du champ électromagnétique dans le vide génèrent la lumière. Les tremblements de terre eux, sont une conséquence directe de la propagation des ondes mécaniques dans le sol, et les ondes de déformations dans les matériaux solides sont les résultantes de la dynamique des réseaux atomiques.

Aujourd'hui, l'ingénierie des dispositifs électroniques et optoélectroniques des solides en général et des semi-conducteurs en particulier est révolutionnée. L'évolution de leurs performances (rapidité, sensibilité, miniaturisation) repose sur le contrôle du comportement de leurs atomes, et la détermination de leur contribution dans l'accomplissement d'une fonction spécifique. L'étude de leurs propriétés dynamiques revient dès lors à décrire le mouvement d'un ensemble d'électrons et de noyaux et à essayer de comprendre comment l'agencement des atomes et la manière dont ils peuvent interagir (phonons) confèrent à l'ensemble ses propriétés particulières.

Le concept de phonon fut introduit par le physicien allemand Albert Einstein en 1905, lorsqu'il a transposé le concept de quantum d'énergie de Planck pour expliquer la nature photonique de la lumière. Par analogie, il a quantifié l'énergie des ondes sonores se propageant dans un solide cristallin et qui fut appelé phonon. Depuis, de nombreux chercheurs apportèrent leurs contributions dans ce domaine. Les premières études ont vu le jour avec Lord Rayleigh qui a discuté l'existence d'ondes localisées de phonon, pouvant se propager dans les directions parallèles à la surface. Une grande avancée fut réalisée grâce à l'avènement de la théorie classique de la dynamique des réseaux formulée pour la première fois par M. Born et T. Von Karman en 1912, en utilisant les conditions aux limites périodiques dans les systèmes infinis. Par la suite, le physicien allemand W. Ledermann fut l'auteur des études sur la dynamique des systèmes semi-infinis en 1944, complétée par I. M.

Lifshitz et L. N. Rosenzweig en 1948, et T. E. Feuchtwang en 1967. Depuis, d'autres travaux ont pu montrer que les interfaces peuvent jouer un rôle prépondérant sur les propriétés physiques et dynamiques des solides cristallins, notamment sur la propagation des ondes élastiques, la diffusion de phonons et le transport de chaleur.

Les problèmes de propagation des ondes sont caractérisés par différents phénomènes tels que la diffusion, la dispersion, la diffraction, l'amortissement, la conversion, etc. Certaines de ces caractéristiques ne sont pas accessibles directement par l'expérience. D'où la nécessité de recourir à des modélisations numériques afin de déterminer les différents paramètres caractérisant le milieu et les ondes qui s'y propagent.

Dans ce contexte, notre contribution consiste à mettre en évidence l'impact des interfaces atomiques sur les propriétés vibrationnelles des structures atomiques à maillage cubique. L'étude de la dynamique des zones interfaciales engendrées par différents types de nanojonctions reliant deux systèmes semi-infinis, ouvre des perspectives innovantes dans le domaine des nanotechnologies par la prédiction de nouveaux phénomènes. On peut citer, parmi ces structures, les hétérojonctions, constituées de jonctions entre deux semi-conducteurs différents et les jonctions métal-semi-conducteur connues sous le nom de diodes. Quant aux systèmes lamellaires métalliques, ils sont constitués par la juxtaposition de films cristallins alternés. Les applications en physique du solide ne s'arrêtent pas là, et ont fait l'objet de nombreuses études sous excitations électroniques, magnonique et phononiques, grandement stimulées par les progrès techniques tels que l'épitaxie par jets moléculaires, l'ALD, ou encore l'ablation laser. La plus précise de ces techniques d'évaporation atomique est l'épitaxie par jets moléculaires (MBE), où la structure cristallographique est parfaitement maîtrisée puisque le réseau cristallin du matériau déposé s'accorde avec celui du substrat. Les dépôts sont réalisés sous vide afin d'éliminer les impuretés pouvant s'incruster sur les couches préparées. Par ailleurs, l'utilisation de jets permet le choix des matériaux à déposer et leur empilement.

L'effort consenti pour développer les techniques de conception des matériaux, s'accompagne d'un effort parallèle pour la compréhension et l'étude des phénomènes physiques mis en jeu, grâce aux techniques de caractérisation qui diffèrent selon l'information recherchée. Ainsi, la microscopie électronique à balayage (en anglais: SEM), la microscopie à force atomique (en anglais: AFM) et la microscopie à effet tunnel (en anglais: STM) sont utilisées pour recueillir des renseignements morphologiques décrivant la structure locale d'une surface aperiodique, tandis que dans le cas des structures périodique, on a recours à la diffraction des photons ou d'électrons.

La simulation numérique des phénomènes physiques de son côté, a induit une véritable révolution scientifique permettant d'étudier le fonctionnement et les propriétés d'un système, et de prédire son évolution. Mais la problématique principale réside dans le choix des modèles physiques et dans la conception de méthodes numériques efficaces. La confrontation des résultats prédits avec des données expérimentales constitue un moyen incontournable de vérification des modèles théoriques élaborés.

Dans ce travail, nous présentons une étude théorique basée sur des simulations numériques, utilisant le formalisme développé par Landauer-Büttiker, et appliqué initialement pour le transport électronique. L'étude sera menée à l'aide de la méthode de raccordement qui permettra de prendre en considération le problème de la brisure de symétrie causée par les surfaces en contact de ces systèmes. Nous utiliserons l'approche basée sur la dynamique vibrationnelle classique de Newton, dans l'approximation harmonique. Dans le domaine des petites longueurs d'onde, les phonons sont sensibles à la structure microscopique des surfaces et des interfaces. Les mesures des courbes de dispersion sont sources d'informations concernant ces structures et les forces interatomiques des différents matériaux mis en jeu. Plus largement, l'étude de la dynamique vibrationnelle de ces systèmes nous donnera accès à certaines grandeurs physiques essentielles, telles que la conductance phononique, les densités d'états, etc.

Cette thèse s'articule autour de quatre chapitres.

Le premier chapitre présente le cadre théorique qui traite de la dynamique des systèmes cristallins. Il est subdivisé en deux parties : la première est consacrée aux rappels des principales notions cristallographiques. Nous avons également exposé les étapes à suivre dans l'écriture de l'équation du mouvement d'un atome dans son environnement élastique. La deuxième partie est réservée à la description de la théorie gouvernant les déplacements atomiques et la dynamique des réseaux. L'accent est mis sur la technique de raccordement du fait qu'elle sera appliquée par la suite. Une attention particulière est accordée à la théorie des ondes élastiques et aux mouvements atomiques dans les structures cubiques de type cc et cfc parfaites et présentant des défauts mono et multi-interfaces. La démarche théorique est rappelée et les différentes étapes de la mise en œuvre de la méthode pour déterminer les différents spectres de vibration tels que les états localisés de vibration, les coefficients de transmission/réflexion, la conductance phononique et les densités d'états phononiques sont retracées.

Dans le deuxième chapitre, nous avons examiné la dynamique des structures parfaites, ce qui a permis de déterminer les modes propageants des systèmes sous étude et de tracer les

courbes de dispersion et les vitesses de groupe correspondantes à chacun des maillages cc et cfc, utilisées pour la normalisation des grandeurs physiques calculées dans les chapitres suivants. Dans une seconde phase, nous avons présenté les résultats relatifs aux calculs des spectres de vibration des systèmes cubiques mono-interface, reliant deux systèmes semi-infinis de même maillage. Les différentes équations permettant de déterminer les grandeurs physiques sont détaillées.

La dynamique vibrationnelle des structures cubiques contenant plusieurs zones d'interfaces fera l'objet du troisième chapitre. En particulier, nous nous intéresserons aux mouvements des ondes élastiques via des lames atomiques minces insérées en sandwich dans les structures cubiques de même type, où chaque lame (film ultramince) est composée de cinq plans atomiques. La première structure examinée est de type A/B/A, obtenue par raccordement de deux systèmes semi-infinis par un film ultramince et à maillage semblable à celui des systèmes situés de part et d'autre.

Dans le but de connaître l'influence et l'impact du nombre de zones assurant la nanojonction, nous avons augmenté le nombre de films minces insérés, en considérant quatre zones d'interfaces dans la deuxième partie, ce qui définit la seconde structure examinée qui est de type A/B/A/B/A. Les états localisés, les coefficients de transmission/réflexion, la conductance phononique et les densités d'états phononiques sont également déterminés.

Le quatrième chapitre est présenté sous forme d'application. Il est réservé à l'étude du transfert thermique à travers un film métallique ultramince en aluminium joignant deux sous-systèmes semi infinis semi-conducteurs au silicium. Nous avons examiné l'effet de la variation du nombre de plans atomiques qui composent le film ultramince sur la transmittance phononique et la conductivité thermique du système. Nous examinerons, aussi, l'effet de la variation de la température dans un domaine bien déterminé sur la transmittance phononique. Nos résultats numériques sont obtenus à l'aide des programmes élaborés par nous-mêmes. Nous terminerons par une conclusion générale et la présentation de quelques perspectives.

# CHAPITRE I

## Cadre théorique de la dynamique des réseaux cristallins

### Sommaire

---

#### I. Rappels cristallographiques

##### I.1. Réseau cristallin

##### I.2. Détermination expérimentale des structures cristallines

##### I.3. Les liaisons atomiques

##### I.4. Les défauts cristallins

#### II. Dynamique du réseau

##### II.1. Notions de vibration cristalline

##### II.2. Construction de l'Hamiltonien et approximations

#### III. Dynamique vibrationnelle d'un système parfait

##### III.1. Méthode classique

##### III.2. Zone de Brillouin

#### IV. Dynamique vibrationnelle d'un système perturbé

##### IV.1. Méthodes théoriques

##### IV.2. Principe de la méthode de raccordement

##### IV.3. Etats localisés de phonons

##### IV.5. Densité spectrale et densité d'état vibrationnelle

#### V. Etude de la diffusion

##### V.1. Coefficients de transmission et de réflexion

##### V.2. La conductance phononique

#### VI. Approche quantique

---

## I. Rappels cristallographiques

Ce chapitre est une introduction aux notions de base concernant les phonons et les propriétés dynamiques des structures à maillage cubique. Ces dernières sont essentielles à la compréhension des travaux menés dans le cadre de cette thèse.

Le but est de rappeler les propriétés découlant de la dynamique des réseaux et d'énoncer les principales théories utilisées pour étudier le mouvement des atomes dans de telles structures. Au préalable, un petit rappel des principales notions de cristallographie s'impose en raison de la grande simplification du traitement des systèmes contenant un grand nombre d'atomes, due à la périodicité [1]. De plus, de nombreux matériaux technologiques tels que les multicouches, sont fabriqués sous forme cristalline avec un degré d'ordre et de pureté remarquable [2].

### I.1. Réseau cristallin

#### i) Réseau direct

La forme sous laquelle se trouve la matière est déterminée par les interactions entre ses particules constitutives (atomes, molécules ou ions). Les gaz, la plupart des liquides et certains solides existent sous l'état désordonné (à certaines températures), tandis que dans l'état ordonné on retrouve les solides cristallisés.

L'état cristallin résulte de la répétition périodique dans les trois dimensions de l'espace de motifs atomiques ou moléculaires élémentaires appelés mailles. Cette dernière est délimitée par un ensemble de points qu'on appelle nœuds. L'ensemble des nœuds constitue le réseau cristallin. Il existe une infinité de mailles élémentaires possibles, mais il n'en existe qu'une seule qui reflète la symétrie du réseau, c'est la cellule de Wigner Seitz [3].

La cellule de Wigner Seitz s'obtient aisément en choisissant un point du réseau et en traçant les plans bissecteurs des lignes reliant les différents voisins du point central.

Un cristal se caractérise, d'une part par son réseau périodique (appelé réseau de Bravais) et d'autre part par le motif attaché à chaque nœud de ce réseau. Le réseau peut être décrit par une base formée de trois vecteurs  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ .

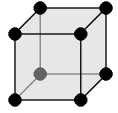
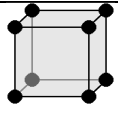
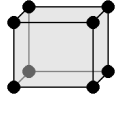
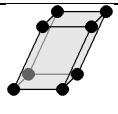
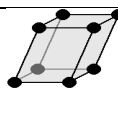
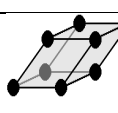
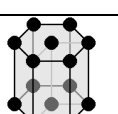
$\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  sont les angles entre ces vecteurs pris deux à deux.

Chaque nœud du réseau est alors repéré par 3 entiers relatifs  $n_1, n_2, n_3$  ( $\in \mathbb{Z}$ ) :

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

Les modes de répétition peuvent s'inscrire dans une classification en sept systèmes cristallins et 14 modes de réseaux, appelés réseaux de Bravais [4], en particulier 3 systèmes cubiques : cubique simple (cs), cubique centré (cc) et cubique à faces centrées (cfc). La plupart des métaux cristallisent en cc ou cfc.

Les sept systèmes cristallins sont illustrés dans le tableau ci-dessous [4] :

Système	Maille élémentaire	Schéma
<i>Le système cubique (ou isométrique)</i>	$a = b = c$ : les trois axes sont de même longueur. $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ : les trois angles sont égaux et droits.	
<i>Le système quadratique (ou tétragonal)</i>	$a = b \neq c$ : deux axes sont de même longueur. $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ : les trois angles sont égaux et droits.	
<i>Le système orthorhombique</i>	$a \neq b \neq c$ : les trois axes sont de longueurs inégales. $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ : Les trois angles sont égaux et droits.	
<i>Le système monoclinique</i>	$a \neq b \neq c$ : les trois axes sont de longueurs inégales. $\beta = \gamma = 90^\circ \neq \alpha$ : deux angles sont égaux et droits.	
<i>Le système triclinique</i>	$a \neq b \neq c$ : les trois axes sont de longueurs inégales. $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ : les trois angles sont différents et non droits.	
<i>Le système rhomboédrique</i>	$a = b = c$ : les trois axes sont de même longueur. $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ : les trois angles sont égaux et non droits.	
<i>Le système hexagonal</i>	$a = b \neq c$ : deux axes sont de même longueur $\alpha = \beta = 90^\circ$ et $\gamma = 120^\circ$ : deux angles sont égaux et droits, le troisième vaut $120^\circ$ .	

## ii) Réseau réciproque

La description des phénomènes de propagation se produisant dans une structure périodique nécessite l'introduction d'un nouveau réseau, à partir du réseau cristallin, qui en conserve les symétries. Ce réseau n'a pas de signification physique réelle, mais il est commode pour simplifier certains calculs, et indispensable pour l'interprétation des phénomènes de diffraction [5].

A partir du réseau direct, caractérisé par les trois vecteurs de translation élémentaire  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  et  $\vec{c}$ , on construit un réseau imaginaire  $\vec{a}^*$ ,  $\vec{b}^*$  et  $\vec{c}^*$  reliés au réseau direct par une relation de réciprocité.

Soit  $V_c = \vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})$  le volume de la maille primitive du réseau cristallin.

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{b} \wedge \vec{c} \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{c} \wedge \vec{a} \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a} \wedge \vec{b} \quad (1.2)$$

Ainsi chaque vecteur primitif du réseau réciproque est orthogonal à 2 vecteurs primitifs du réseau cristallin :

$$\begin{aligned} \vec{a}^* \cdot \vec{a} &= 2\pi & \vec{a}^* \cdot \vec{b} &= 0 & \vec{a}^* \cdot \vec{c} &= 0 \\ \vec{b}^* \cdot \vec{a} &= 0 & \vec{b}^* \cdot \vec{b} &= 2\pi & \vec{b}^* \cdot \vec{c} &= 0 \\ \vec{c}^* \cdot \vec{a} &= 0 & \vec{c}^* \cdot \vec{b} &= 0 & \vec{c}^* \cdot \vec{c} &= 2\pi \end{aligned} \quad (1.3)$$

Les vecteurs  $\vec{G} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$  ( $h, k, l$  entiers) définissent les vecteurs du réseau réciproque.

### iii) Zone de Brillouin

Une zone de Brillouin est un sous-ensemble de l'espace réciproque de volume minimal permettant de décrire entièrement les fonctions périodiques (par exemple l'énergie des électrons) dans cet espace [4].

La première zone de Brillouin est la cellule de Wigner-Seitz du réseau réciproque, c'est à dire qu'elle est formée de l'ensemble des points qui sont plus proches d'un point  $G_0$  du réseau réciproque (généralement  $G_0 = (0, 0, 0)$ ), que de n'importe quel autre point  $G$ . On peut la construire en traçant les plans bissecteurs des vecteurs joignant  $G_0$  à un point  $G$  quelconque du réseau réciproque.

## I.2. Détermination expérimentale des structures cristallines

L'observation du réseau cristallin nécessite l'utilisation d'un rayonnement dont la longueur d'onde est de l'ordre de la distance interatomique, soit quelques angströms. C'est le cas des rayons X, des faisceaux d'électrons accélérés ou encore des neutrons thermiques.

### i) Rayons X

En raison de leur faible coefficient d'absorption et leur important pouvoir de pénétration, les rayons X sont très utilisés dans l'étude de la structure cristalline par diffraction.

**ii) Neutrons**

L'avantage des neutrons est leur faible interaction, et l'analyse de la diffraction peut alors être très précise. Ce qui fait de la diffraction des neutrons lents une méthode très intéressante, mais elle exige des équipements expérimentaux beaucoup plus lourds. C'est une méthode complémentaire de la diffraction des rayons X, vu qu'elle permet de déterminer la position des atomes légers, tandis que la diffraction des rayons X permet de localiser les atomes lourds [5].

Notons aussi que les neutrons, à cause de leurs moments magnétiques, interagissent avec les moments magnétiques des atomes du solide.

**iii) Electrons**

Comme les faisceaux d'électrons sont chargés et interfèrent de manière importante avec la matière, il est impossible d'analyser par cette technique le cristal en profondeur. Par conséquent, ils sont surtout utilisés pour l'étude des surfaces et des couches fines des solides.

**I.3. Les liaisons atomiques**

L'organisation cristalline réduit au minimum l'énergie d'interaction entre les atomes d'un corps solide, d'où sa stabilité. En fonction du degré d'interaction entre les atomes, un des trois états peut se former : gaz, liquide ou solide. Dans l'état gazeux, il y a peu ou pas de résistance au mouvement des atomes ou des molécules, dans l'état liquide, la résistance est beaucoup plus importante mais les molécules peuvent se déplacer aisément. Par contre, dans l'état solide, le mouvement des atomes et des molécules est restreint à des vibrations localisées, bien que certains mouvements soient possibles par diffusion.

Selon les matériaux, les liaisons entre les atomes sont de trois types : les liaisons ioniques (comme le sel de cuisine), les liaisons covalentes (typiques du carbone et des semi-conducteurs) et les liaisons métalliques (métaux et alliages, liaison hydrogène et les liaisons de Van Der Waals).

**i) La liaison ionique**

Résulte de l'attraction électrostatique entre ions de signes contraires. Elle est basée sur le transfert d'un ou plusieurs électrons de la couche périphérique d'atomes métalliques donateurs d'électrons, vers la couche périphérique d'atomes non métalliques accepteurs

d'électrons. A titre d'exemple de structures cristallines de type ionique, on citera le chlorure de sodium et le chlorure de césium.

### **ii) La liaison covalente**

Résulte du partage des électrons périphériques qui se déplacent sur des orbitales communes entre deux non-métaux à la fois donneurs et accepteurs d'électrons. Les non métaux les plus souvent impliqués dans ces liaisons sont : l'oxygène, le carbone, le silicium, etc.

### **iii) La liaison métallique**

Concerne les atomes ayant peu d'électrons périphériques faiblement liés au noyau. Ces électrons peuvent facilement être arrachés pour former un nuage électronique dans lequel sont noyés les ions positifs résultants des atomes après la perte d'électrons. Le nuage électronique assure la cohésion du métal. Cette liaison favorise la création de structures cristallines simples, de grande symétrie et très compactes. La compacité maximale est atteinte dans les structures cubiques à faces centrées et hexagonales compactes. Il existe un troisième type, le réseau cubique centré. La majorité des métaux purs, constitués d'un seul type d'atome, cristallisent dans le système cubique en fonction de la température. A titre d'exemple, on citera le Cu, Ag, Al, Au, Ni, Pt, Pb, Fe- $\gamma$  qui cristallisent dans le réseau cfc (cubique à faces centrées) et le Fe- $\alpha$ , Mn, Cr, V, Mo, Ta, Ti- $\beta$  qui sont à maillage cc (cubique centré). Une autre structure est aussi possible pour d'autres métaux comme Ti- $\alpha$ , Mg, Zr, Cd, Zn, Be qui sont de type hexagonal compact (hc). Selon l'intervalle de température considéré, un même élément peut présenter plusieurs structures cristallines. C'est l'exemple du fer qui est cubique centré dans les intervalles de températures de  $-273^{\circ}\text{C}$  à  $912^{\circ}\text{C}$  et  $1394^{\circ}\text{C}$  à  $1538^{\circ}\text{C}$ , et cubique à faces centrées dans l'intervalle  $912^{\circ}\text{C}$  à  $1314^{\circ}\text{C}$  [6].

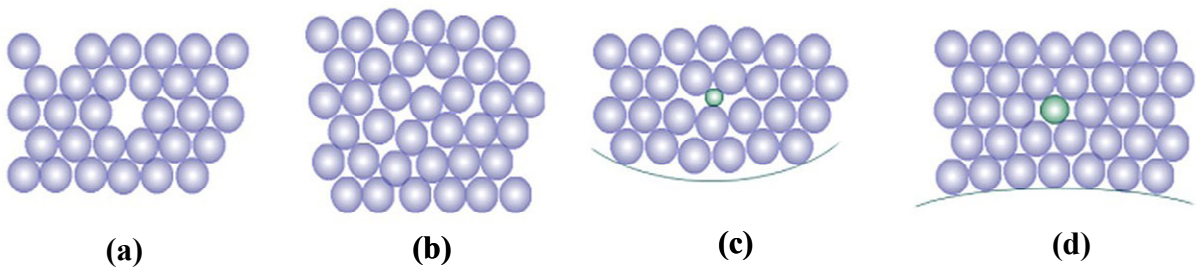
## **I.4. Les défauts cristallins**

Dans la réalité, le cristal parfait n'existe pas. Tous les milieux cristallins présentent des défauts qui régissent une grande partie des propriétés des matériaux. Ces défauts ne doivent pas a priori être considérés comme indésirables. Au contraire, des cristaux parfaits seraient le plus souvent dénués de toutes propriétés intéressantes. On ne peut pas fabriquer par exemple des transistors avec du silicium parfait, ou bien obtenir des aimants permanents à partir de fer parfait, etc. Les matériaux cristallins sont parfois intéressants par leurs défauts. L'impact de leur présence dans un matériau va varier selon la nature du matériau et le type

du défaut. Il existe quatre sortes de défauts cristallins que nous allons décrire sommairement.

### *i)* Défauts ponctuels

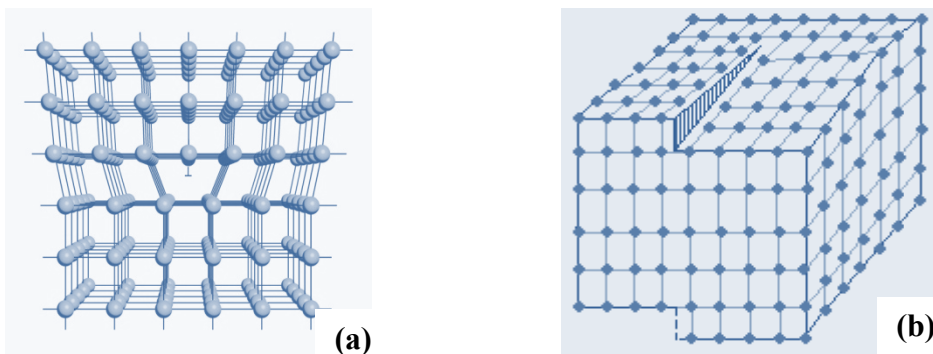
Ce sont des perturbations localisées du réseau à l'échelle atomique en des points isolés du cristal qu'on peut considérer de dimensions zéro. Ils sont de plusieurs types dont les plus importants sont les lacunes, les interstitiels et les atomes en substitution. Ils sont schématisés sur la figure ci-dessous.



**Figure (1.1) :** Illustration de défauts ponctuels.  
(a) lacune, (b) auto-interstitiel, (c) hétéro-interstitiel, (d) atome de substitution.

### *ii)* Défauts linéaires

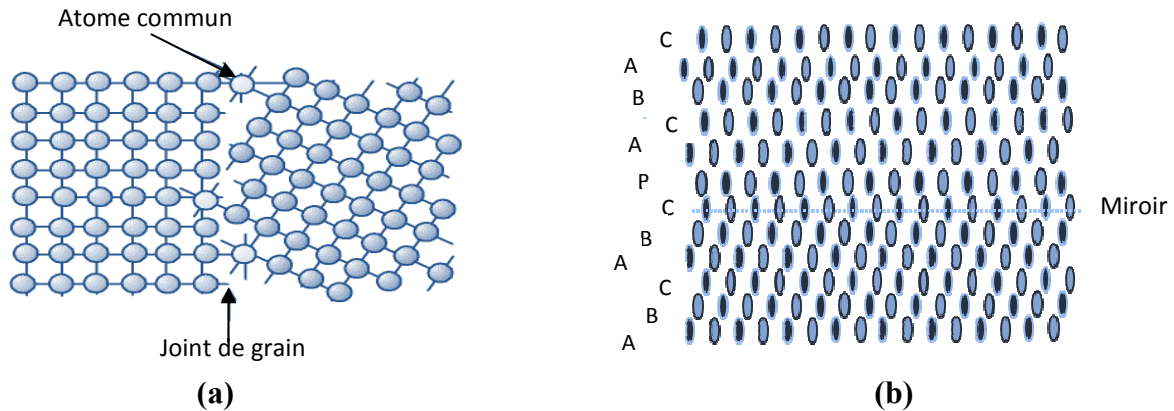
Les dislocations sont des défauts linéaires, présentant une allure filiforme. Ce sont des défauts de dimension un, et résultent de la déformation du matériau : traction, contraction, torsion et conduisent à des déformations plastiques. Il existe deux types de dislocations, dislocation coin et dislocation vis. Elles sont représentées sur la figure ci-dessous.



**Figure (1.2) :** Illustration de défauts linéaires  
(a) Dislocation coin, (b) Dislocation vis.

**iii) Défauts plans**

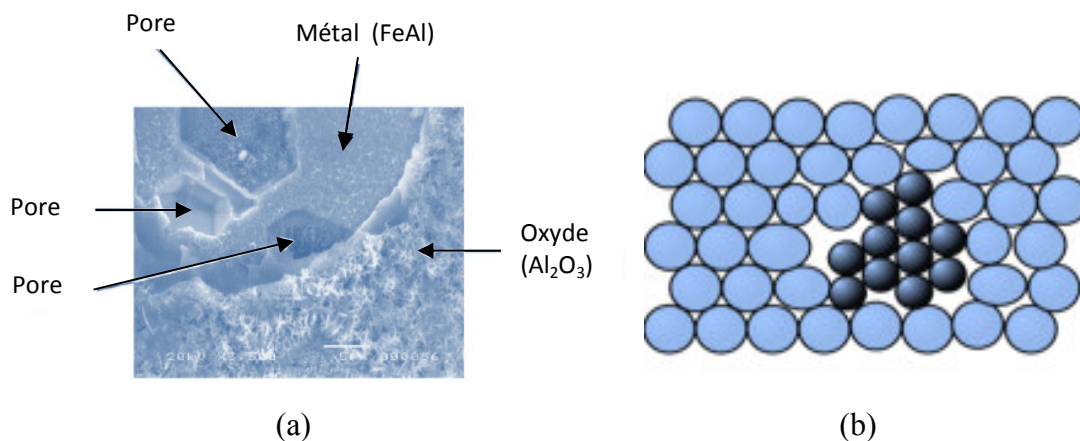
Les défauts plans sont des défauts bidimensionnels. Ce ne sont pas des défauts internes au cristal mais le résultat de plusieurs monocristaux accolés les uns aux autres pour former des polycristaux. Les zones de raccordement des deux cristaux d'orientations différentes sont appelées joints de grains.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



**Figure (1.3)** : Illustration de défauts plans  
(a) Joint de grain, (b) Macles.

**iv) Défauts à trois dimensions**

Les défauts tridimensionnels sont le résultat du remplacement d'une partie du cristal par un volume d'un composé différent qui peut être essentiellement un précipité, une inclusion ou des pores.



**Figure (1.4)** : Illustration de défauts à trois dimensions  
(a) Pores, (b) Précipités.

## II. Dynamique du réseau

En cristallographie, des positions bien définies sont assignées aux atomes constituant le réseau. En réalité, la situation est beaucoup plus complexe et les atomes ne sont pas figés dans leurs positions [7]. En effet, le solide renferme plusieurs formes d'énergie issues essentiellement du mouvement rotatoire des molécules, du mouvement oscillatoire des atomes et du déplacement et excitations des électrons. Grâce aux forces interatomiques qui assurent la cohésion du cristal, le mouvement des atomes se transmet de proche en proche d'où la vibration du réseau cristallin et le transport de l'énergie dans le solide. Les vibrations atomiques peuvent être d'origine thermique ou bien sous forme d'excitation électromagnétique ou d'autres excitations.

A température ambiante, l'amplitude du mouvement vibratoire des atomes est de l'ordre de 5 à 10% d'une distance interatomique. Des oscillations cristallines persistent même à température nulle. Ces vibrations ont une grande importance pour l'étude des propriétés électriques des solides car elles modifient le potentiel cristallin dans lequel évoluent les électrons, ce qui perturbe leur mouvement. Avec la dynamique du réseau, on peut décrire certaines propriétés d'un solide comme la chaleur spécifique, la dilatation thermique ou la réponse en présence d'une radiation.

### II.1. Notions de vibration cristalline

Le phonon est l'énergie minimale associée à un mode de vibration cristalline. C'est une notion de la mécanique quantique basée sur le concept de dualité onde-corpuscule, car, bien que les modes normaux de vibration soient des entités de type ondulatoire en mécanique classique, ils peuvent acquérir en partie un comportement de type particulière quand le réseau est traité d'un point de vue quantique. Lorsque l'on considère un ensemble d'atomes reliés entre eux, il apparaît que l'état vibratoire de ce réseau est quantifié. Cet état peut être représenté par un paquet d'énergie considéré comme des quasi-particules appelées phonons, par analogie au quantum d'énergie associé à une onde électromagnétique, le photon. La vibration de tous les atomes d'un solide à une fréquence donnée est appelée mode propre ou mode normal de vibration [8]. Cela signifie que chacun de ces modes peut vibrer indépendamment des autres modes. Leur nombre dépend de la structure du solide, de ses constituants ainsi que des conditions aux limites. Il est égal au nombre de sites par cellule unitaire que multiplie le nombre de degrés de liberté.

## II.2. Construction de l'Hamiltonien et approximations

Un système physique dans son état fondamental, constitué de  $N_i$  noyaux et  $N_e$  électrons en interaction, est décrit par l'équation de Schrödinger indépendante du temps suivante :

$$H_T(\vec{r}, \vec{R})\psi(\vec{r}, \vec{R}) = E_T\psi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (1.4)$$

$\psi(\vec{r}, \vec{R})$  est la fonction propre de l'Hamiltonien  $H_T$  associé à la valeur propre  $E_T$  dépendant simultanément de la position de tous les électrons et de tous les noyaux. La dépendance des variables de spin des particules mises en jeu n'est pas prise en compte, vu que l'Hamiltonien n'agit pas sur elle directement.

$E_T$  est la valeur propre associée à la fonction propre  $\psi(\vec{r}, \vec{R})$  correspondant à un état stationnaire permis.

$H_T$  est l'Hamiltonien du système dans l'approximation non relativiste qui s'écrit sous la forme

$$H_T(\vec{r}, \vec{R}) = T_i(\vec{R}) + U_{ii}(\vec{R}) + T_e(\vec{r}) + U_{ee}(\vec{r}) + U_{ie}(\vec{r}, \vec{R}) \quad (1.5)$$

Où  $T_i(\vec{R})$  et  $T_e(\vec{r})$  sont les opérateurs décrivant le comportement cinétique des noyaux et des électrons, respectivement. Les opérateurs  $U_{ii}(\vec{R})$  et  $U_{ee}(\vec{r})$  désignent les opérateurs d'énergie potentielle électrostatiques répulsives noyau-noyau et électron-électron.  $U_{ie}(\vec{r}, \vec{R})$  est l'opérateur d'interaction ressenti par les électrons placés dans le champ positif des noyaux. Les électrons sont de masse  $m_e$  et de charge  $e$ . Les noyaux sont de masse  $M_n$  et de numéro atomique  $Z_A$ .  $\vec{R}$  désigne la position des noyaux ( $\vec{R}_{n\alpha}$ , avec  $\alpha = 1, 2, 3$  et  $n = 1, \dots, N_i$ ),  $\vec{r}$  réfère à la position des électrons ( $\vec{r}_{j\alpha}$ , avec  $\alpha = 1, 2, 3$  et  $j = 1, \dots, N_e$ ) de sorte que :

$$T_i(\vec{R}) = -\sum_n \frac{1}{2M_n} \vec{\nabla}_{\vec{R}_n}^2 \quad (1.6)$$

$$U_{ii}(\vec{R}) = \sum_{n \langle n'} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_{An} Z_{An'}}{|\vec{R}_n - \vec{R}_{n'}|} \quad (1.7)$$

$$T_e(\vec{r}) = -\sum_i \frac{1}{2m_e} \vec{\nabla}_{\vec{r}_i}^2 \quad (1.8)$$

$$U_{ee}(\vec{r}) = \sum_{i \neq j} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.9)$$

$$U_{ie}(\vec{r}, \vec{R}) = -\sum_{i,n} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_{An}e}{|\vec{r}_i - \vec{R}_n|} \quad (1.10)$$

La complexité des systèmes à plusieurs corps s'avère très importante et l'équation obtenue ne pourra être résolue que moyennant des approximations simplificatrices [9], sur l'Hamiltonien et sur la fonction d'onde  $\psi$ .

### II.2.1. Approximation de Born Oppenheimer

L'approximation principale qui permettra de découpler le mouvement des électrons de celui des noyaux sera celle élaborée conjointement par Born et Oppenheimer en 1927 [10]. Elle consiste à prendre en compte l'énorme différence de masse qui existe entre les noyaux et les électrons ( $m_p = 1836 m_e$ ), et à considérer dans l'étude du mouvement des électrons que les noyaux sont fixes. L'étude du mouvement des électrons nécessite un traitement quantique, tandis qu'un traitement classique permet de traiter les noyaux démunis de leurs électrons et de mettre en évidence la dynamique vibrationnelle des ions autour de leurs positions d'équilibre. Il faut en revanche, faire appel à la mécanique quantique pour en quantifier l'énergie. Ces quantas d'énergie de vibration sont les phonons définis précédemment.

Cette approche permet de négliger le terme correspondant à l'énergie cinétique des noyaux  $T_i(\vec{R})$  dans l'expression de l'Hamiltonien qui s'écrira :

$$H(\vec{r}, \vec{R}) = U_{ii}(\vec{R}) + T_e(\vec{r}) + U_{ee}(\vec{r}) + U_{ie}(\vec{r}, \vec{R}) \quad (1.11)$$

La fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, \vec{R})$  sera aussi séparée en deux parties. La partie électronique et la partie nucléaire.

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}) = \phi(\vec{r}, \vec{R})\varphi(\vec{R}) \quad (1.12)$$

Les positions  $\vec{R}$  des noyaux sont considérées comme des paramètres pour la fonction d'onde  $\phi$ , puisque  $H(\vec{r}, \vec{R})$  n'inclut pas d'opérateur différentiel par rapport aux positions atomiques, par conséquent  $U_{ii}(\vec{R})$  agit uniquement sur  $\varphi(\vec{R})$ . On obtient :

$$H(\vec{r}, \vec{R})\phi(\vec{r}, \vec{R}) = E(\vec{R})\phi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (1.13)$$

Où  $E$  est l'énergie de Born-Oppenheimer du système. La minimisation de cette énergie permet de déterminer les positions des noyaux correspondant à l'état fondamental.

### II.2.2. Hypothèses fondamentales

Soit  $\vec{L}$  un vecteur qui décrit tous les points appartenant à un réseau de Bravais, tel que

$$\vec{L}(n) = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad (1.14)$$

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

La position moyenne  $\vec{R}$  d'un atome  $n$  de la base, dans la cellule primitive spécifiée par  $\vec{L}$  est donnée par

$$\vec{R}_n(\vec{L}) = \vec{L} + \vec{d}_n \quad (1.15)$$

Où  $\vec{d}_n$  est la position de l'atome  $n$  à l'équilibre à l'intérieur de la cellule primitive repérée par  $\vec{R}_n(\vec{L})$ .

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

$$\vec{R}_n(\vec{L}, t) = \vec{L} + \vec{d}_n + \vec{u}_n(T, t) \quad (1.16)$$

Où  $\vec{u}_n(\vec{L}, t)$  est le déplacement instantané de l'atome considéré  $n$  par rapport à la position d'équilibre, et peut varier d'une cellule à une autre.  $t$  est la variable du temps.

### II.2.3. Approximation harmonique

La détermination des positions d'équilibre revient à minimiser l'énergie  $E$  de Born-Oppenheimer, définie précédemment. Dans l'hypothèse où les déplacements sont faibles par rapport à la distance interatomique, on peut effectuer un développement en série de Taylor.

$$E(\vec{r}_n^a) = E(\vec{R}_n^a) + \sum_{n\alpha} \frac{dE}{d\vec{r}_{n\alpha}^a} \vec{u}_{n\alpha}^a + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n\alpha \\ n'\beta}} \frac{d^2E}{d\vec{r}_{n\alpha}^a d\vec{r}_{n'\beta}^b} \vec{u}_{n\alpha}^a \vec{u}_{n'\beta}^b + \dots \quad (1.17)$$

Les exposants :  $a, b$  désignent les différentes mailles du cristal,  $n$  et  $n'$  repèrent les différents atomes de la maille et les indices  $\alpha, \beta$  désignent les trois directions de l'espace ( $ox, oy$  et  $oz$ ).  $E(\vec{R}_n^a)$  est l'énergie du cristal, sans tenir compte des vibrations (réseau statique) dans sa position d'équilibre. Etant constante, elle est sans intérêt pour la description des vibrations atomiques puisqu'on s'intéresse aux variations d'énergie autour de positions d'équilibre données.

$$\frac{dE}{d\vec{r}_{n\alpha}^a} \vec{u}_{n\alpha}^a = -\vec{F}_{n\alpha} \quad (1.18)$$

L'équation précédente est la dérivée de l'énergie par rapport au déplacement atomique. Elle représente la force exercée sur l'ion considéré et qui s'annule aux positions d'équilibre.

L'approximation harmonique [11-12] revient à négliger dans le développement tous les termes d'ordre supérieur à deux, on aura dans ce cas

$$E(\vec{r}_n^a) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n\alpha \\ n'\beta}} \frac{d^2E}{d\vec{r}_{n\alpha}^a d\vec{r}_{n'\beta}^b} \vec{u}_{n\alpha}^a \vec{u}_{n'\beta}^b \quad (1.19)$$

Pour une paire d'atomes différents, on pose

$$\frac{d^2E}{d\vec{r}_{n\alpha}^a d\vec{r}_{n'\beta}^b} = K_{n\alpha, n'\beta}^{a,b} \quad (1.20)$$

Les coefficients  $K_{n\alpha, n'\beta}^{a,b}$  définissent les constantes de forces interatomiques.

#### II.2.4. Les constantes de force

Les constantes des forces interatomiques [13] sont étroitement liées aux constantes élastiques d'un matériau. En effet, le comportement élastique de la plupart des solides dans le cas de petites déformations obéit à la loi de Hooke [14]. C'est-à-dire, dans la notation d'Einstein :

$$T_{ij} = C_{ijkl} \times \mathcal{E}_{kl} \quad (1.21)$$

$C_{ijkl}$  est le tenseur des rigidités, de rang 4, donc a priori  $3^4 = 81$  composantes. La symétrie de  $T_{ij}$  et  $\mathcal{E}_{kl}$  impose que  $C_{jikl} = C_{ijlk}$  et  $C_{ijlk} = C_{ijkl}$ . Il n'y a donc que 36 composantes indépendantes au plus. Grâce aux symétries des cristaux cubiques, seules trois constantes sont nécessaires à la description du tenseur des constantes élastiques  $C_{ij}$  :  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  (notation de Voight [15] qui convertit les 2-uplets  $i, j$  en un 1-uplet  $k$  :  $11 = 1$ ,  $22 = 2$ ,  $33 = 3$ ,  $23 = 4$ ,  $31 = 5$  et  $12 = 6$ ).

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

**Tenseur des constantes élastiques pour un matériau cubique.**

Quatre méthodes principales ont été élaborées afin de calculer les constantes élastiques d'un solide. Les méthodes de calcul de l'énergie élastique et du tenseur des contraintes sont basées sur la théorie de la réponse linéaire [16]. Les deux autres méthodes ont été proposées par Squire et par Parinello et Rahman [17] moyennant le calcul des fluctuations de certaines grandeurs.

L'une des méthodes les plus concluantes est celle développée par Squire et *al.* [18] pour des cristaux parfaits à différentes températures, à partir de la fonction de partition du système.

$$C_{ijkl} = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial^2 A}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \right) \quad (1.22)$$

$A = -k_B T \ln(z)$  est l'énergie libre de Helmholtz et  $z$  est la fonction de partition du système.

$$z = \frac{(2\pi M k_B T)^{3N/2}}{h^{3N}} \int \dots \int dx^1 \dots dx^M \exp \left( \frac{-\sum_{ij} E(r_{ij})}{k_B T} \right) \quad (1.23)$$

Où  $M$  est la masse des particules,  $N$  leur nombre,  $T$  est la température du système et  $E(r_{ij})$  est l'énergie d'interaction entre les particules  $i$  et  $j$ .

On obtient dans le cas d'un matériau cubique [18] :

$$C_{11} = \frac{1}{Vk_B T} \left\{ \left\langle \sum \frac{E'}{r} \Delta x^2 \right\rangle^2 - \left\langle \left( \sum \frac{E'}{r} \Delta x^2 \right)^2 \right\rangle \right\} + \frac{1}{V} \left\langle \sum \frac{E''}{r^2} \Delta x^4 \right\rangle - \frac{1}{V} \left\langle \sum \frac{E'}{r^3} \Delta x^4 \right\rangle + \frac{2Nk_B T}{V} \quad (1.24)$$

$$C_{12} = \frac{1}{Vk_B T} \left\{ \left\langle \sum \frac{E'}{r} \Delta x^2 \right\rangle \left\langle \sum \frac{E'}{r} \Delta y^2 \right\rangle - \left\langle \left( \sum \frac{E'}{r} \Delta x^2 \right) \left( \sum \frac{E'}{r} \Delta y^2 \right) \right\rangle \right\} \\ + \frac{1}{V} \left\langle \sum \frac{E''}{r^2} \Delta x^2 \Delta y^2 \right\rangle - \frac{1}{V} \left\langle \sum \frac{E'}{r^3} \Delta x^2 \Delta y^2 \right\rangle \quad (1.25)$$

$$C_{44} = \frac{1}{Vk_B T} \left\{ \left\langle \sum \frac{E'}{r} \Delta x \Delta y \right\rangle^2 - \left\langle \left( \sum \frac{E'}{r} \Delta x \Delta y \right)^2 \right\rangle \right\} \\ + \frac{1}{V} \left\langle \sum \frac{E''}{r^2} \Delta x^2 \Delta y^2 \right\rangle - \frac{1}{V} \left\langle \sum \frac{E'}{r^3} \Delta x^2 \Delta y^2 \right\rangle + \frac{Nk_B T}{V} \quad (1.26)$$

$$\text{Où } \Delta x = (x_i^p - x_i^q)(x_j^p - x_j^q)(x_k^p - x_l^q)(x_k^p - x_l^q)$$

$x_i^p$  sont les 3 coordonnées  $x$ ,  $y$  et  $z$  de la particule  $p$ , et  $E'$  et  $E''$  sont les dérivées première et seconde de l'énergie d'interaction entre les particules  $p$  et  $q$ .

### III. Dynamique vibrationnelle d'un système parfait

Dans le dernier chapitre de cette thèse consacré au transport thermique par les phonons, nous verrons qu'il est essentiel de décrire quantiquement les vibrations du réseau. Cependant, les résultats obtenus dans le cadre d'une description classique, pourront être transposés sans difficulté au cas quantique, et s'accordent parfaitement avec les résultats expérimentaux. C'est la raison pour laquelle on s'attache dans ce qui suit, à décrire classiquement les vibrations du réseau.

#### III.1. Méthode classique

Les forces interatomiques définissent l'arrangement spécifique des atomes du réseau dans le cristal et jouent le rôle de ressorts reliant des paires d'atomes dans l'approche classique. L'analogie mécanique de ce modèle est un ressort dont la force de rappel est dirigée le long de la ligne joignant deux atomes et couple leurs mouvements. Concrètement, sous l'effet de la température ou d'une excitation quelconque (électromagnétique, mécanique...), les atomes vibrent tout en entraînant une modification du nuage électronique, dû à la force de rappel des atomes voisins qui tentent de le ramener à sa position d'équilibre. L'équation

régissant le mouvement d'un atome de masse  $m_n$  positionné sur le site  $n$  est donnée par la deuxième loi de Newton :

$$m_n \frac{d^2 \vec{u}(n,t)}{dt^2} = \sum_{n'} \vec{F}_{mn'} \quad (1.27)$$

L'indice  $n'$  désigne l'ensemble des sites adjacents au site  $n$ .

Nous adopterons dans notre étude, le modèle des forces centrales dans l'approximation harmonique [19-20]. L'équation (1.27) se mettra sous la forme :

$$m \frac{d^2 \vec{u}_\alpha(n,t)}{dt^2} = - \sum_{n' \neq n} \sum_{\beta} \left( \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) k(n,n') [\vec{u}_\beta(n,t) - \vec{u}_\beta(n',t)] \quad (1.28)$$

Où  $(\alpha, \beta = x, y, z)$ ,  $m = m_n$  est la masse de l'atome du site  $n$ ,  $\vec{u}_\alpha(n,t)$  l'amplitude de vibration.  $r_\alpha$  est la composante cartésienne selon la direction  $\alpha$  du vecteur  $\vec{r}(n,n')$  joignant les positions d'équilibre des atomes  $n$  et  $n'$ ,  $r$  est le module du vecteur  $\vec{r}(n,n')$ , et  $k(n,n')$  est la constante de force.

En raison de la périodicité du réseau, nous imposons les conditions aux limites périodiques de Born von Karman [1]. Dans ce cas, les solutions sont des ondes planes progressives de la forme :

$$\vec{u}_\alpha(n,t) = \vec{u}_\alpha(n) \times \exp i(\vec{q} \cdot \vec{r}(n,n') - \omega t) \quad (1.29)$$

Où  $\vec{u}_\alpha(n)$  est l'amplitude vibrationnelle de l'atome  $n$  suivant la direction  $\alpha$ ,  $\omega$  la fréquence de vibration.

En remplaçant l'expression  $\vec{u}_\alpha(n,t)$  dans l'équation (1.28), on obtient [19]

$$\omega^2 m \vec{u}_\alpha(n) = \sum_{n' \neq n} \sum_{\beta} \left[ \frac{\vec{r}_\alpha \vec{r}_\beta}{r^2} \right] k(n,n') [\vec{u}_\beta(n',\omega) - \vec{u}_\beta(n,\omega)] \quad (1.30)$$

L'équation précédente se décompose en un système de  $3N$  équations pour  $N$  atomes de la maille élémentaire. Elle se met sous la forme matricielle suivante

$$[\omega^2 I - D(\vec{q})] |u\rangle = 0 \quad (1.31)$$

$D(\vec{q})$  est la matrice dynamique de taille  $(3N \times 3N)$ , pour chaque vecteur d'onde  $\vec{q}$ , elle dépend des constantes de force entre les différents atomes,  $I$  est la matrice identité de même rang que la matrice  $D$ , et  $|u\rangle$  le vecteur propre du déplacement.

Pour déterminer les pulsations propres de vibration du système, il faut calculer les valeurs propres de la matrice dynamique.

Le système (1.31) admet des solutions non triviales si et seulement si :

$$\det[\omega^2 I - D(\vec{q})] = 0 \quad (1.32)$$

### III.2. Zone de Brillouin

Rappelons que seuls les vecteurs d'ondes situés dans la première zone de Brillouin correspondent à des ondes distinctes. La détermination des modes de vibration se limitera donc aux vecteurs d'ondes  $\vec{q}$  appartenant à cette zone. En effet, si l'on considère le rapport des déplacements de deux atomes successifs

$$\frac{\vec{u}_{n+1}}{\vec{u}_n} = \frac{ue^{iq(n+1)a}}{ue^{iqna}} = e^{iqa} \quad (1.33)$$

Quand  $qa$  varie de 0 à  $2\pi$ , ce rapport prend toutes ses valeurs possibles.

Considérons à présent un autre vecteur d'onde en dehors de la première zone de Brillouin, tel que

$$\vec{q}' = \vec{q} + \frac{2n\pi}{a} \quad (1.34)$$

Le rapport des déplacements sera égal à

$$\frac{\vec{u}_{n+1}}{\vec{u}_n} = e^{iq'a} = e^{i(qa+2n\pi)} = e^{iqa} \quad (1.35)$$

On en déduit que les vibrations décrites par les vecteurs  $\vec{q}$  et  $\vec{q}'$  sont identiques. Il s'en suit que la détermination des modes de vibration se limitera aux vecteurs d'ondes contenus dans la première zone de Brillouin, et seront caractérisés par l'ensemble des solutions  $\omega_s > 0$  avec  $s = 1, 2, \dots, 3N$ .

#### IV. Dynamique vibrationnelle d'un système perturbé

La brisure de symétrie d'un système physique signifie que la périodicité du cristal est rompue, et que les conditions aux limites de Born Von Karman ne sont plus applicables. En conséquence, la résolution de l'équation du mouvement devient délicate et nécessite une nouvelle approche qui permet de limiter le nombre d'inconnues [21].

##### IV.1. Méthodes théoriques

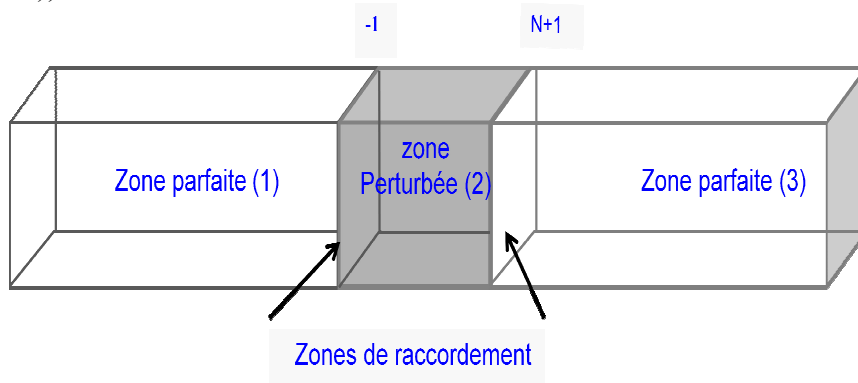
Plusieurs techniques de calculs ont été développées afin de remédier aux problèmes liés à l'étude de la dynamique vibrationnelle en présence de défauts dans les structures cristallines. Parmi les méthodes les plus utilisées, on peut citer, la méthode des fonctions de Green introduite par George Green [22] en 1850. Ce fut une méthode très utilisée notamment par Neumann en 1877 [23] pour sa théorie du potentiel Newtonien dans un espace à 2D, puis en 1882 par Kirchhoff [24], pour l'équation de propagation des ondes dans un espace à 3D, et par Helmholtz [25] en acoustique. Cette méthode consiste à annuler les interactions atomiques situées à gauche et à droite d'un plan bissecteur de deux plans atomiques consécutifs. Elle est considérée comme une perturbation d'un système initialement illimité. Les états vibrationnels du système perturbé sont alors donnés par les pôles d'une fonction mathématique déterminée à l'aide des matrices dynamiques des deux systèmes parfait et perturbé.

Une autre méthode introduite par Clark en 1965 [26] connue sous le nom de la méthode de diagonalisation directe (slab method) [27]. Cette méthode s'est avérée pratique pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des surfaces. Elle consiste à limiter les systèmes étudiés à un nombre fini de plans atomiques dans une seule direction. Ce nombre doit rester assez important afin qu'il puisse représenter une zone de volume. La matrice dynamique qui en découle se trouve elle aussi de taille importante ce qui augmente les temps de calcul et constitue l'inconvénient majeur de cette technique.

La méthode la plus appropriée à l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes perturbés est la méthode de raccordement (Matching method) [28-29], qui fut introduite par Feuchtwang en 1967 [30] lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini à 3D, puis développée par Khater et Szeftel en 1987 [28-31]. Elle s'est imposée par la suite, comme un outil incontournable dans la résolution des problèmes liés à la propagation des ondes élastiques dans les systèmes perturbés.

## IV.2. Principe de la méthode de raccordement

L'exécution de cette méthode requiert la subdivision du cristal en trois régions distinctes (figure (1.5)).



**Figure (1.5)** : Subdivision d'un cristal selon la méthode de raccordement.

Les zones (1) et (2) sont des régions parfaites, loin des effets de la perturbation. Les zones de raccordement délimitent la zone (3) qui est la région du défaut. Elles servent à relier les déplacements des atomes du défaut à ceux des régions parfaites.

On considère une onde incidente orientée de gauche à droite et un repère dont l'origine est fixée sur la position de la première colonne perturbée qu'on note (-1).

L'indice  $\bar{\nu}$  désignera toujours le mode incident. Pour un mode incident  $i < 0$ , les déplacements  $\bar{\nu}$  sont tel que

$$\bar{u}_{in}^i = (Z_{\bar{\nu}}^-)^i \bar{u}_{\bar{\nu}}^- \quad (1.36)$$

Où  $Z_{\bar{\nu}}^-$  est un facteur de phase satisfaisant la condition de propagation ou d'évanescence suivant la direction cartésienne  $\alpha$ , qui relie les vecteurs déplacements de deux atomes adjacents tel que

$$\bar{u}^{i\pm 1} = (Z_{\bar{\nu}}^-)^{i\pm 1} \bar{u}^i \text{ avec } Z_{\bar{\nu}}^- = e^{iq_{\alpha}a} = e^{i\varphi_{\alpha}} \quad (1.37)$$

On écrit les équations du mouvement des atomes de la région perturbée ainsi que celles des atomes des zones de raccordement, en utilisant l'expression des déplacements atomiques donnés dans l'équation (1.36) et (1.37), on peut mettre le résultat sous la forme matricielle suivante

$$[\Omega^2 I - D(r, e^{i\phi_y}, e^{i\phi_z})] \vec{u} = 0 \quad (1.38)$$

$r$  désigne le rapport des constantes de force des premiers et seconds voisins.  $\Omega^2 = \left( \frac{\omega}{\omega_0} \right)^2$

est la fréquence normalisée donnée en fonction de la fréquence caractéristique  $\omega_0$ , définie par  $\omega_0^2 = \frac{k_1}{m}$ , où  $k_1$  est la constante de force entre premiers voisins.  $D$  est la matrice

dynamique du système perturbé.

La condition de compatibilité du système parfait donne accès, pour chaque donnée  $(q, \Omega)$  à une équation séculaire en  $Z_l$  ( $Z_l$  est la composante de  $Z$  dans la direction de propagation ( $ox$ )) dont les solutions caractérisent les différents modes dans la zone parfaite suivant la direction normale à la zone contenant la brisure de symétrie.

On distingue trois cas :

Pour  $Z_l < 1$ , les solutions correspondent à des modes évanescents.

Pour  $Z_l > 1$ , les solutions correspondent des modes divergents.

Pour  $Z_l = 1$ , les solutions correspondent à des modes itinérants.

### IV.3. Etats localisés de phonons

Les états de phonons localisés pourront être déterminés en calculant en premier lieu les modes évanescents dans le domaine  $(q, \Omega)$ . Il faudra ensuite écrire les équations du mouvement des atomes appartenant aux sites représentatifs des trois régions définies auparavant. Le résultat est un système matriciel rectangulaire  $D_M$ , où le nombre d'équations est plus petit que le nombre de déplacements atomiques. Ce problème pourra être contourné moyennant une réduction du nombre de variables inconnues pour en déduire un système d'équations homogène. Ainsi, on décrit pour chaque donnée  $(q, \Omega)$  les déplacements atomiques par des ondes évanescents exprimées comme une combinaison linéaire sur les  $m$  modes vibrationnels de la région parfaite suivant la direction normale au défaut.

Ces  $m$  modes correspondent aux  $m$  racines  $Z_l$  satisfaisant la condition  $Z_l < 1$ . La relation suivante fait état de raccordement

$$u_\alpha(n, \omega) = \sum_{\nu=1}^m Z_\nu^{P-P_\nu} A(\alpha, \nu) R_\nu \quad (1.39)$$

Dans l'équation, l'exposant  $P$  représente la troisième coordonnée de l'atome  $n$  considéré,  $P_d$  représente la troisième coordonnée de l'atome appartenant au défaut et  $\alpha$  parcourt les trois directions cartésiennes  $x, y, z$ . Le  $m$  définit est le nombre de modes évanescents,  $R_\nu$  est un vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent  $\nu$  dans la base  $\{R\}$  et  $Z_\nu$  est le facteur de phase du mode évanescent  $\nu$  de la matrice dynamique dans le volume. Le coefficient  $A(\alpha, \nu)$  représente le poids pondéré associé à la contribution du  $\nu^{ième}$  mode évanescent dans la direction cartésienne  $\alpha$ .

A l'aide de l'équation (1.39), des facteurs de phase  $Z_\nu$  caractérisant les modes évanescents et des poids  $A(\alpha, \nu)$  issus de l'étude dans les régions parfaites, on peut déterminer la matrice de raccordement  $D_R$  qui est une matrice rectangulaire de dimension inverse de la matrice dynamique. Son produit avec la matrice dynamique  $D_M$  a pour résultat une matrice carrée  $S$  caractérisant un système d'équations homogènes. Les états vibrationnels localisés dans la zone de défaut sont déterminés à partir de la relation de compatibilité

$$\det[S(r, Z_1, e^{i\phi_y}, e^{i\phi_z})] = 0 \quad (1.40)$$

Il est alors possible de calculer les courbes de dispersions, les densités spectrales et les densités d'états associées aux différents modes localisés au voisinage du défaut.

#### IV.5. Densité spectrale et densité d'état vibrationnelle

La densité d'état  $N(\omega)$  [32] quantifie le nombre d'états de vibration de fréquence  $\omega$  donnée dans le cristal, tel que la quantité  $N(\omega)d\omega$  soit le nombre d'états d'énergie comprise entre  $\omega$  et  $\omega + d\omega$  par unité de volume. Elle représente la somme des fonctions spectrales sur la première zone de Brillouin. Sa détermination s'appuie sur un formalisme basé sur l'opérateur de Green associé à la méthode de raccordement [33-34]. Cet opérateur est obtenu à partir de la matrice dynamique du système. Il est défini par

$$G(\omega^2) = (\omega^2 I - D)^{-1} \quad (1.41)$$

Désignons par  $\gamma(\omega)$  le spectre de fréquence du système

$$\gamma(\omega) = \sum_l \delta(\omega - \omega_l) \quad (1.42)$$

$\gamma(\omega)$  représente physiquement le nombre d'états de vibration à la fréquence  $\omega$ .

$$\text{Sachant que } \gamma(\omega) = \frac{1}{3N} \sum \gamma_n(\omega) \quad (1.43)$$

Où  $\gamma_n(\omega)$  est la densité spectrale définie par

$$\gamma_n(\omega) = \sum_i \langle e_n | u_i \rangle \delta(\omega - \omega_i) \quad (1.44)$$

$\gamma_n(\omega)$  représente la somme des carrés des amplitudes des vibrations, excitées sur un atome suivant une direction cartésienne, de tous les modes propres de fréquence  $\omega_l = \omega$ . En tenant compte du fait que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\varepsilon / \pi}{(\omega^2 - \omega_l^2) + \varepsilon^2} = \delta(\omega^2 - \omega_l^2) \quad (1.45)$$

On trouve

$$\gamma_n(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \langle e_n | G(\omega) | e_n \rangle \quad (1.46)$$

Les valeurs propres  $\omega_l^2$  de  $D$  représentent les pôles des éléments de l'opérateur  $G(\omega^2)$ .

Afin d'éviter toute divergence dans les calculs, nous pouvons ajouter une infime partie imaginaire  $\varepsilon$  à la variable  $\omega^2$ , ce qui donne

$$\gamma_n(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [\text{Im} \langle e_n | G(\omega + j\varepsilon) | e_n \rangle] \quad (1.47)$$

La matrice de densité spectrale pour un vecteur d'onde parallèle au défaut est alors donnée par la relation suivante

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{l,l'}(\Omega) = \Omega \sum_m P_{\alpha m}^l P_{\beta m}^{l'} \delta(\Omega^2 - \Omega_m^2) = 2\Omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im} [G_{\alpha\beta}^{l,l'}(\Omega^2 + j\varepsilon)]) \quad (1.48)$$

Où  $l$  et  $l'$  représentent deux sites atomiques différents,  $\alpha$  et  $\beta$  les directions cartésiennes, et  $P_{cm}^l$  : la composante  $\alpha$  du vecteur déplacement de l'atome  $l$  dans le mode  $\Omega_m$ .

La densité d'état correspond à la trace des matrices de densités spectrales, et peut s'écrire comme

$$N(\Omega) = \sum_{l\alpha} P_{(\alpha,\alpha)}^{l,l'}(\Omega) = (-2\Omega/\pi) \sum_{l\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \{ \text{Im}[G_{\alpha\alpha}^{ll'}(\Omega^2 + j\varepsilon)] \} \quad (1.49)$$

## V. Etude de la diffusion

En arrivant à la zone du défaut, une onde incidente selon un mode propageant  $i$  ( $Z_1 = 1$ ) se scinde en deux parties : une partie transmise et une autre réfléchie. Elles engendrent des déplacements  $\vec{u}_r$  et  $\vec{u}_t$  dans les régions (1) et (2), (de la fig (I.5)), qui peuvent être exprimés comme une combinaison des modes propres du guide d'onde parfait à la même fréquence.

$$\vec{u}_t^i = \sum_{\nu} T_{\nu\nu}^-(Z_{\nu})^i \vec{u}_{\nu\nu}^- \quad \text{pour } i \geq N+1 \quad (1.50)$$

$$\vec{u}_r^i = \sum_{\nu} R_{\nu\nu}^-(Z_{\nu})^{-i} \vec{u}_{\nu\nu}^- \quad \text{pour } i \leq -1 \quad (1.51)$$

Où  $R$  et  $T$  sont des facteurs complexes permettant de calculer les coefficients de réflexion et de transmission après normalisation par les vitesses de groupes de l'onde plane de la région parfaite. Ils représentent la colonne  $\bar{\nu}$  de la matrice dynamique de diffusion du système perturbé.

L'écriture des équations du mouvement des atomes qui se trouvent entre les colonnes -1 et  $(N+1)$  (atomes des zones défaut et de raccordements), permettent d'aboutir à une matrice  $D$  rectangulaire appelée matrice dynamique du système perturbé.

$$[D]|u\rangle = [D] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (1.52)$$

Où le vecteur  $|u\rangle$  représente les déplacements de tous les sites appartenant à la zone comprise entre les colonnes (-1) et  $(N+1)$  de la figure (I.5). Il est composé de deux parties : la première  $|irr\rangle$  constituée par les déplacements des sites irréductibles formant la région

du défaut, et la seconde  $|rac\rangle$  formée par les déplacements associés aux sites raccordés (colonnes -1 et  $N+1$ ).

### V.1. Coefficients de transmission et de réflexion

Les coefficients de réflexion et de transmission [35] sont donnés, respectivement, par

$$r_{\nu\bar{\nu}} = |\rho_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \frac{v_{\nu}}{v_{\bar{\nu}}} |R_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (1.53)$$

$$t_{\nu\bar{\nu}} = |\tau_{\nu\bar{\nu}}|^2 = \frac{v_{\nu}}{v_{\bar{\nu}}} |T_{\nu\bar{\nu}}|^2 \quad (1.54)$$

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

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

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

$$\sum_{\nu} (t_{\nu\bar{\nu}} + r_{\nu\bar{\nu}}) = 1 \quad (1.55)$$

Ce qui se traduit dans les phénomènes de diffusion par la conservation de l'énergie où la matrice de diffusion est toujours unitaire.

### V.2. La conductance phononique

Par analogie à la conductance électronique [36], on définit la conductance (ou la transmittance) phononique  $\sigma(\Omega)$  qui est une grandeur physique liée au phénomène de diffusion des ondes élastiques via un défaut. Elle est donnée par

$$\sigma(\Omega) = \sum_{\nu, \bar{\nu}} t_{\nu\bar{\nu}} \quad (1.56)$$

La conductance phononique est la somme des transmissions effectuée sur tous les modes propageants à la fréquence  $\Omega$ , mais présente l'inconvénient de perdre toute information sur l'origine détaillée par mode. Dans ce sens, il y a perte d'informations par rapport aux coefficients de transmissions individuels. Néanmoins, la conductance est accessible

expérimentalement, puisqu'on est capable d'exciter et de détecter des vibrations à une fréquence déterminée. Pour un guide d'ondes parfait, sans défaut,  $\sigma$  est un entier qui donne le nombre de modes propageants à la fréquence  $\Omega$  considérée.

L'écart entre la conductance issue du processus de diffusion de l'onde incidente au niveau du défaut et celle de  $\sigma$  idéal qui est égal au nombre de modes propageants, est une mesure de la valeur de la réflexion.

## VI. Approche quantique

Dans le traitement quantique des vibrations du réseau, nous serons amenés à déterminer les valeurs propres de l'Hamiltonien suivant [3]

$$H = \sum_{n,a} \frac{P^2(\vec{R}_n^a)}{2m_n} + \frac{1}{2} \sum_{n\alpha, n'\beta}^{ab} \vec{u}_{n\alpha}^a C_{n\alpha, n'\beta}^{a,b} \vec{u}_{n'\beta}^b \quad (1.57)$$

Ce problème est très proche de celui de la quantification des niveaux d'énergie et des amplitudes de vibration d'un oscillateur harmonique. Dans un cristal constitué de  $N$  atomes, l'Hamiltonien ci-dessus peut se reformuler sous la forme d'une somme de  $3N$  Hamiltonien d'oscillateurs harmoniques indépendants. Les fréquences de ces oscillateurs correspondent aux  $3N$  modes normaux classiques décrits auparavant. La contribution à l'énergie totale d'un mode normal particulier prend la forme usuelle

$$E_m^n = (n_m^n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_m^n \quad (1.58)$$

Où  $n_m^n$  spécifie dans quel état quantique se trouve le phonon  $(m,n)$ . L'énergie totale de vibration des noyaux est simplement la somme des énergies des modes normaux

$$E_{vib} = \sum_{m,n} (n_m^n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_m^n \quad (1.59)$$

Le langage des modes normaux est remplacé par une description de type corpusculaire identique à celle utilisée dans la théorie quantique du champ électromagnétique. De la même manière, on associe au champ de vibration cristallin le concept de phonon définit comme une quasi-particule d'énergie  $\hbar \omega$ .

## Références

- [1] M. Born and T. von Karman, *Z. Physik* 13, 297 (1912).
- [2] C. Gallet, J.C. Prévôt, J.C. Daniel, compte rendu d'un atelier de prospective sur le sujet, Belgium Polymer Group, *Nanocomposites à charges lamellaires et matrice polymère*, INSA - Lyon, 58 (2003).
- [3] N. W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing (1976).
- [4] C. Kittel, *Introduction à la physique de l'état solide*, Ed. Dunod, (1983).
- [5] P. P. Ewald, *Annalen der Physik*, 369, 253(1924).
- [6] P. Lours, école des mines d'Albi-Carmaux, sciences des matériaux, septembre (2005).
- [7] M. Born and K. Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Oxford University Press (1954).
- [8] B. Bourahla, Thèse de doctorat, université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou (2007).
- [9] S. Chabbal, *Formalisme et implémentation des gradients analytiques pour les méthodes mixtes sr-DFT/Ir-WFT et leurs application à quelques cas critiques de la DFT*, Thèse de doctorat, université de Toulouse III, Paul Sabatier, (2010).
- [10] M. Born and R. Oppenheimer, *Annalen der Physik* 457 (1927).
- [11] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater, R. Tigrine, *Physica E* 43, 1213 (2011).
- [12] R. E. Allen, G. P. Alldrege and FW De Wette, *Phys. Rev.* 4, 1648 (1971).
- [13] D. I Bolef, *J. Appl. Phys.* 32 (1961).
- [14] D. Royer, E. Dieulesaint, Springer, 1439 (1999).
- [15] N. Desbiens, E. Bourasseau, J. B. Maillet, C. Denoual, *Calcul de constantes élastiques de matériaux solides par simulations Monte Carlo*, LRC MESO, ENS Cachan, France (2009) .
- [16] M. M. Mehrabadi et S.C. Cowin, *J. Mech. Appl. Math.*, 43, 15 (1990).
- [17] T. D. Sewell and C. M. Bennett, *J. Appl. Phys*, 88 (2000).
- [18] D. R. Squire, A.C. Holt and W.G. Hoover, *Physica*, 42, 388 (1969).
- [19] A. Maradudin, R. F. Wallis and L. Dobrzynski, *Handbook of Surfaces and Interfaces*, Vol. 3 Garland, New York (1980).
- [20] H. Ibach and H. Lüth, *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2009).
- [21] G. I. Stegemann and F. Nizolli, *Surface Excitation*, edited by V. M. Agronovich and R. London, Amsterdam: North Holland (1984).
- [22] I. M. Lifshitz and L. N. Rosenzweig, *Izvest. Akad. Nauk. S. S. S. R. Série Fiz.*12, 667 (1948).
- [23] C. Newman Untersuchungen uber das logarithmische und Newton'ssche Potential, Leipzig: B. G. Teubner, vol.1,368, (1877).
- [24] N. Yan Zhu, *Electromagnetic Theory*, URSI International Symposium, 818 (2010).
- [25] H. Helmholtz, *J. Reine Angew. Math.*, 57, 1(1860).
- [26] B. C. Clark, R. Herman, R. F. Wallis, *Phys. Rev.* 139 A860 (1965).
- [27] R. E. Allen, G. P. Alldrege and F. W. De Wette, *Phys. Rev. B.* 4, 1648 (1971).
- [28] J. Szeftel and A. Khater, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 20, 4725 (1987).
- [29] A. Khater, N. Auby and R. F. Wallis, *Surf. Sci.* 217, 363 (1989).
- [30] T. E. Feuchtwang, *Phys. Rev.* 155, 731 (1967).
- [31] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S.d'Addato and N. Auby, *J. Phys.C : Solide. State. Phys.* 21, 2113 (1988).
- [32] E. J. Garboczi and M. F. Thorpe, *Phy. Rev. B.* 32, 4513 (1985).
- [33] H. Yildirim, A. Kara, S. Durukanoglu and T. S. Rahman, *Surf. Sci.* 600, 484 (2006).
- [34] N. N. Chen and M. G. Cottam, *Phy. Rev. B.* 44, 14 (1991).
- [35] A. Fellay, *Travail d'ingénieur*, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (1996).
- [36] R. Landauer, *J. Phys. Condensed Matter* 1, 8099 (1989).

## CHAPITRE II

### Propriétés vibrationnelles des interfaces atomiques dans les structures cc et cfc

#### Sommaire

---

Introduction

I. Etude de la diffusion dans le système parfait

I.1. Modèles parfaits à cristallisations cc et cfc

I.2. Détermination des modes propageants

Discussion des résultats obtenus

I.3. Les modes évanescents

II. Etude de la diffusion dans un système présentant une interface

II.1. Modèles perturbés à cristallisations cc et cfc

Discussion des résultats obtenus

Conclusion

---

## Introduction

L'évolution spectaculaire des performances des matériaux est due à une compréhension et à une maîtrise de plus en plus fine de leurs structures, ainsi que les relations entre elles. Dans ce contexte, notre contribution consiste à explorer d'un point de vue vibrationnel les phénomènes de diffusion des ondes élastiques par des interfaces cristallines dans les structures à maillage cubique, à savoir cc et cfc. Le nombre matériaux cristallisant dans le système cubique simple étant réduit, leur étude ne retiendra pas notre attention.

Que ce soit dans les matériaux traditionnels (alliages polyphasés, composites) ou dans les nouveaux matériaux (couches minces, nano- et micro-dispositifs), les interfaces sont omniprésentes et conditionnent souvent le fonctionnement optimal de ces structures multi-constituées. Une interface cristalline est définie comme une jonction atomique entre deux systèmes permettant des échanges d'informations, et servent à réaliser de nouveaux dispositifs caractérisés par de nouveaux effets physiques notablement différents de ceux du matériau massif. Le transfert de phonons à travers l'interface entre solides est crucial pour le fonctionnement des dispositifs. Dans de telles structures, la thermalisation donne lieu à des flux de phonons de haute énergie s'étendant sur l'ensemble de la zone de Brillouin.

Dans le domaine des petites longueurs d'ondes, et compte tenu de l'aspect atomique de l'interface, nous pouvons prédire de nouvelles propriétés vibrationnelles et les mesures des courbes de dispersion associées peuvent fournir des informations concernant ces structures et les forces interatomiques mises en jeu par les matériaux composant le système.

Différentes techniques sont utilisées pour étudier les caractéristiques vibrationnelles des défauts sur le plan expérimental [1]. On peut citer la spectroscopie électronique par pertes d'énergie [2-3], la diffusion inélastique des neutrons [3], la diffusion Raman [3], la spectroscopie infrarouge [3] et la diffusion Brillouin [4].

Les différents aspects abordés ont pour objectif d'apporter les réponses nécessaires à la compréhension de la dynamique de ces systèmes, fortement modifiée d'une part par la présence de l'interface, et d'autre part par la nanostructuration. Notre étude sera basée sur le formalisme de Landauer et ses collaborateurs [5-8], dans le cadre du modèle des forces centrales et de l'approximation harmonique [9].

La détermination de la dispersion et des vitesses de groupe sont indispensables à l'étude de la diffusion et feront par conséquent l'objet de la première étape de notre étude.

## I. Etude de la diffusion dans le système parfait

### I.1. Modèles parfaits à cristallisation cc et cfc

Le système modèle est un réseau infini repéré par les axes  $(Ox)$ ,  $(Oy)$ ,  $(Oz)$  et de paramètre de maille  $a$ . Les atomes de masse  $m$ , sont situés aux nœuds du réseau et reliés aux sites adjacents via des ressorts dont les constantes de force sont  $k_1$  pour les premiers et  $k_2$  pour les seconds voisins, respectivement.

La structure cc est constituée de deux atomes par maille conventionnelle, un au centre du cube  $(0,0,0)$  et un autre à la position  $(1/2,1/2,1/2)$ , comme l'indique la figure (2.1).

Par contre, la structure cfc est constituée de 4 atomes par maille conventionnelle, six sur les centres des faces, avec une contribution de  $1/2$  et huit aux sommets du cube avec une contribution de  $1/8$ , comme illustré sur la figure (2.2).

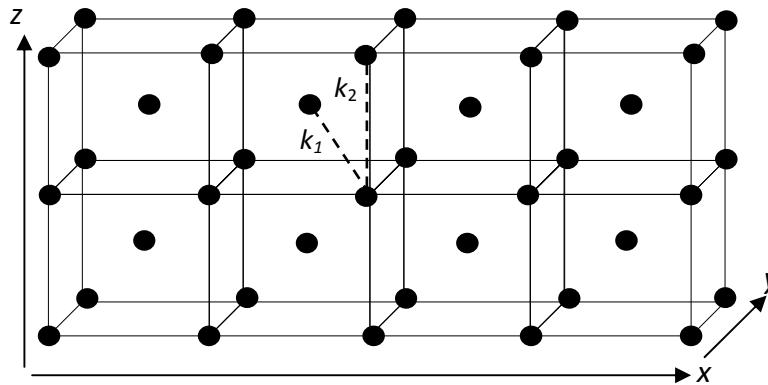


Figure (2.1) : Système cc parfait.

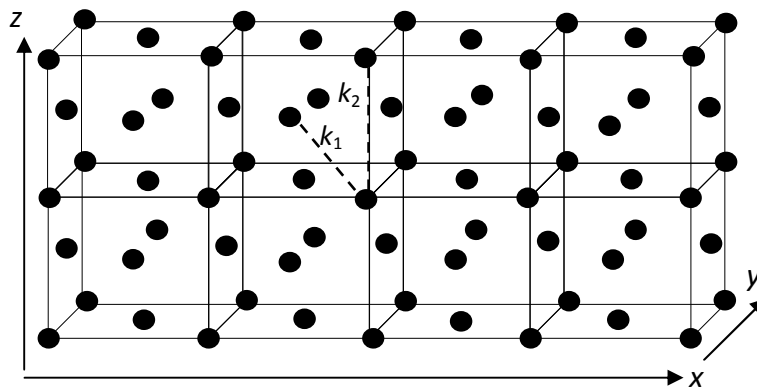


Figure (2.2) : Système cfc parfait.

L'étude de la diffusion des structures en présence de défauts nécessite la détermination des modes pour lesquels  $Z_l \leq 1$ .

## I.2. Détermination des modes propageants

### I.2.1. Equations du mouvement

La projection de l'équation dynamique (1.28), suivant les trois directions de l'espace  $(x,y,z)$ , donnera les équations du mouvement d'un atome  $(i,j,k)$  du réseau tridimensionnel.

On obtient les systèmes d'équations suivants

#### i) réseau cc

Projection suivant l'axe  $(Ox)$

$$\begin{aligned}
 (m\omega^2 - \frac{8}{3}k_1 - 2k_2)u_x(i,j,k) + \frac{k_1}{3} & \left[ \begin{aligned} & u_x(i+1,j+1,k+1) + u_x(i-1,j+1,k+1) + u_x(i+1,j-1,k+1) \\ & + u_x(i+1,j+1,k-1) + u_x(i-1,j-1,k+1) + u_x(i-1,j+1,k-1) \\ & + u_x(i+1,j-1,k-1) + u_x(i-1,j-1,k-1) \end{aligned} \right] \\
 + k_2 & [u_x(i+2,j,k) + u_x(i-2,j,k)] \\
 + \frac{k_1}{3} & \left[ \begin{aligned} & u_y(i+1,j+1,k+1) - u_y(i-1,j+1,k+1) - u_y(i+1,j-1,k+1) \\ & + u_y(i+1,j+1,k-1) + u_y(i-1,j-1,k+1) - u_y(i-1,j+1,k-1) \\ & - u_y(i+1,j-1,k-1) + u_y(i-1,j-1,k-1) + u_z(i+1,j+1,k+1) \\ & - u_z(i-1,j+1,k+1) + u_z(i+1,j-1,k+1) - u_z(i+1,j+1,k-1) \\ & - u_z(i-1,j-1,k+1) + u_z(i-1,j+1,k-1) - u_z(i+1,j-1,k-1) \\ & + u_z(i-1,j-1,k-1) \end{aligned} \right] = 0
 \end{aligned}$$

Projection suivant l'axe  $(Oy)$

$$\begin{aligned}
 (m\omega^2 - \frac{8}{3}k_1 - 2k_2)u_y(i,j,k) + \frac{k_1}{3} & \left[ \begin{aligned} & u_y(i+1,j+1,k+1) + u_y(i-1,j+1,k+1) + u_y(i+1,j-1,k+1) \\ & + u_y(i+1,j+1,k-1) + u_y(i-1,j-1,k+1) + u_y(i-1,j+1,k-1) \\ & + u_y(i+1,j-1,k-1) + u_y(i-1,j-1,k-1) \end{aligned} \right] \\
 + k_2 & [u_y(i,j+2,k) + u_y(i,j-2,k)] \\
 + \frac{k_1}{3} & \left[ \begin{aligned} & + u_x(i+1,j+1,k+1) - u_x(i-1,j+1,k+1) - u_x(i+1,j-1,k+1) \\ & + u_x(i+1,j+1,k-1) + u_x(i-1,j-1,k+1) - u_x(i-1,j+1,k-1) \\ & - u_x(i+1,j-1,k-1) + u_x(i-1,j-1,k-1) + u_z(i+1,j+1,k+1) \\ & + u_z(i-1,j+1,k+1) - u_z(i+1,j-1,k+1) - u_z(i+1,j+1,k-1) \\ & - u_z(i-1,j-1,k+1) - u_z(i-1,j+1,k-1) + u_z(i+1,j-1,k-1) \\ & + u_z(i-1,j-1,k-1) \end{aligned} \right] = 0
 \end{aligned}$$

Projection suivant l'axe ( $Oz$ )

$$\begin{aligned}
 (m\omega^2 - \frac{8}{3}k_1 - 2k_2)u_z(i, j, k) + \frac{k_1}{3} & \left[ \begin{array}{l} u_z(i+1, j+1, k+1) + u_z(i-1, j+1, k+1) + u_z(i+1, j-1, k+1) \\ + u_z(i+1, j+1, k-1) + u_z(i-1, j-1, k+1) + u_z(i-1, j+1, k-1) \\ + u_z(i+1, j-1, k-1) + u_z(i-1, j-1, k-1) \end{array} \right] \\
 + k_2 & [u_z(i, j, k+2) + u_z(i, j, k-2)] \\
 + \frac{k_1}{3} & \left[ \begin{array}{l} + u_x(i+1, j+1, k+1) - u_x(i-1, j+1, k+1) + u_x(i+1, j-1, k+1) \\ - u_x(i+1, j+1, k-1) - u_x(i-1, j-1, k+1) + u_x(i-1, j+1, k-1) \\ - u_x(i+1, j-1, k-1) + u_x(i-1, j-1, k-1) + u_y(i+1, j+1, k+1) \\ + u_y(i-1, j+1, k+1) - u_y(i+1, j-1, k+1) - u_y(i+1, j+1, k-1) \\ + u_y(i-1, j-1, k+1) - u_y(i-1, j+1, k-1) + u_y(i+1, j-1, k-1) \\ + u_y(i-1, j-1, k-1) \end{array} \right] = 0
 \end{aligned}$$

**ii) réseau cfc**

Projection suivant l'axe ( $Ox$ )

$$\begin{aligned}
 (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2)u_x(i, j, k) + \frac{k_1}{2} & \left[ \begin{array}{l} u_x(i+1, j+1, k) + u_x(i-1, j-1, k) + u_x(i-1, j+1, k) \\ + u_x(i+1, j-1, k) + u_x(i+1, j, k+1) + u_x(i-1, j, k-1) \\ + u_x(i-1, j, k+1) + u_x(i+1, j, k-1) \end{array} \right] \\
 + k_2 & [u_x(i+2, j, k) + u_x(i-2, j, k)] \\
 + \frac{k_1}{2} & \left[ \begin{array}{l} u_y(i+1, j+1, k) + u_y(i-1, j-1, k) - u_y(i-1, j+1, k) \\ - u_y(i+1, j-1, k) + u_z(i+1, j, k+1) - u_z(i+1, j, k-1) \\ - u_z(i-1, j, k+1) + u_z(i-1, j, k-1) \end{array} \right] = 0
 \end{aligned}$$

Projection suivant l'axe ( $Oy$ )

$$\begin{aligned}
 (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2)u_y(i, j, k) + \frac{k_1}{2} & \left[ \begin{array}{l} u_y(i+1, j+1, k) + u_y(i-1, j-1, k) + u_y(i-1, j+1, k) \\ + u_y(i+1, j-1, k) + u_y(i, j+1, k+1) + u_y(i, j-1, k-1) \\ + u_y(i, j-1, k+1) + u_y(i, j+1, k-1) \end{array} \right] \\
 + k_2 & [u_y(i, j+2, k) + u_y(i, j-2, k)] \\
 + \frac{k_1}{2} & \left[ \begin{array}{l} u_x(i+1, j+1, k) + u_x(i-1, j-1, k) - u_x(i-1, j+1, k) \\ - u_x(i+1, j-1, k) + u_z(i, j+1, k+1) + u_z(i, j-1, k-1) \\ - u_z(i, j-1, k+1) - u_z(i, j+1, k-1) \end{array} \right] = 0
 \end{aligned}$$

Projection suivant l'axe ( $Oz$ )

$$\begin{aligned}
 (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2)u_z(i, j, k) + \frac{k_1}{2} & \left[ \begin{array}{l} u_z(i+1, j, k+1) + u_z(i-1, j, k-1) + u_z(i-1, j, k+1) \\ + u_z(i+1, j, k+1) + u_z(i, j+1, k+1) + u_z(i, j-1, k-1) \\ + u_z(i, j-1, k+1) + u_z(i, j+1, k-1) \end{array} \right] \\
 + k_2 & [u_y(i, j, k+2) + u_y(i, j, k+2)] \\
 + \frac{k_1}{2} & \left[ \begin{array}{l} u_x(i+1, j, k+1) + u_x(i-1, j, k-1) - u_x(i-1, j, k-1) \\ - u_x(i+1, j, k-1) + u_y(i, j+1, k+1) + u_y(i, j-1, k-1) \\ - u_y(i, j-1, k+1) - u_y(i, j+1, k-1) \end{array} \right] = 0
 \end{aligned}$$

Compte tenu de la relation de Bloch [10], on peut écrire

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

$$u_\alpha(i, j \mp 1, k) = Z_2^{\mp 1} u_\alpha(i, j, k)$$

$$u_\alpha(i, j, k \pm 1) = Z_3^{\mp 1} u_\alpha(i, j, k)$$

Où  $Z_j$  est le facteur de phase satisfaisant la condition de propagation suivant l'axe des  $x$ . Ils sont donnés par :  $Z_j = \exp(iq_\alpha a) = e^{i\phi_\alpha}$ , où  $j = 1, 2, 3$ ,  $q$  est le vecteur d'onde du réseau réciproque,  $i^2 = -1$ .

Le système d'équations précédent se simplifiera et prendra la forme suivante

**i) réseau cc**

$$\begin{aligned}
 & \left\{ (m\omega^2 - \frac{8}{3}k_1 - 2k_2 + \frac{k_1}{3} [(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1}) + 2k_2(z_1^2 + z_1^{-2})]) \right\} u_x(i, j, k) \\
 & + \frac{k_1}{3} [(z_1 - z_1^{-1})(z_2 - z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1})] u_y(i, j, k) + \frac{k_1}{3} [(z_1 - z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 - z_3^{-1})] u_z(i, j, k) = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ (m\omega^2 - \frac{8}{3}k_1 - 2k_2 + \frac{k_1}{3} [(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1}) + 2k_2(z_2^2 + z_2^{-2})]) \right\} u_y(i, j, k) \\
 & + \frac{k_1}{3} [(z_1 - z_1^{-1})(z_2 - z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1})] u_x(i, j, k) + \frac{k_1}{3} [(z_1 + z_1^{-1})(z_2 - z_2^{-1})(z_3 - z_3^{-1})] u_z(i, j, k) = 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ (m\omega^2 - \frac{8}{3}k_1 - 2k_2 + \frac{k_1}{3} [(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1}) + 2k_2(z_3^2 + z_3^{-2})]) \right\} u_z(i, j, k) \\
 & + \frac{k_1}{3} [(z_1 - z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 - z_3^{-1})] u_x(i, j, k) + \frac{k_1}{3} [(z_1 + z_1^{-1})(z_2 - z_2^{-1})(z_3 - z_3^{-1})] u_y(i, j, k) = 0
 \end{aligned}$$

**ii) réseau cfc**

$$\left\{ (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2 + \frac{k_1}{2}(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1}) + k_2(z_1^2 + z_1^{-2})) \right\} u_x(i, j, k) \\ + \frac{k_1}{2} [(z_2 - z_2^{-1})(z_1 - z_1^{-1})] u_y(i, j, k) + \frac{k_1}{2} [(z_1 - z_1^{-1})(z_3 - z_3^{-1})] u_z(i, j, k) = 0$$

$$\left\{ (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2 + \frac{k_1}{2}(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1}) + k_2(z_2^2 + z_2^{-2})) \right\} u_y(i, j, k) \\ + \frac{k_1}{2} [(z_2 - z_2^{-1})(z_1 - z_1^{-1})] u_x(i, j, k) + \frac{k_1}{2} [(z_2 - z_2^{-1})(z_3 - z_3^{-1})] u_z(i, j, k) = 0$$

$$\left\{ (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2 + \frac{k_1}{2}(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1}) + k_2(z_3^2 + z_3^{-2})) \right\} u_z(i, j, k) \\ + \frac{k_1}{2} [(z_3 - z_3^{-1})(z_1 - z_1^{-1})] u_x(i, j, k) + \frac{k_1}{2} [(z_2 - z_2^{-1})(z_3 - z_3^{-1})] u_y(i, j, k) = 0$$

Les équations précédentes peuvent se mettre sous forme d'un problème aux valeurs propres. Elles s'écrivent alors sous la forme matricielle suivante

$$[\Omega^2 I - D(Z_1, r)] |u\rangle = 0 \quad (2.1)$$

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

déplacement, il est composé de différentes parties :  $|u\rangle = \begin{bmatrix} u_x(i, j, k) \\ u_y(i, j, k) \\ u_z(i, j, k) \end{bmatrix}$ . Les matrices  $D$  et  $I$

sont, respectivement, la matrice dynamique de dimension (3×3) et la matrice identité.

$$D = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{bmatrix}$$

La détermination des fréquences propres de vibrations revient à calculer les valeurs propres de la matrice  $D$ .

On note  $D^{cc}$  et  $D^{cfc}$  les matrices dynamiques des systèmes parfaits des réseaux cc et cfc, respectivement. Leurs éléments sont :

$$D_{11}^{cc} = D_{22}^{cc} = D_{33}^{cc} = (m\omega^2 - \frac{8}{3}k_1 - 2k_2 + \frac{k_1}{3}[(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1}) + 2k_2(z_1^2 + z_1^{-2})])$$

$$D_{12}^{cc} = D_{21}^{cc} = \frac{k_1}{3}[(z_1 - z_1^{-1})(z_2 - z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1})], \quad D_{13}^{cc} = D_{31}^{cc} = \frac{k_1}{3}[(z_1 - z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 - z_3^{-1})]$$

$$D_{23}^{cc} = D_{32}^{cc} = \frac{k_1}{3}[(z_1 + z_1^{-1})(z_2 - z_2^{-1})(z_3 - z_3^{-1})].$$

$$D_{11}^{cfc} = D_{22}^{cfc} = D_{33}^{cfc} = (m\omega^2 - 4k_1 - 2k_2 + \frac{k_1}{2}(z_1 + z_1^{-1})(z_2 + z_2^{-1})(z_3 + z_3^{-1}) + k_2(z_1^2 + z_1^{-2}))$$

$$D_{12}^{cfc} = D_{21}^{cfc} = \frac{k_1}{2}[(z_2 - z_2^{-1})(z_1 - z_1^{-1})], \quad D_{13}^{cfc} = D_{31}^{cfc} = \frac{k_1}{2}[(z_1 - z_1^{-1})(z_3 - z_3^{-1})],$$

$$D_{23}^{cfc} = D_{32}^{cfc} = \frac{k_1}{2}[(z_2 - z_2^{-1})(z_3 - z_3^{-1})].$$

### I.2.2. Courbes de dispersion

Les deux systèmes d'équations précédents n'admettent de solutions non triviales que si  $\det[\Omega^2 I - D(Z_1, r)]|u\rangle = 0$ . Les valeurs propres de la matrice donnent les fréquences normalisées de vibration  $\Omega$  en fonction de  $\phi_x$  lorsque  $q_x$  balaie la première zone de Brillouin  $[-\pi, \pi]$ . Dans ce travail, nous cherchons les relations de dispersion des différents modes propres en fonction de  $\phi_x = q_x a$ . Nous les avons représentés pour la valeur  $r = 0,5$ .

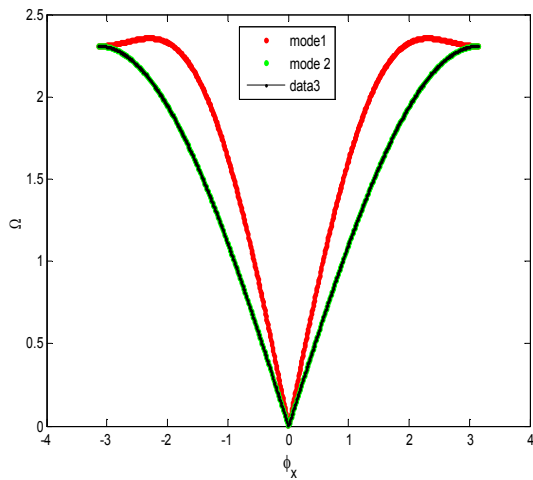


Figure (2.3) : Courbe de dispersion cc parfait.

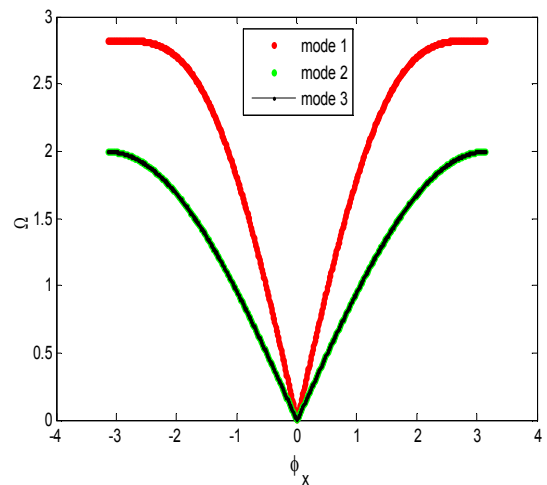


Figure (2.4) : Courbe de dispersion cfc parfait.

### Discussion des résultats obtenus

Les courbes de dispersion des deux systèmes cc et cfc sont symétriques par rapport à l'origine. En effet, la symétrie du problème étudié par rapport à l'inversion du temps dans la première zone de Brillouin impose la parité des courbes par rapport à  $\phi_x$ . Leurs dépendances en fonction de  $\phi_x$  n'est pas linéaire, ce qui signifie que le système est dispersif. De plus, les trois branches de dispersion sont acoustiques puisque  $\Omega \rightarrow 0$  quand  $\phi_x \rightarrow 0$ , elles correspondent aux trois modes de propagation dont deux sont dégénérés.

Les trois modes sont propagants dans des intervalles bien définis :

#### i) Pour le réseau cc

Mode (1) :  $[\Omega_{1\min} = 0.00, \Omega_{1\max} = 2.35]$ .

Mode (2) et (3) :  $[\Omega_{2\min} = 0.00, \Omega_{2\max} = 2.31]$ .

Les trois branches se recouvrent sur tout l'intervalle des fréquences de propagation sauf pour les valeurs de  $\Omega$  comprises entre  $[2.31, 2.35]$ , qui ne sont permises que pour le mode (1). Dans cette zone, on constate que la pente devient négative ce qui signifie que l'onde change de sens de propagation. Les trois modes sont dégénérés au centre et au bord de zone supérieur.

#### ii) Pour le réseau cfc

Les trois modes sont propagants dans les intervalles de fréquences suivants :

Mode (1) :  $[\Omega_{1\min} = 0.00, \Omega_{1\max} = 2.82]$ .

Mode (2) et (3) :  $[\Omega_{2\min} = 0, \Omega_{2\max} = 2.00]$ .

Les trois branches se recouvrent sur l'intervalle de fréquence  $[0.00, 2.00]$ . Au-delà de cette plage, il ne subsiste que la branche correspondant au mode 1, allant jusqu'à la valeur maximale de la fréquence normalisée  $\Omega = 2.82$  en bord de zone supérieur.

Les courbes de dispersion peuvent être assimilées au spectre des énergies possibles pour les phonons en fonction de leur impulsion  $\hbar (q_x a)/2\pi$ . La connaissance d'un tel spectre, pour un cristal réel, est très importante. Il permet de préciser les énergies et les impulsions que le cristal est susceptible de fournir ou d'absorber lorsqu'il interagit avec un autre système.

### I.2.3. Vitesses de groupe

La vitesse de groupe correspond à la pente des courbes de dispersion. C'est la vitesse à laquelle l'énergie ou l'information est transportée dans un milieu dispersif, ou lorsque les directions de propagation sont diverses. Elle est définie pour des valeurs d'ondes  $\vec{q}$  réelles par l'expression

$$\vec{V}_g = \overrightarrow{\text{grad}} [\Omega(\vec{q})] \quad (2.2)$$

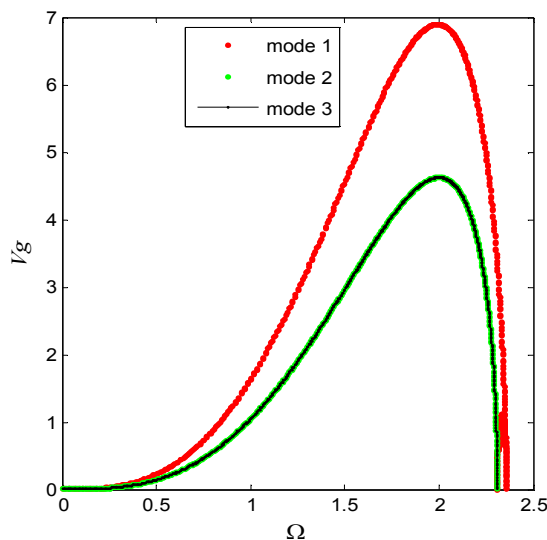
Dans le cas où  $\vec{q}$  est complexe, nous imposons à la vitesse de groupe une valeur nulle.

Une valeur nulle ou négative de la vitesse de groupe signifie que, dans certains cas, des ondes propageantes deviennent stationnaires ou inversent leur sens de propagation quand on modifie leur vecteur d'onde  $\vec{q}$ .

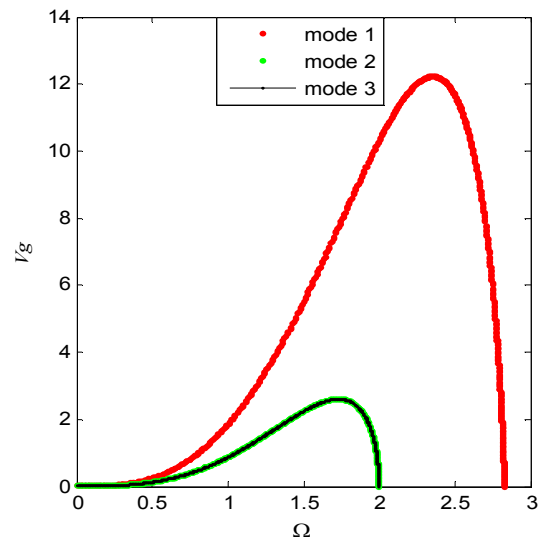
La méthode utilisée dans nos calculs pour déterminer cette vitesse est la méthode des perturbations utilisée en mécanique quantique [11-12]. Cette méthode exige la résolution du problème du guide d'ondes parfait.

$$D(\vec{q}, r)\vec{u}_v = -\Omega^2(\vec{q})\vec{u}_v \quad (2.3)$$

Les vitesses de groupe  $V_g$  pour les deux réseaux cc et cfc, en fonction de la fréquence de diffusion  $\Omega$ , sont illustrées sur les figures ci-dessous.



**Figure (2.5) :** Vitesses de groupe d'un cc parfait en fonction de  $\Omega$ .



**Figure (2.6) :** Vitesses de groupe d'un cfc parfait en fonction de  $\Omega$ .

### Discussion des résultats obtenus

Notons que l'étendue de chacune des plages où la vitesse  $V_g \neq 0$  se rapporte bien à celle des modes propageants. On constate que la pente de ces courbes ne change pas de signe dans le cas du cfc. Cela signifie que l'onde incidente se propage bien sans changement de direction dans le cristal, tandis que dans le cas du ccc, la vitesse de groupe s'annule pour  $\Omega = 2.35$  et change de sens de propagation comme le montre la courbe de dispersion correspondante.

### I.3. Les modes évanescents

Les solutions de l'équation (2.1) déterminent bien les fréquences propres  $\Omega_v$  et les vecteurs propres correspondants  $\vec{u}_v$  pour le cristal parfait.

Dans le but d'analyser la dispersion, les états localisés de vibration et la transmission des ondes élastiques via une interface de type  $A/B$ , la connaissance détaillée à la fois des modes propageants et des modes évanescents, solutions de l'équation (2.1) est nécessaire. Ces derniers peuvent être décrits dans chaque sub-système par les doublets  $(Z_\lambda, Z_\lambda^{-1})$ , où  $\lambda \equiv A$  ou  $B$ . Ils peuvent être obtenus en utilisant les méthodes décrites dans les références [13-14]. Les solutions exactes pour chaque doublet sont obtenues en fonction de la fréquence normalisée  $\Omega$ , des vecteurs d'ondes  $\phi_y, \phi_z$  et les interactions dans le système considéré.

L'équation (2.1) admet des solutions non triviales si et seulement si :

$$\det[\Omega^2 I - D(Z_1, r)]|u\rangle = 0 \quad (2.4)$$

Cela donne lieu à une équation séculaire caractéristique de degré six en  $Z_1$ , qui peut être exprimée sous la forme polynomiale

$$C_0 + C_1 Z_1^1 + C_2 Z_1^2 + C_3 Z_1^3 + C_4 Z_1^4 + C_5 Z_1^5 + C_6 Z_1^6 = 0 \quad (2.5)$$

Les coefficients  $C_n$  s'expriment en fonction de  $\Omega, \phi_y, \phi_z$  et  $k$ .

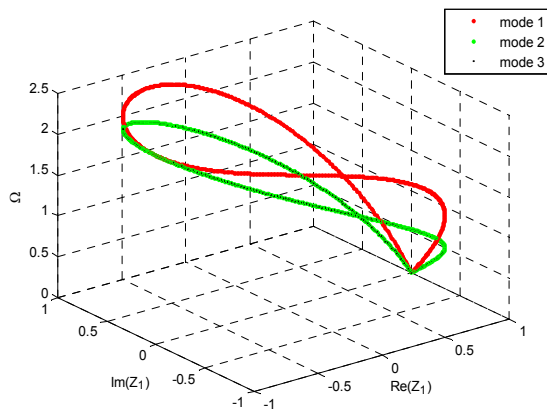
Nous pouvons montrer que les deux facteurs de phase vérifient symétriquement l'équation polynomiale (2.4), et ce, en raison de la nature hermitienne de la dynamique des systèmes en volume [15].

Pour satisfaire la condition des modes évanescents  $Z_1 < 1$ , seulement trois solutions des racines de l'équation (2.4), sont acceptables physiquement. Ces solutions constituent l'ensemble des modes évanescents  $Z_{1j}, j \in \{1, 2, 3\}$ . Le champ d'évanescence est alors rigoureusement déterminé dans les deux systèmes semi-infinis, situés de part et d'autre de la zone d'interface.

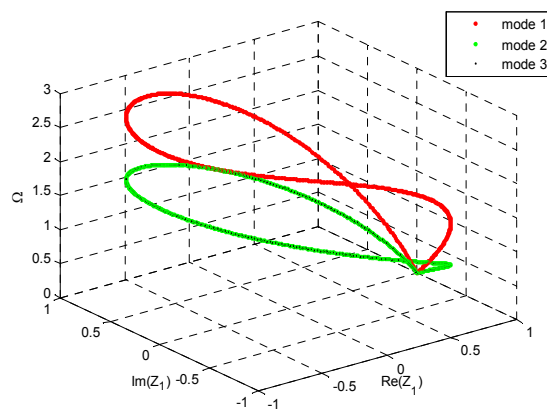
### I.3.1. Courbes de dispersion 3D

La représentation à 3 dimensions des trajectoires des facteurs d'atténuation  $Z_l$  en fonction de la fréquence, permet d'avoir une vision plus complète des courbes de dispersion comprenant simultanément les modes atténués et les modes itinérants.

L'évolution des modes propres de vibrations dans l'espace  $(\Omega, Im(Z_1), Re(Z_1))$ , selon une direction donnée ( $\phi_y = 0$  et  $\phi_z = 0$ ) est illustrée sur les figures ci-dessous.



**Figure (2.7) :** Courbes de dispersion à 3D, d'un cc pour  $\phi_y = 0$  et  $\phi_z = 0$ .



**Figure (2.8) :** Courbes de dispersion à 3D, d'un cfc pour  $\phi_y = 0$  et  $\phi_z = 0$ .

On constate que pour les modes sont propageants, la projection des courbes sur le plan complexe donnent lieu à des cercles de rayon unité égal au module de  $Z_l$  tel que :

$$|\text{Re}(Z_l)|^2 + |\text{Im}(Z_l)|^2 = 1. \tag{2.6}$$

## II. Etude de la diffusion dans un système présentant une interface

### II.1. Modèles perturbés à cristallisation cc et cfc

Dans ce travail, le système modèle est composé de deux sous-systèmes semi-infinis  $A$  et  $B$ , de masses  $m_A$  et  $m_B$ , respectivement, reliés par une seule nanojonction. Les constantes de forces entre les atomes dans  $A$  et  $B$  sont notées par  $k_A$  et  $k_B$ , respectivement.

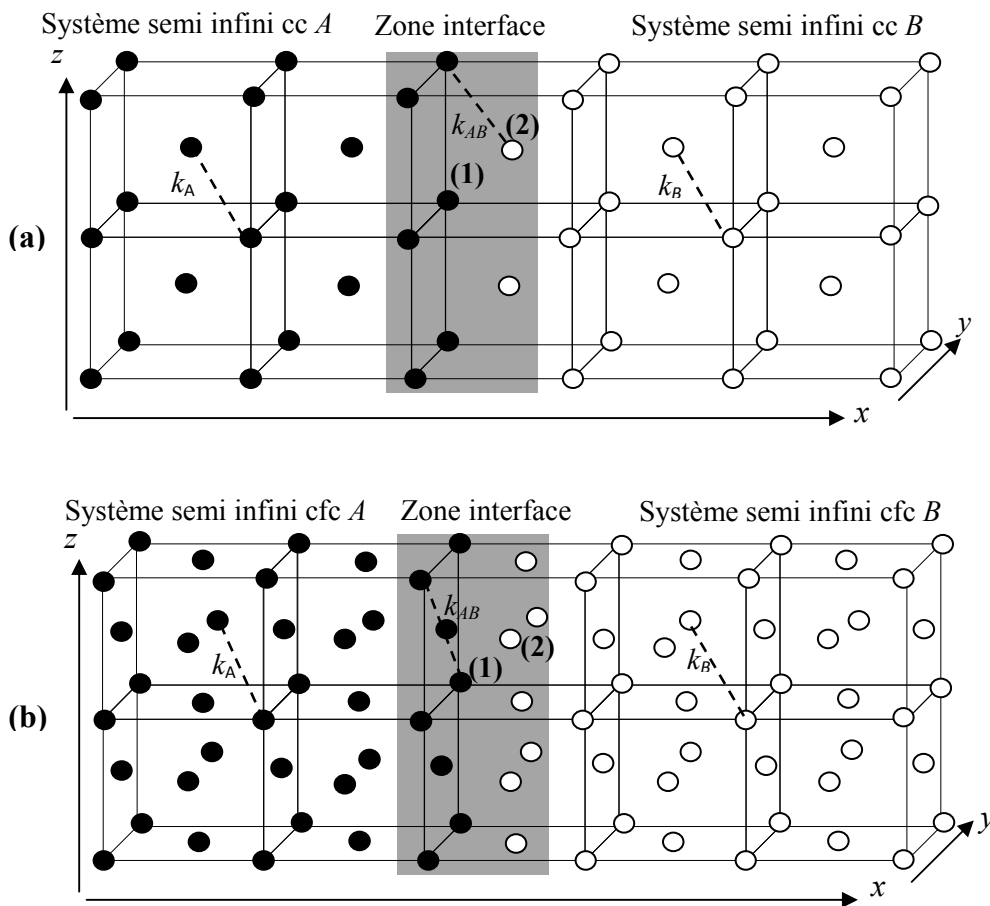
Avant d'entreprendre l'étude dynamique du système, on subdivise le système en trois zones:

*i)* les zones à gauche de  $A$  et à droite de  $B$  : elles correspondent à des systèmes parfaits

(ceux qui sont étudié en (I));

*ii)* la zone du milieu : elle correspond à la zone interfaciale. Elle relie le centre du système aux zones  $A$  et  $B$  par l'intermédiaire de zones dites de raccordement. Les constantes de forces de cette zone sont notées  $k_{1AB}$  et  $k_{2AB}$  respectivement pour les premiers et seconds voisins ;

*iii)* les frontières entre les zones citées en *i)* et *ii)*.



**Figure (2.9)** : Représentation schématique d'une interface séparant deux structures différentes (interface de type A/B). (a) réseau cc (b) réseau cfc.

### II.1.1. Matrice dynamique

A partir de l'équation du mouvement des atomes de la zone interfaciale et des atomes des régions de raccordement gauche et droite, on obtient une matrice rectangulaire  $D$  appelée matrice dynamique du système perturbé.

Cette matrice est de dimensions  $(m \times n)$  tel que :

$m = [\text{le nombre d'atomes de la région interface} + \text{le nombre d'atomes des régions de raccordement}] \times \text{le nombre de degrés de liberté par site.}$

$n = [\text{le nombre d'atomes adjacents reliés directement aux atomes de raccordement}] \times \text{le nombre de degrés de liberté par site.}$

Le résultat est une matrice rectangulaire de taille  $(12 \times 18)$ .

### II.1.2. Matrice de raccordement

A présent, nous allons relier les déplacements vibrationnels des atomes appartenant au domaine de l'interface, aux champs vibrationnels des modes évanescents des deux zones parfaites par une matrice dite de raccordement. Pour cela, on définit deux bases dans l'espace des phases  $\{R\}$ ,  $\{T\}$  qui serviront à étudier la dynamique des atomes se trouvant dans les zones de raccordement à gauche et à droite de l'interface. Les déplacements atomiques seront exprimés comme une combinaison linéaire des vecteurs  $\{R, T\}$  définissant ainsi un espace fini. Ils sont de dimension égale au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude de la dynamique de chaque zone parfaite.

Dans la base  $\{T\}$  : les déplacements vibrationnels d'un atome sont de la forme [11-16]

$$u'_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{j=1}^3 Z_j^{n_x} A'(\alpha, j) T_j \quad (2.7)$$

Idem, dans la base  $\{R\}$  :

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{i=1}^3 Z_i^{n_x} A(\alpha, j) R_i \quad (2.8)$$

Où :  $R_i$  est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents  $i$  dans la base  $\{R\}$ .  $T_j$  est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents  $j$  dans la base  $\{T\}$ .  $\alpha$  désigne les trois directions de l'espace  $(Ox)$ ,  $(Oy)$  et  $(Oz)$ .

Les deux coefficients  $A$  et  $A'$  représentent les poids pondérés associés aux différents modes évanescents. Ils sont déterminés à l'aide des vecteurs propres issus de l'étude de la dynamique de la zone parfaite.

Dans la zone interfaciale, le vecteur déplacement noté  $|u\rangle$  peut se décomposer en deux

$$\text{parties : } |u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix}.$$

Le vecteur  $|irr\rangle$  est composé des déplacements des sites irréductibles formant la zone interfaciale, qui sont au nombre de deux. On en déduit  $\dim(|u\rangle) = 2 \times 3 = 6$  (le nombre 3 est le degré de liberté). Quant à la deuxième partie (vecteur  $|rac\rangle$ ), elle renferme les déplacements des sites formant les deux zones de raccordements (gauche et droite) qui sont au nombre de deux. On en déduit, aussi  $\dim(|rac\rangle) = 2 \times 3 = 6$ .

Le raccordement des atomes se met sous la forme matricielle suivante

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [R] \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

Où  $I_d$  est la matrice identité dont la taille dépend du nombre d'atomes irréductibles multiplié par trois (3 degrés de libertés par site). Les blocs  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_3$  et  $R_4$  définissent des sous-matrices carrées, dont les éléments sont exprimés en fonctions de  $Z_1$ ,  $Z_2$  et  $Z_3$ , et des poids pondérés associés aux modes (appelés cofacteurs). Elles dépendent du nombre de modes propageants du système parfait, et sont de dimensions  $(3 \times 3)$ .

L'ensemble des sous matrices est noté  $R$ , et appelée matrice de raccordement. Sa taille est de dimension  $(n \times m)$ . Elle a une forme rectangulaire. Dans cette partie, elle est de taille  $(18 \times 12)$ .

En effectuant le produit de la matrice  $D(m \times n)$  par la matrice  $R(n \times m)$ , on obtient une matrice carrée  $S(m \times m)$  de taille  $(12 \times 12)$  tel que

$$[D(m \times n)].[R(n \times m)]. \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [S(m \times m)]. \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = 0 \quad (2.10)$$

A l'aide de la relation de compatibilité  $\det([S(m \times m)]) = 0$ , on détermine les états localisés de vibration.

### II.1.3. Spectres obtenus

Pour l'étude de la diffusion, nous supposons une onde incidente, se propageant de gauche vers la droite selon un mode vibratoire  $i$ .

En arrivant à la zone de nanojonction, l'onde sera décomposée en deux parties : l'une transmise et l'autre réfléchie. Le formalisme de calcul des coefficients de transmission et de réflexion totale, des états localisés de vibration et des densités d'états phononique est détaillé dans le chapitre précédant (chapitre I).

Les résultats sont présentés pour une direction fixe, correspondant à l'angle d'incidence  $\varphi_y = \varphi_z = 0$ .  $k_{AB}$  est la constante de force dans la zone interfaciale est prise comme moyenne arithmétique de  $k_A$  et  $k_B$  :  $k_{AB} = (k_A + k_B)/2$

Nous examinons, principalement, trois cas :

$$i) \quad m_B < m_A$$

$$ii) \quad m_B = m_A$$

$$iii) \quad m_B > m_A$$

Pour chacun de ces cas, nous considérons trois possibilités élastiques, à savoir :

$$a) \text{ Adoucissement des constantes de forces : } k_{AB} < k_A,$$

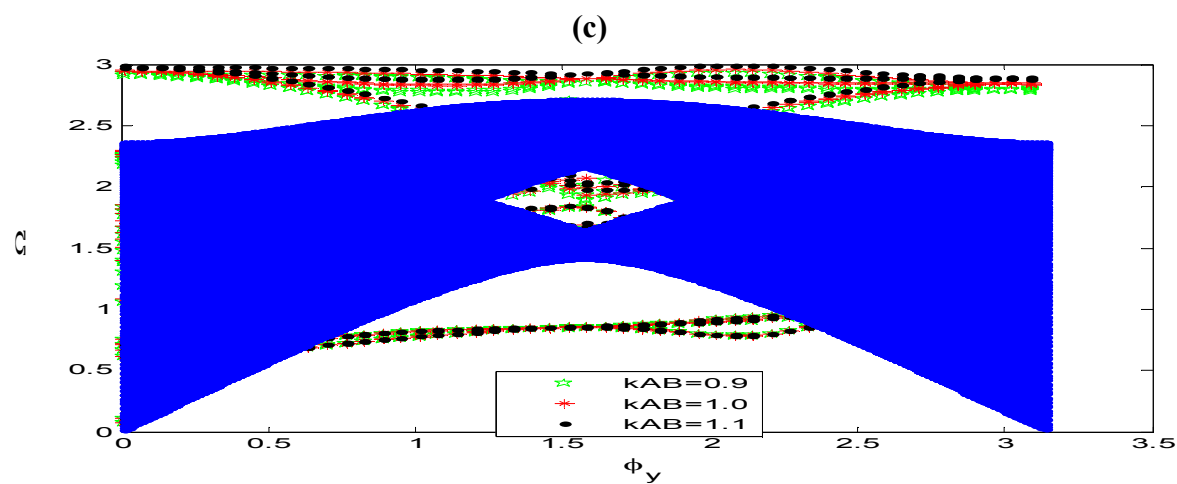
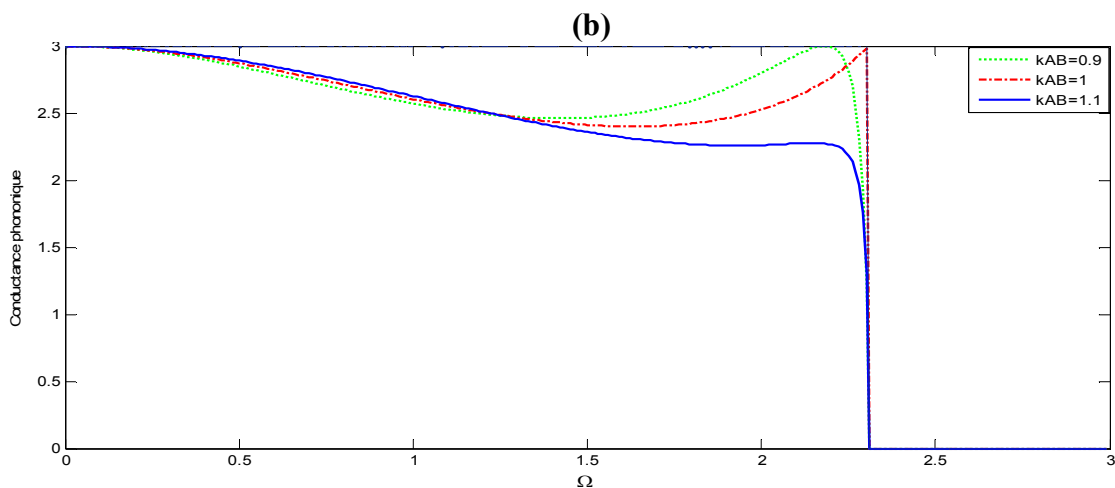
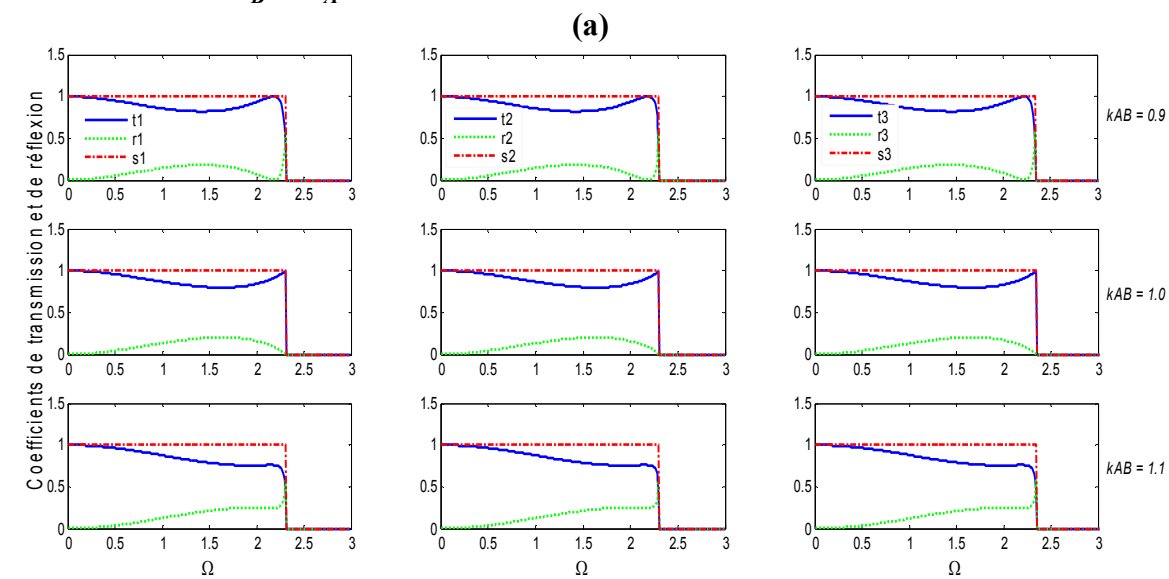
$$b) \text{ Constantes de forces homogènes : } k_{AB} = k_A,$$

$$c) \text{ Durcissement des constantes de forces : } k_{AB} > k_A.$$

Pour ces différentes valeurs de masses et des forces élastiques, nous discutons l'évolution des spectres de vibration : transmission/réflexion de phonons, conductance phononique, états localisés des phonons induits par l'interface et les densités d'états.

i) Réseau cc

1. Premier cas :  $m_B < m_A$



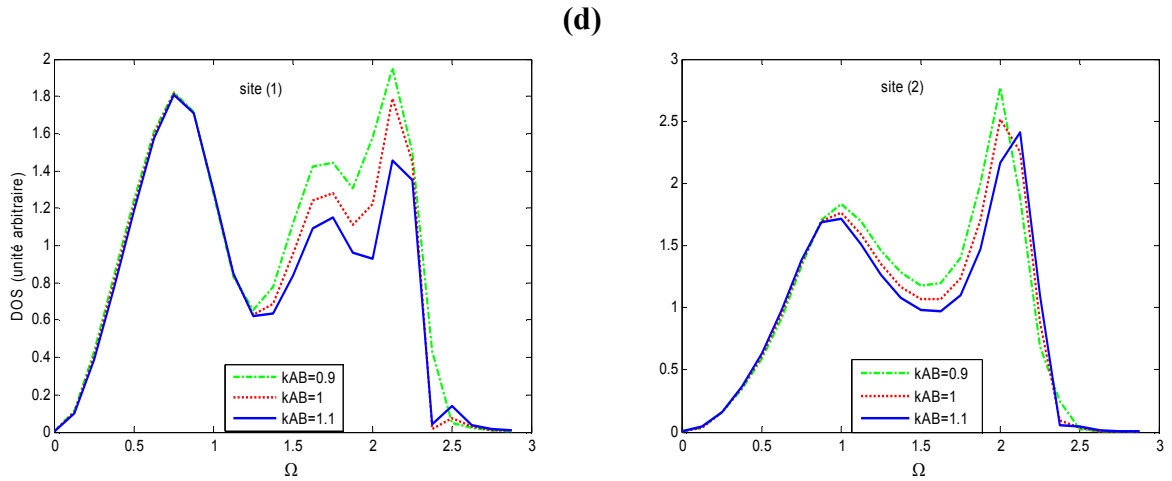
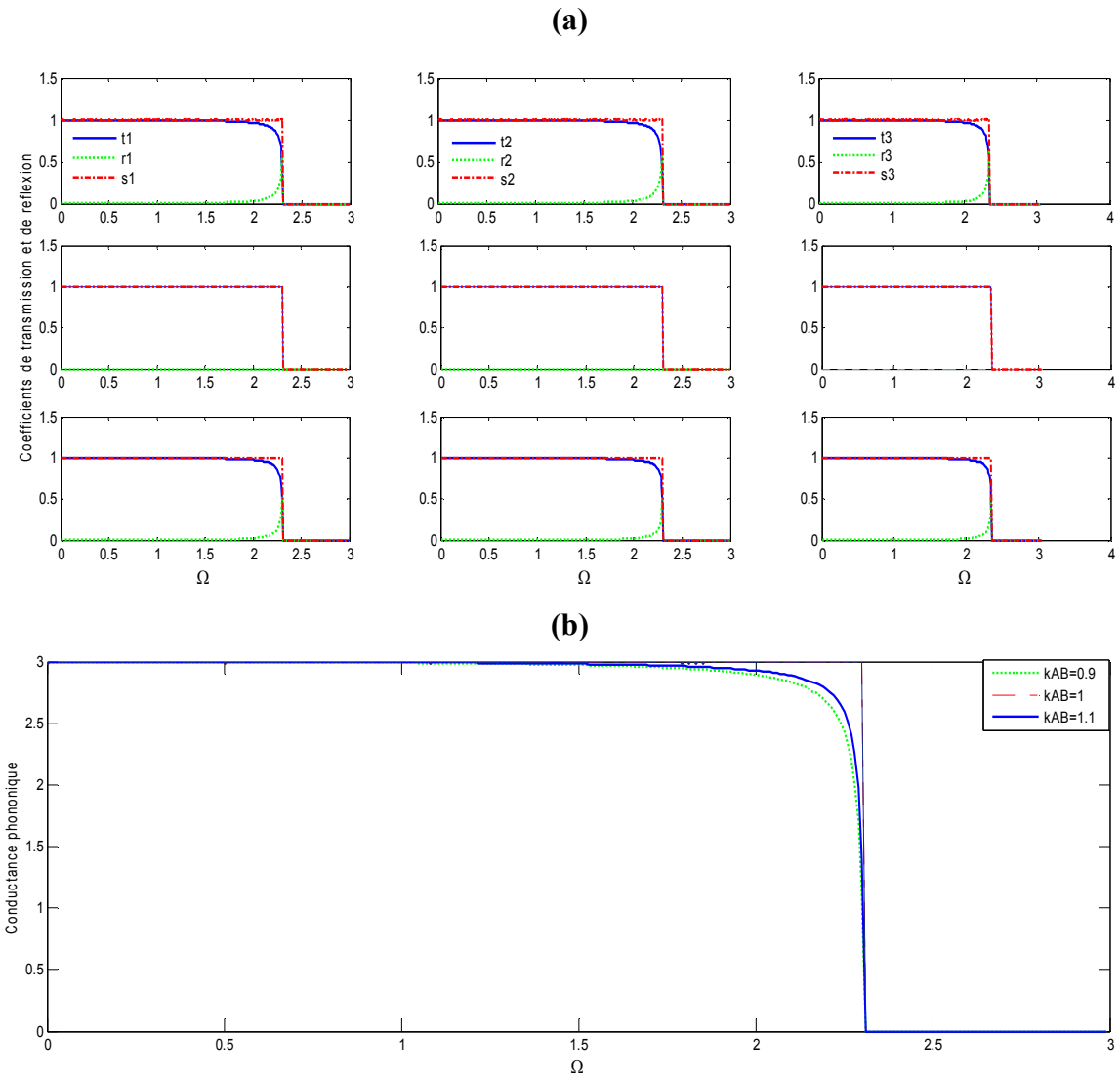
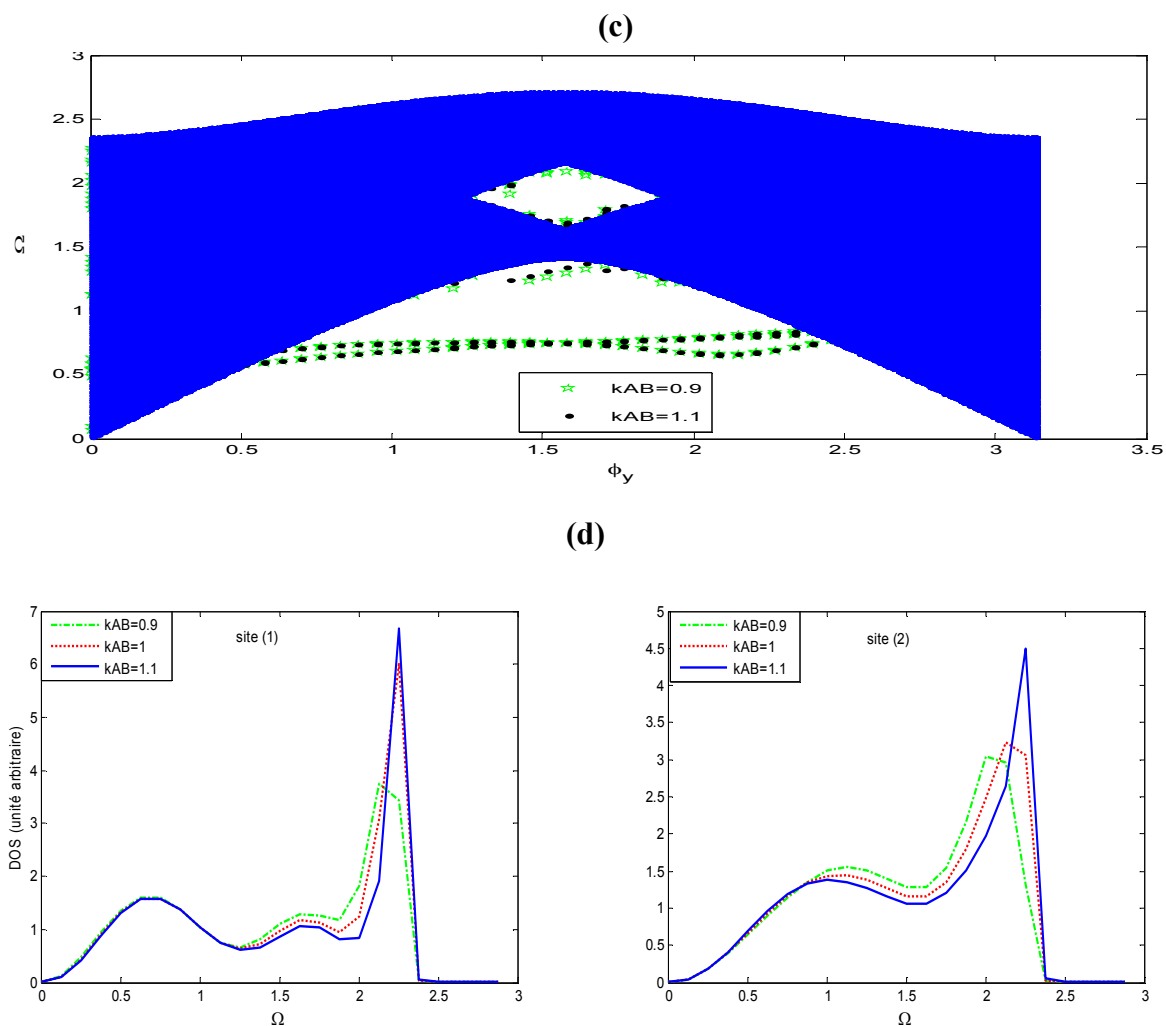


Figure (2.10) : Spectre de vibration d'une interface cc de type  $A/B$  pour  $m_B < m_A$ .

- (a) Coefficients de transmission et de réflexion.
- (b) Transmittance phononique.
- (c) Etats localisés de vibration.
- (d) Densités d'états phononiques.

2. Deuxième cas :  $m_B = m_A$

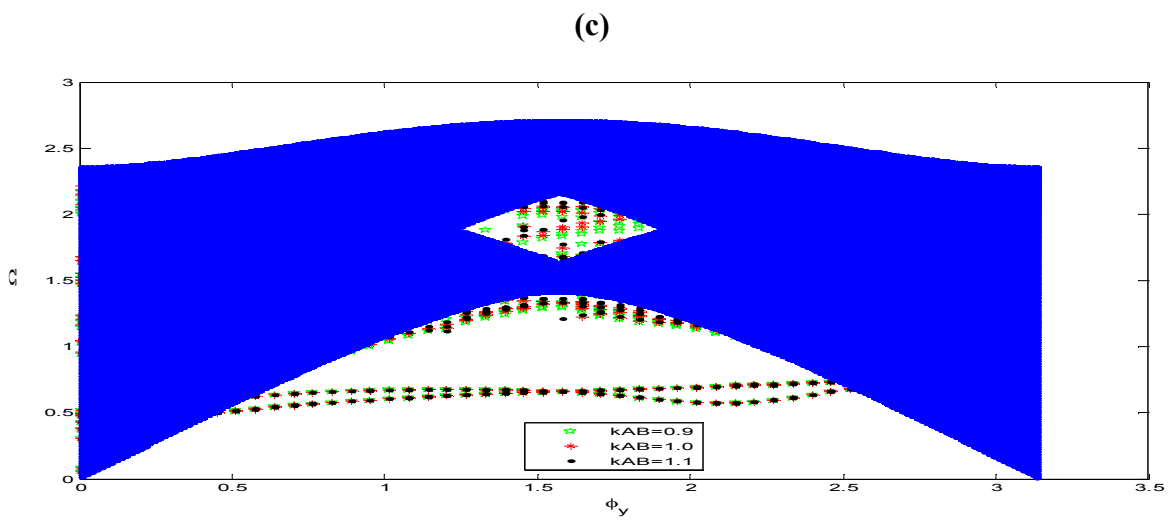
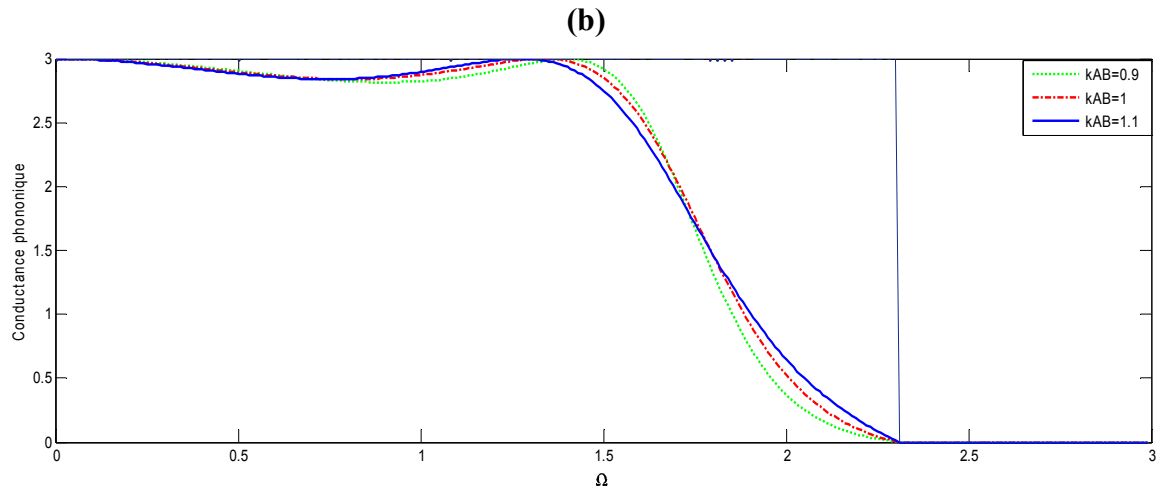
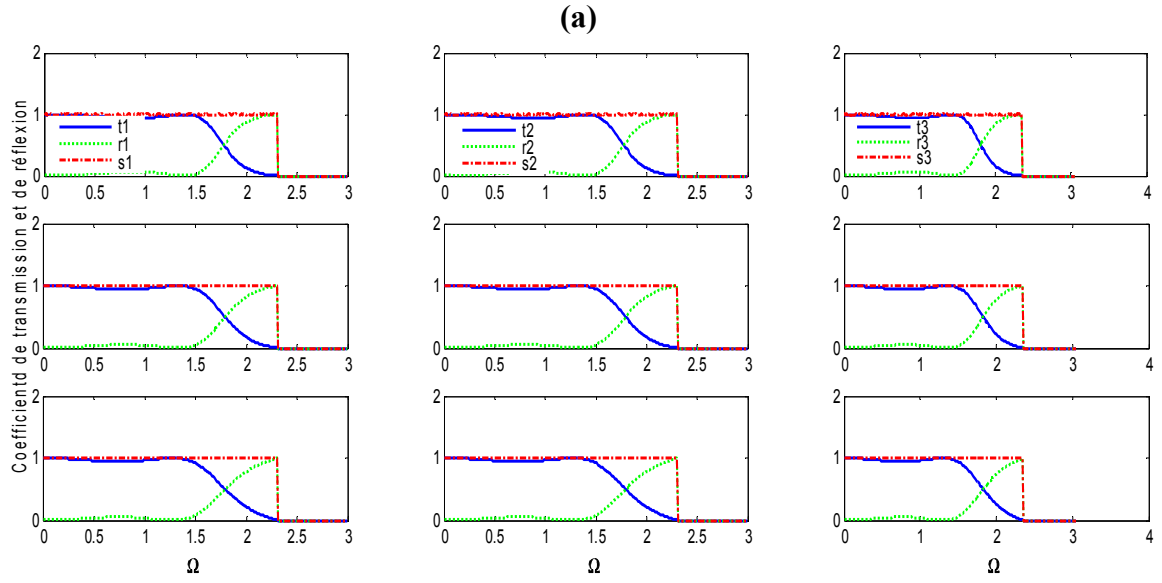


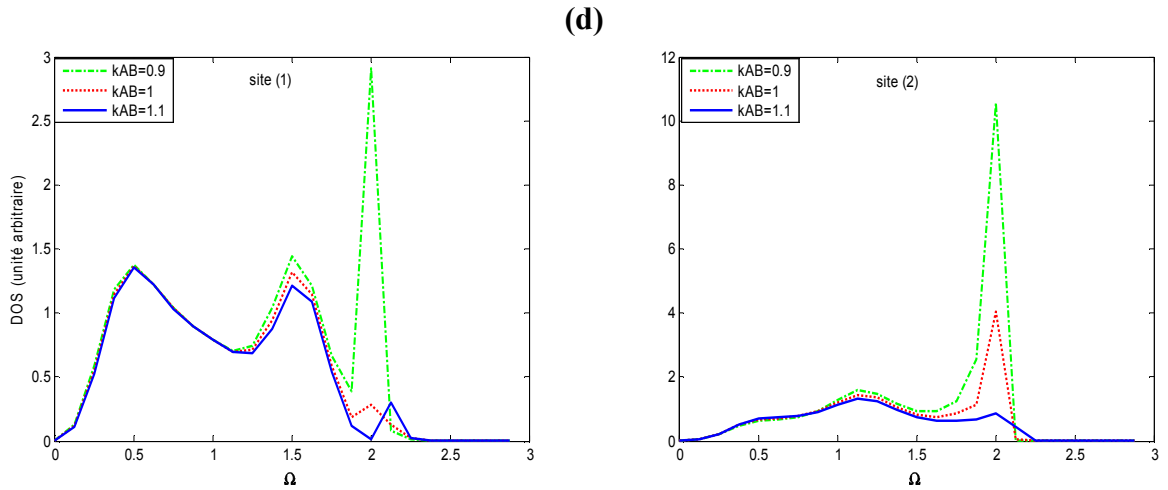


**Figure (2.11)** : Spectre de vibration d'une interface cc de type  $A/B$  pour  $m_B = m_A$ .

- (a) Coefficients de transmission et de réflexion.
- (b) Transmittance phononique.
- (c) États localisés de vibration.
- (d) Densités d'états phononiques.

3. Troisième cas :  $m_B > m_A$



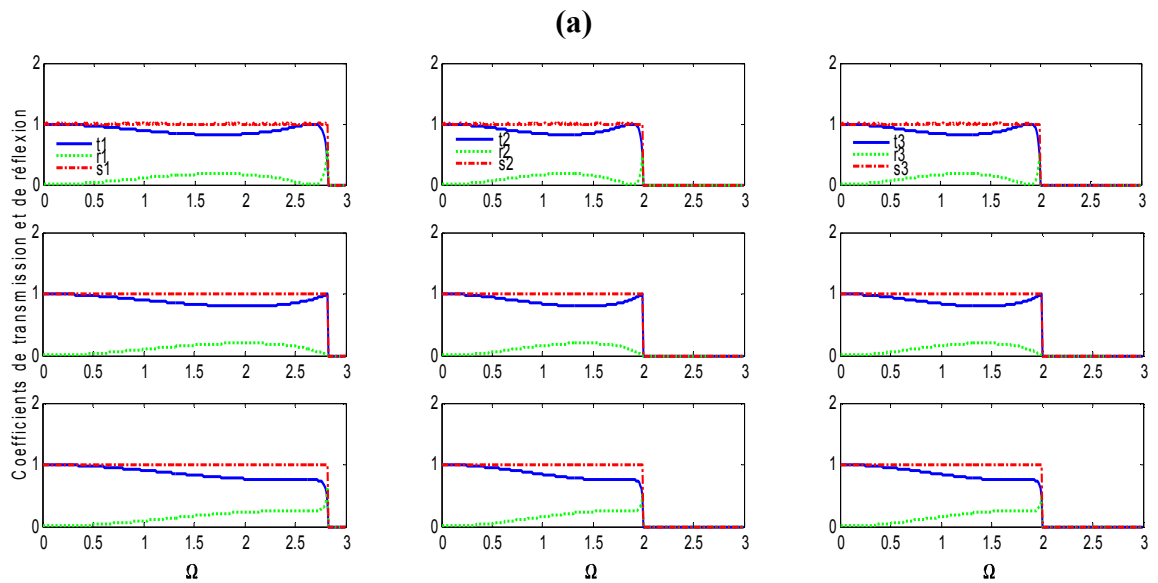


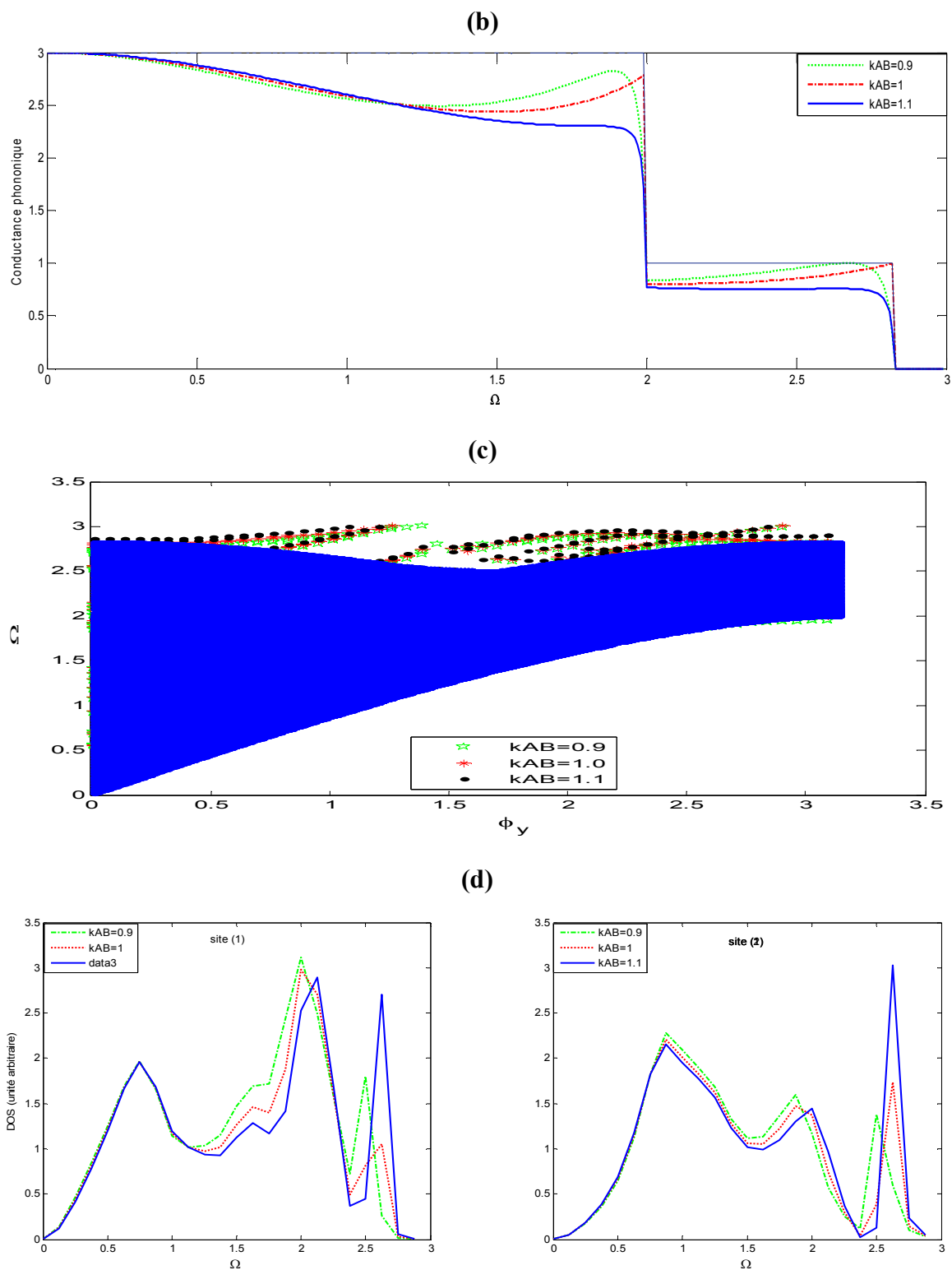
**Figure (2.12)** : Spectre de vibration d’une interface cc de type  $A/B$  pour  $m_B > m_A$ .

- (a) Coefficients de transmission et de réflexion.
- (b) Transmittance phonique.
- (c) Etats localisés de vibration.
- (d) Densités d’états phoniques.

**ii) Pour le réseau cfc**

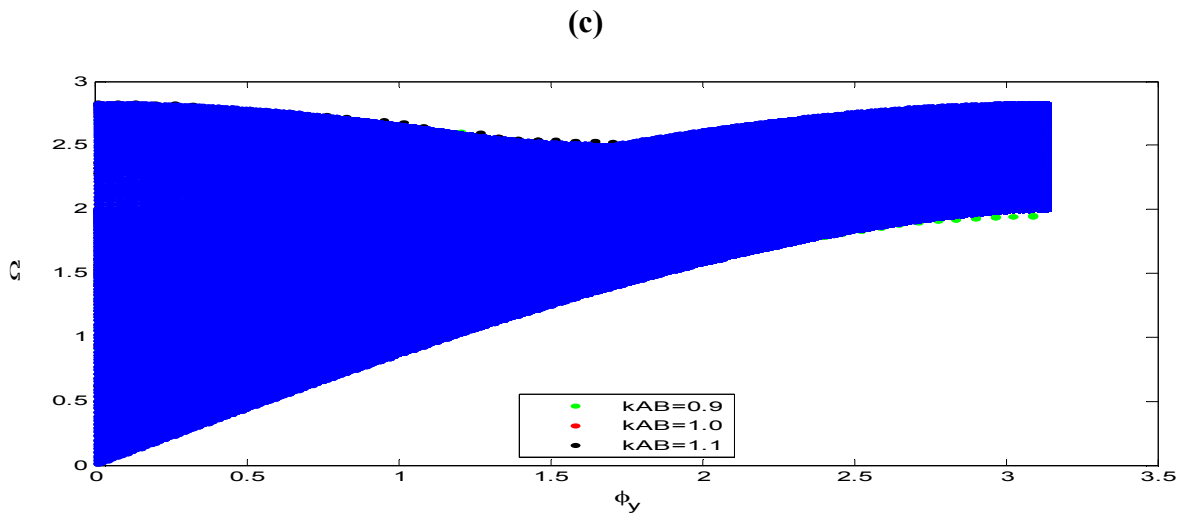
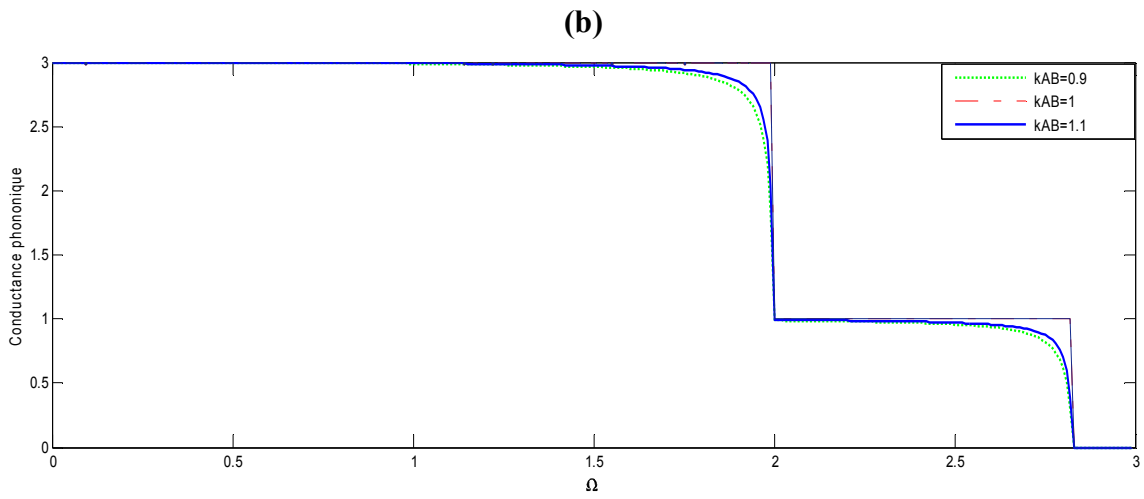
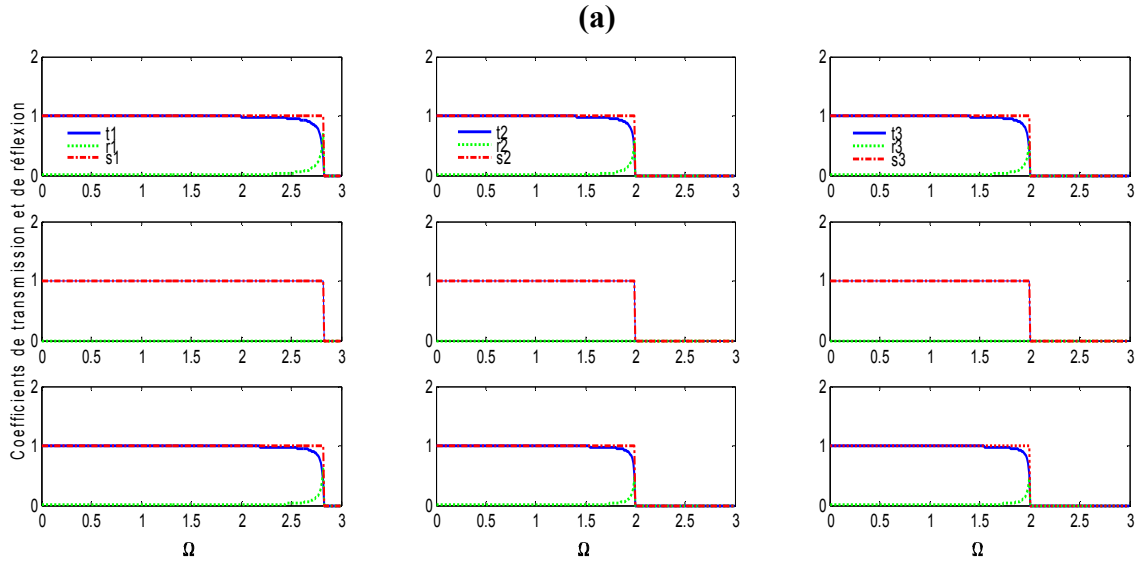
**1. Premier cas :  $m_B < m_A$**

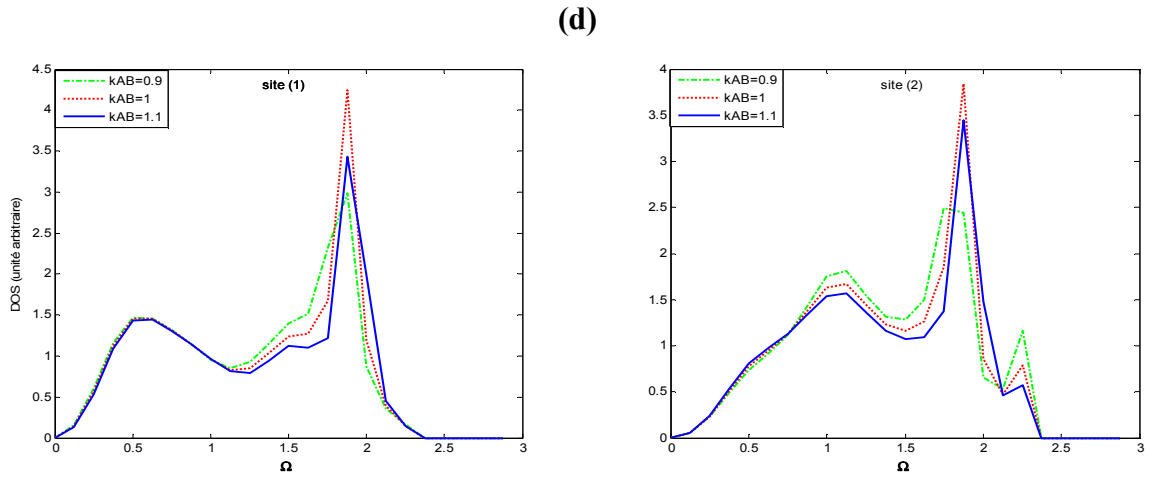




**Figure (2.13)** : Spectre de vibration d'une interface cfc de type  $A/B$  pour  $m_B < m_A$ .  
 (a) Coefficients de transmission et de réflexion.  
 (b) Transmittance phononique.  
 (c) Etats localisés de vibration.  
 (d) Densités d'états phononiques.

2. Deuxième cas :  $m_B = m_A$

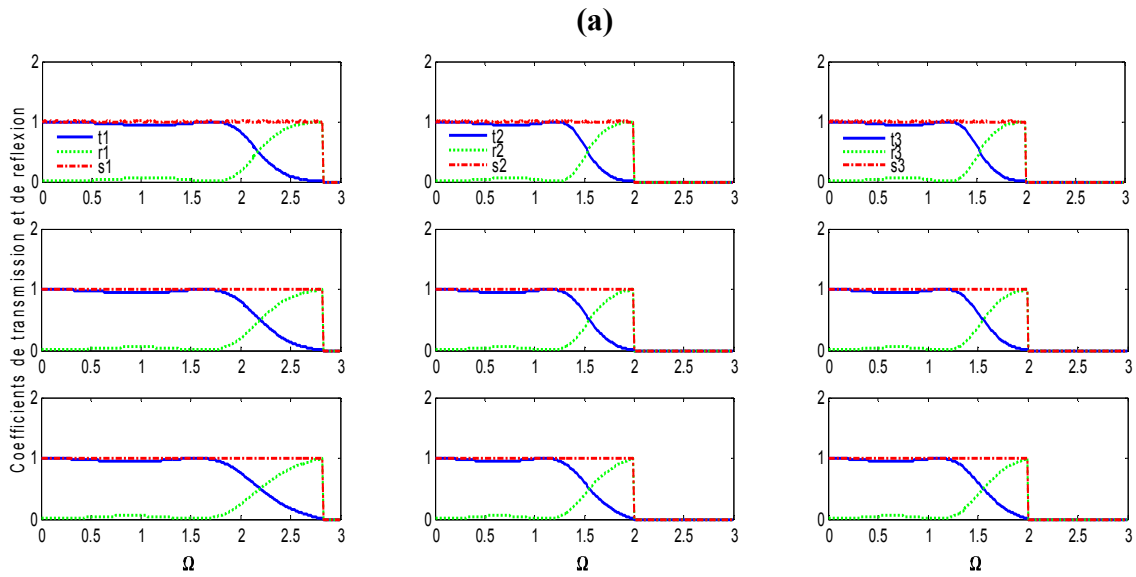




**Figure (2.14)** : Spectre de vibration d'une interface cfc de type  $A/B$  pour  $m_B = m_A$ .

- (a) Coefficients de transmission et de réflexion.
- (b) Transmittance phononique.
- (c) Etats localisés de vibration.
- (d) Densités d'états phononiques.

**3. Troisième cas :  $m_B > m_A$**



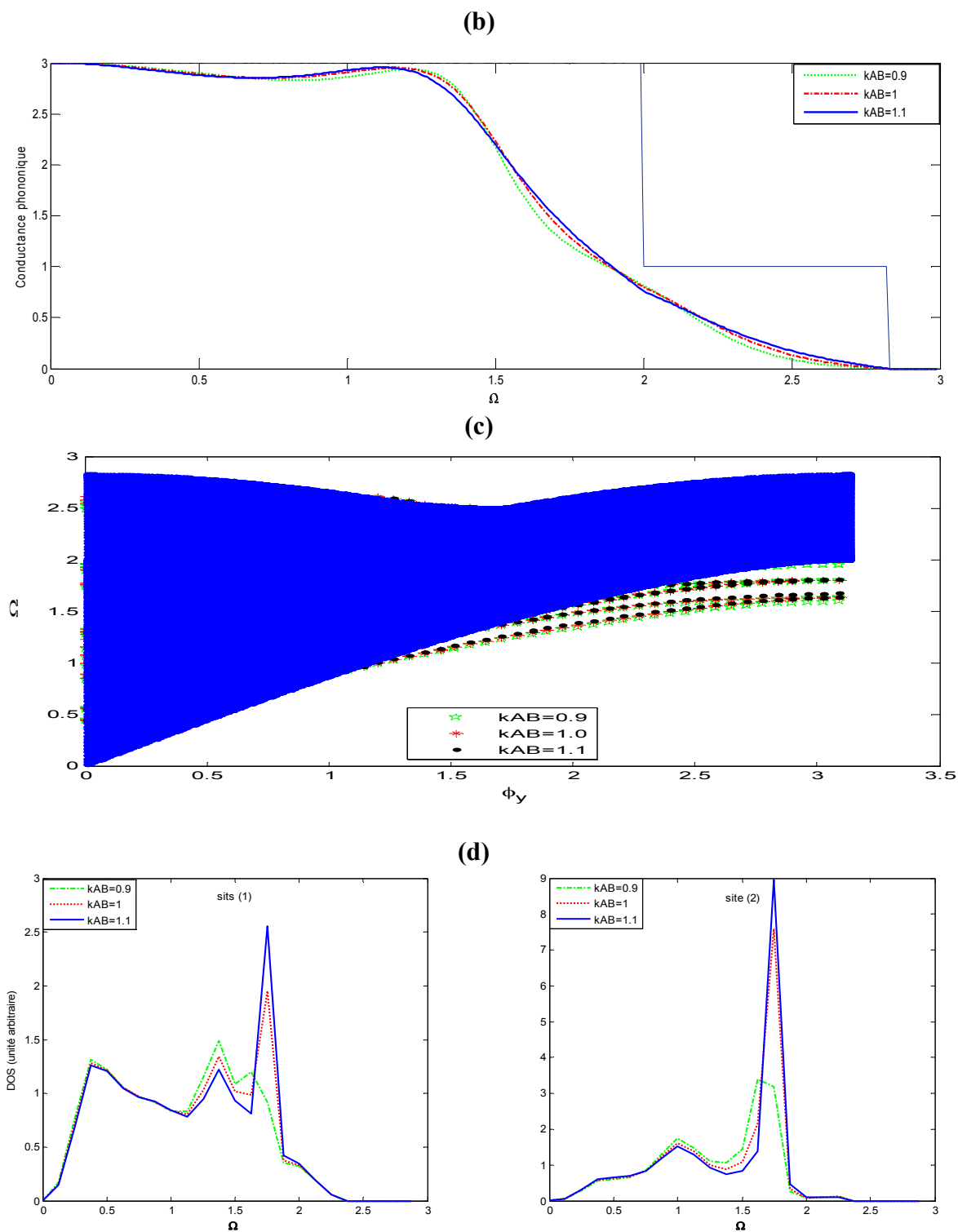


Figure (2.15) : Spectre de vibration d'une interface cfc de type  $A/B$  pour  $m_B > m_A$ .

- (a) Coefficients de transmission et de réflexion.
- (b) Transmittance phononique.
- (c) Etats localisés de vibration.
- (d) Densités d'états phononiques.

### Discussion des résultats obtenus

Les résultats numériques ont été réalisés par des programmes calculant les différentes grandeurs considérées. Pour des raisons de commodité, nous avons présenté pour chaque structure (cc et cfc) les spectres de vibration (Transmission et réflexion, conductance phononique, états localisés et densités d'états) pour trois types de masses. De plus, pour chaque type de masse, nous avons considéré trois types d'environnement élastique à savoir : l'adoucissement, l'homogénéité et le durcissement des constantes de force.

Notons que la condition d'unitarité ( $s_i = t_i + r_i = 1$ ), avec  $i = 1, 2, 3$  est vérifiée. Elle est utilisée comme test de contrôle des calculs des coefficients de transmission et de réflexion dans tous les cas étudiés. Nous remarquons que les courbes obtenues s'étendent sur la totalité des intervalles de propagation des structures parfaites correspondant aux domaines où les vitesses de groupe sont non nulles. Ces domaines de fréquences sont rappelés ci-après :

Pour la structure cc

Mode (1) :  $[\Omega_{1\min} = 0.00, \Omega_{1\max} = 2.35]$ , Mode (2) et (3) :  $[\Omega_{2\min} = 0.00, \Omega_{2\max} = 2.31]$ .

Pour la structure cfc

Mode (1) :  $[\Omega_{1\min} = 0.00, \Omega_{1\max} = 2.82]$ , Mode (2) et (3) :  $[\Omega_{2\min} = 0.00, \Omega_{2\max} = 2.00]$ .

#### *i) Transmission, réflexion et transmittance phononique*

Sur l'ensemble des courbes de transmission et de réflexion représentées, on note une grande similitude dans leurs comportements, face aux mêmes conditions de masses et d'environnement élastique, pour les deux structures cc et cfc. En effet, la forme de ces courbes suit la même allure et présente les mêmes fluctuations, mais uniquement pour des fréquences de vibration permises, pour chaque type de structure et pour chaque mode déjà définis dans la structure parfaite. Par conséquent, la discussion des courbes de transmission reste valable pour les réseaux étudiés.

Au vu des figures de la transmission obtenues dans le cas où  $m_B < m_A$ , on peut déduire que le durcissement des constantes élastiques entraîne une diminution de la transmission. D'ailleurs, on constate que la probabilité de transmission est maximale aux basses fréquences dans tous les cas des constantes élastiques. Puis, elle diminue avec l'augmentation de l'énergie de diffusion. Pour les cas de l'adoucissement et de l'homogénéité des constantes élastiques, les courbes se redressent pour atteindre leurs maximas justes avant de s'annuler à la limite de l'intervalle de propagation. Pour les

constantes élastiques dures, la courbe se stabilise avant de s'annuler aussi à la limite de l'intervalle de propagation. Globalement, ce comportement de la transmission est dû à la perte d'énergie des ondes élastiques au voisinage de l'interface; au cours de leurs déplacements elles acquièrent une énergie supplémentaire en interagissant avec les modes localisés dans la zone perturbée. De plus, les ondes élastiques interfèrent entre elles dans la région perturbée et donnent lieu à des ondes résultantes, avec des longueurs d'ondes particulières, dues aux multiples réflexions par les limites et la frontière du domaine interfacial. Malgré cela, la transmission présente une certaine stabilité après sa décroissance, puis elle s'annule. Ceci prêche à croire que cette situation est due au durcissement des constantes élastiques. Or, les résultats obtenus, pour des masses homogènes ( $m_A = m_B$ ), montrent que ce n'est nullement le cas vu que la transmission, qui a également la même allure dans le cas doux et dur est très légèrement supérieure dans le cas du durcissement. Dans le cas homogène ( $m_A = m_B$  et  $k_{AB} = k_A$ ), la transmission est totale sur tous les intervalles de propagation. On en conclut que c'est l'effet combiné du rapport de masse et des constantes élastiques qui provoque la diminution de la transmission.

Les résultats obtenus pour  $m_B > m_A$  confirment nos déductions, puisque là aussi la transmission est très légèrement supérieure dans le cas du durcissement bien que sa décroissance est bien plus accentuée.

Pour faire ressortir l'effet de la masse, on fixe la valeur de l'environnement élastique et on compare pour cette même valeur les résultats obtenus pour les différents types de masse.

La comparaison entre les figures (2.10a), (2.11a) et (2.12a) (dans le de cc) et (2.13a), (2.14a) et (2.15a) (dans le cas de cfc), nous permet de conclure que la décroissance de la transmission s'effectue d'une façon exponentielle aux environs de  $\Omega = 1.4$ , jusqu'à l'annulation dans le cas où  $m_B > m_A$ , alors que la tendance vers zéro se fait d'une façon brusque après un pic à la limite de l'intervalle de propagation pour  $m_B < m_A$  et pour  $m_A = m_B$ , et une certaine stabilité dans le durcissement quand  $m_B < m_A$ .

De plus, pour  $m_B < m_A$ , les transmissions s'annulent pour les hautes fréquences sans pour autant être de faible valeur puisque sa diminution ne dépasse en aucun cas le quart de sa valeur totale.

L'analyse des transmittance (ou conductance) phononique est réalisée pour les mêmes conditions (masses et environnements élastiques) considérées pour le calcul des coefficients de transmission et réflexion et ce pour les deux maillages étudiés.

Sur la figure de conductance phononique, les trois courbes correspondant aux trois environnements élastiques sont pratiquement confondues jusqu'à la valeur de  $\Omega = 1.47$ , qui correspond à une transmittance de hauteur 2.47. On constate une très forte augmentation dans le cas doux, moins forte mais en pic pour le cas homogène, et une stabilité pour le cas dur. Les trois courbes s'annulent pour les fréquences maximales permises pour les trois modes de phonon. L'effet des constantes élastiques se fait ressentir beaucoup plus par la forme de la décroissance et l'allure générale des trois courbes.

Pour le réseau cfc la conductance suit le même comportement avec une chute brusque de la conductance pour la valeur de  $\Omega = 2.00$ , qui est la limite du domaine de propagation des modes 2 et 3, ce qui n'est pas le cas dans le réseau cc, où les trois modes se rejoignent dans une dégénérescence dans la limite  $\Omega = 2.31$ .

Pour valider notre modèle théorique général, nous avons réalisé une application afin de confirmer nos prédictions dans le cas d'une interface. Nous avons opté les interfaces Cu/Ni et son opposé Ni/Cu. Les deux sous-systèmes situés de part et d'autre de la zone interface sont de masses comparables ( $m_{\text{Cu}} = 0.1054 \cdot 10^{-24}$  kg et  $m_{\text{Ni}} = 0.0974 \cdot 10^{-24}$  kg). Dans l'application, l'analyse numérique est effectuée pour deux valeurs de  $k_{AB}$ , déterminant un environnement élastique dans la région d'interface.

i) Pour l'interface Cu/Ni, la constante de force est définie comme suit :  $k_{AB} = (k_{\text{NiNi}}/k_{\text{CuCu}})/2$ . Elle a comme valeur  $k_{AB} = 1,25$ . Elle correspond au cas où les ondes élastiques se propagent à partir du Cu vers Ni via l'interface.

ii) Pour l'interface Ni/Cu, la constante de force est définie comme suit :  $k_{AB} = (k_{\text{CuCu}}/k_{\text{NiNi}})/2$ . Elle a comme valeur  $k_{AB} = 0,83$ . Elle correspond au cas où les ondes élastiques se propagent à partir du Ni vers Cu via l'interface.

Les deux cas cités correspondent respectivement au durcissement et à l'adoucissement des contraintes au niveau de la zone d'interface.

Les fréquences maximales des phonons calculées à partir nos calculs numériques sont comparables à celles mesurées expérimentalement. Nous les avons résumées sur le tableau ci dessous :

Métaux	Fréquences angulaires maximales des phonons (THz)	
	Calculées	Expérimentales
Cu	$\omega_{\max} = 43.28$	$\omega_{\max} = 43.96$ [16]
Ni	$\omega_{\max} = 55.30$	$\omega_{\max} = 55.26$ [17]

Pour plus de détails, le lecteur peut consulter l'article cité à la référence [18].

### ii) Les états localisés

Les états de phonons localisés sont représentés sur les figures (2.10c), (2.11c) et (2.12c) pour la structure cc, et sur les figures (2.13c), (2.14c) et (2.15c) pour la structure cfc. Dans les deux cas, les courbes sont schématisées pour les mêmes rapports de masses cités précédemment. Et chacune de ces situations est illustrée, aussi, pour un environnement élastique doux, homogène et dur.

Une forte présence d'états localisés a été constatée quand  $m_B < m_A$  pour les deux structures, où l'on observe des branches de phonons dans les gaps supérieurs des bandes passantes des phonons des régions parfaites représentées en bleu, c'est-à-dire, pour les fréquences supérieures des intervalles de propagation. Pour la structure cc, on remarque leur présence même pour les basses fréquences, où l'on distingue quelques états au centre de la bande passante et deux branches distinctes dans le gap inférieur. Ces états subsistent pour les deux autres types de masses, tandis que ceux du gap supérieur disparaissent. Pour la structure cfc, l'alourdissement des atomes de type  $B$  induit l'apparition de nouveaux états visibles dans les gaps inférieurs. Ces états sont majoritairement confondus pour l'environnement élastique doux et homogène et dur pour les basses fréquences, et légèrement plus élevés dans le cas du durcissement pour les hautes fréquences.

Notons qu'il n'existe pas d'états localisés pour des masses et des constantes élastiques homogènes.

Les états localisés interagissent avec l'onde incidente qui perd de son énergie au niveau de l'interface ce qui induit une augmentation de la transmission dans certaines zones.

### iii) Les densités d'états phononiques (DOS)

Les spectres des densités d'états exprimés en unités arbitraires, en fonction de la fréquence normalisée  $\Omega$  dans la première zone de Brillouin suivant la direction ( $Ox$ ), pour les deux sites irréductibles (1) et (2) de la zone interfaciale, sont représentés sur les figures (2.10d), (2.11d) et (2.13d) dans le cas du réseau cc, et sur les figures (2.14d), (2.15d) et (2.16d) pour

le réseau cfc. Ils sont définis pour les mêmes types de masses et de contraintes élastiques définis précédemment. Les densités d'états localisés sont le résultat de la somme des carrées des amplitudes des mouvements atomiques des sites irréductibles appartenant à la zone perturbée.

On s'aperçoit qu'à basses fréquences, les densités d'états sont complètement confondues jusqu'aux fréquences désignées dans le tableau ci-dessous, puis se différencient dans le reste de l'intervalle.

	Réseau cc		Réseau cfc	
	Site (1)	Site (2)	Site(1)	Site(2)
$m_B < m_A$	1.25	0.87	1.12	0.75
$m_B = m_A$	1.25	0.87	1.12	0.75
$m_B > m_A$	1.12	0.87	1.00	0.75

On se rend compte, à travers ces valeurs qu'à basses fréquences, les densités d'états sont insensibles à l'environnement élastique et aux types de masses pour les deux structures étudiées, à l'exception d'un léger décalage pour  $m_B > m_A$  est relevé sur les sites (1) des deux structures, où l'effet de l'environnement masse-contraintes se fait ressentir avant les autres types de masses.

Au-delà de ces fréquences, les densités d'états du système cc augmentent avec le relâchement des contraintes sauf, dans le cas de masses homogènes où seul l'effet des contraintes élastiques subsiste ; la tendance est renversée et l'amplitude des DOS est donc maximale pour des contraintes dures. Cette situation est due à l'absence d'états localisés dans ces conditions de masses et de contraintes. Dans le système cfc, la densité d'état augmente avec le durcissement des contraintes, à part le cas de masses homogènes où les pics sont plus importants pour des contraintes homogènes.

Plusieurs oscillations et pics résonnants dont certaines sont de type Fano, plus nombreux pour le site (1) dans les deux structures, sont observés à différentes fréquences sont résumés dans le tableau ci-dessous.

	Réseau cc						Réseau cfc					
	Site (1)			Site (2)			Site (1)			Site (2)		
$k_{AB}$	0.9	1.00	1.1	0.9	1.00	1.1	0.9	1.00	1.1	0.9	1.00	1.1
$m_B < m_A$	0.75	0.75	0.75	1.00	1.00	1.00	0.75	0.75	0.75	0.8	0.8	0.8
	1.75	1.75	1.75				1.62	1.62	1.62	1.87	1.87	2.00
	2.12	2.12	2.12	2.00	2.00	2.12	2.00	2.00	2.12			
							2.5	2.62	2.62	2.5	2.62	2.62
$m_A = m_A$	0.75	0.75	0.75	1.12	1.00	1.00	0.62	0.62	0.62	1.12	1.12	1.12
	1.62	1.62	1.62				1.5	1.5	1.5	1.87	1.87	1.87
	2.12	2.25	2.25	2.25	2.12	2.00	1.87	1.87	1.87	2.25	2.25	2.25
$m_B > m_A$	0.5	0.5	0.5	1.26	1.26	1.26	0.37	0.37	0.37	1.00	1.00	1.00
	1.5	1.5	1.5				1.37	1.37	1.37			
	2.00	2.00	2.12	2.00	2.00	2.00	1.62	1.75	1.75	1.62	1.75	1.75

Aux hautes fréquences, même si les pics sont observés aux mêmes fréquences, ou à des fréquences proches, leurs amplitudes sont différentes, compte tenu de leur environnement atomique et de leurs champs de forces et des masses considérées.

Certaines de ces fréquences sont caractéristiques de la structure puisqu'on les retrouve, quel que soit le type de masse. Certaines autres fréquences sont retrouvées pour des pics des deux sites (1) et (2). Ce résultat indique que ce sont manifestement les mêmes phonons qui excitent les modes résonants dans les deux systèmes semi-infinis de part et d'autre du domaine interfacial.

## Conclusion

Nous nous sommes intéressés à la dynamique vibrationnelle de deux systèmes semi infinis reliés par une interface commune, constituant une nanojonction atomique pour ses deux sous-systèmes à cristallisation cc et cfc, dans différentes conditions de masses et de contraintes élastiques. L'impact de cette interface a été observé à travers les spectres de transmission/réflexion, de transmittance phononique, des états localisés et des densités d'états. Ces grandeurs physiques sont obtenues par un modèle de calcul du transport de phonons valable pour toutes les structures cubiques.

**Références**

- [1] P. Masri, J. Phys. Lett. 40, 629 (1979).
- [2] H. Ibach, Phys. Rev. Lett. 27, 253 (1971).
- [3] H. Ibach, M. Nielsen, H. Horn, Proc. Int. Conf. Vibrations in Adsorbed Layers (Julich, 1978).
- [4] V. Bortolani, F. Nizzoli, G. Santoro, A. Marvin and J. R. Sandercock, Phys. Rev. Lett. 43, 224 (1979).
- [5] R. Landauer, Phys. 21, 863 (1970).
- [6] R. Landauer, Z. Phys. B 68, 217 (1987).
- [7] R. Landauer, J. Phys.: Condensed Matter 1, 8099 (1989).
- [8] C. Berthod, F. Gagel and K. Maschke, Phys.Rev.B50, 18299 (1994).
- [9] O. Rafil, Thèse de doctorat d'état de, Université du Maine (1993).
- [10] C. Kittel, *Introduction à la Physique de l'Etat Solide*, Dunod édition (1995).
- [11] F. Gagel and Maschke, Phys. Rev. B 52, 2013 (1995).
- [12] R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil and M. Belhadi, Mod. Phys. Lett. B 19, 625 (2005).
- [16] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, and A. Khater, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997).
- [13] M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, K. Maschke, Eur. Phys. J. B 15, 435 (2000).
- [14] M. Belhadi, A. Khater, K. Maschke, Surf. Rev. Lett. 11, 87 (2004).
- [15] Y. Pennec, A. Khater, Surf. Sci. Lett 348, 82 (1995).
- [16] R. Xu, H. Hong, P. Zschack, T.C. Chiang, Phys. Rev. Lett. 101 (085504/1-4) (2008).
- [17] S. Kazanc, S. Ozgen, Turk. J. Phys 32, 315 (2008).
- [18] G. Belkacemi, B. Bourahla, J. Phys. Chemistry of Solids 75, 732 (2014).

## CHAPITRE III

### Impact des lames nanométriques insérées en sandwichs sur les propriétés vibrationnelles des structures cc et cfc

#### Sommaire

---

---

Introduction

I. Techniques d'élaboration des couches minces

I.1. Techniques de dépôt physique en phase vapeur

I.2. Techniques de dépôt chimique en phase vapeur

II.1. Nanojonction de type  $A/B/A$

II.1.1. Résultats obtenus pour le réseau cc

II.1.2. Résultats obtenus pour le réseau cfc

III. Effet de la variation du nombre de films ultraminces sur la dynamique du réseau

III.1. Nanojonction de type  $A/B/A/B/A$

Discussion des résultats obtenus

Conclusion

---

---

## Introduction

Les couches ultraminces sont des nanomatériaux dans une direction déterminée de l'espace. Elles sont déposées sous forme de lames atomiques sur un matériau appelé substrat. Elles ont suscité l'intérêt des scientifiques L. Esaki et R. Tsu des laboratoires IBM dans les années 1970, qui se sont consacrés à l'étude de la croissance des couches minces des super-réseaux.

La naissance de cette discipline a révolutionné durablement la physique des semi-conducteurs. Les études s'y rapportant sont stimulées par le progrès réalisé dans le domaine de techniques d'élaboration [1] et de caractérisation [2-3], développées dans les années 1980, notamment par les laboratoires Bell.

La possibilité de synthétiser de façon contrôlée, de fonctionnaliser et de perfectionner les films ultraminces, afin de répondre aux besoins des nanotechnologies, confère à ces matériaux un intérêt grandissant. Leur utilisation économique en rapport avec leurs propriétés physiques a élargi leurs domaines d'applications, grâce à leur intégration dans les dispositifs micro et nanoélectroniques [4-5] (nano-composants, capteurs solaires, nano-mémoires), les systèmes micro électromécaniques (MEMS) [6-7] ainsi que pour les besoins des télécommunications, de la santé, etc.

Les couches ultraminces représentent donc un grand potentiel d'applications qui font appel à plusieurs effets physiques, qu'il faudra concilier pour une utilisation optimale. Leur maîtrise est nécessaire voire indispensable et la simulation numérique offre un moyen incontournable pour la prédiction des comportements probables des grandeurs physiques. Dans ce contexte, on se propose d'apporter notre contribution à la compréhension et à l'explication des propriétés vibrationnelles des couches atomiques ultraminces confinées dans des structures à caractère massif.

Ayant abordé précédemment le problème d'une seule interface, nous allons étendre nos investigations dans ce chapitre aux systèmes multi-interfaces pour explorer dans la première phase le comportement vibrationnel d'un système cubique perturbé par la présence d'un film ultramine (structure de type  $A/B/A$ ) constituant ainsi un système à double interfaces, et dans la seconde partie l'effet de l'augmentation du nombre de films minces disposés d'une manière alternée via une étude comparative des résultats obtenus pour les systèmes  $A/B/A$  et  $A/B/A/B/A$  et les interfaces de type  $A/B$ .

### I. Techniques d'élaboration des couches minces

Plusieurs techniques ont été mises au point pour l'élaboration des films minces. On en distingue deux principales catégories: les méthodes physiques PVD (Physical Vapor

Deposition), telle que la pulvérisation ou l'évaporation, et les méthodes chimiques, comme la CVD (Chemical Vapor Deposition). Les méthodes physiques sont, en général, utilisées dans la recherche, alors que les méthodes chimiques sont utilisées dans l'industrie, pour des raisons économiques se rapportant à leurs qualités et leurs rendements.

On différencie les deux méthodes (PVD) et (CVD) par le moyen utilisé pour produire la vapeur. Pour la PVD, la vapeur est le résultat de phénomènes physiques tels que évaporation thermique, pulvérisation, ... tandis que dans la CVD, elle résulte d'une réaction chimique ou de la décomposition d'une molécule.

### I.1. Techniques de dépôt physique en phase vapeur

Le dépôt physique en phase vapeur est un ensemble de méthodes de dépôts d'atomes ou de molécules d'un matériau à déposer, qui viennent adhérer sur le substrat à recouvrir en passant par un milieu passif (vide ou atmosphère inerte) ou actif (plasma, gaz réactif). On se contentera dans ce qui suit d'en citer que les plus importantes.

#### a) Epitaxie par jet moléculaire

La technique de l'épitaxie par jets moléculaire [8-9] ou MBE en anglais (Molecular Beam Epitaxy) est une technologie ultravide, qui consiste à évaporer soit par effet joule, soit par rayonnement ou par bombardement électronique, un matériau et à placer un substrat en face du jet d'atomes ou de molécules évaporées. Le dépôt se fait de telle sorte que le réseau atomique de la couche déposée se trouve en accord de position avec le réseau cristallographique du substrat.

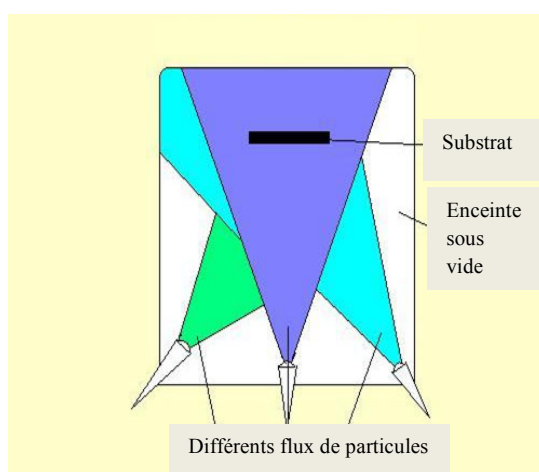


Figure (3.1) : Schéma d'une épitaxie par jet moléculaire.

### b) La pulvérisation cathodique

Cette technique est très appréciée en laboratoires comme en industrie pour sa rapidité de mise en œuvre et son moindre cout. Elle repose sur le principe de condensation d'une vapeur métallique issue d'une source solide sur un substrat [10-11]. En effet, l'application d'une différence de potentiel entre une cathode cible constituée du matériaux à déposer, et les parois du réacteur au sein d'une atmosphère raréfiée, permet la création d'un plasma à partir d'un gaz inerte. Les ions positifs, de ce plasma, sont accélérés par le champ électrique engendré par la différence de potentiel et iront bombarder la cible. Les collisions qui en découlent, provoquent la pulvérisation d'atomes ou d'agrégats d'atomes de la cible qui vont se condenser sur le substrat. Ce procédé ne s'effectue pas en ultra vide et les dépôts obtenus ne sont pas épitaxiés, mais sont plutôt des dépôts polycristallins, amorphes ou texturés.

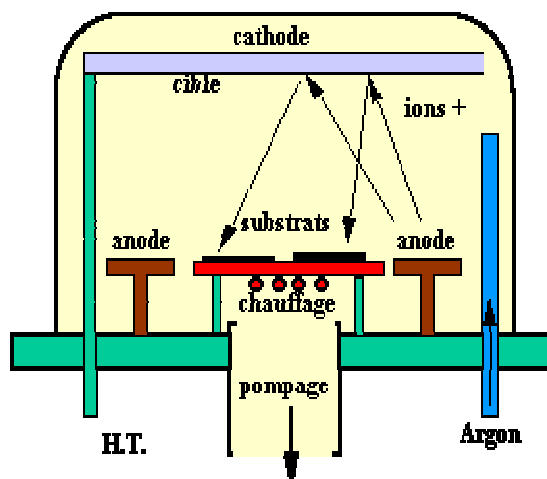
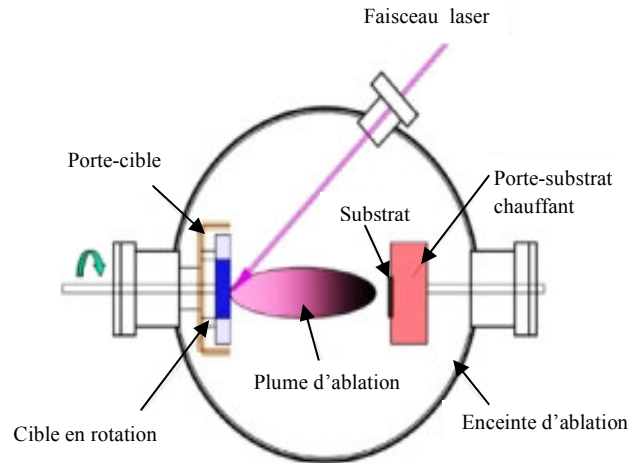


Figure (3.2) : Schéma de la technique de dépôt par pulvérisation cathodique.

### c) Ablation laser

Cette technique utilise les avantages des deux méthodes citées précédemment. Elle permet l'obtention de couches épitaxiées puisque l'élaboration se fait sous UHV, et utilise le même principe de cible de la pulvérisation cathodique. Un faisceau laser est focalisé sur une cible constituée du matériau à déposer. L'interaction cible-faisceau entraîne la liquéfaction d'une fine couche du matériau puis sa vaporisation. Elle sera recueillie sur un substrat placé en vis-à-vis de la tache laser [12].



**Figure (3.3) :** Schéma de la technique de dépôt par ablation laser.

## I.2. Techniques de dépôt chimique en phase vapeur

Les techniques de dépôt chimique en phase vapeur (CVD), consistent à déposer un film sur un substrat à partir de réactions chimiques entre précurseurs mis sous leur forme gazeuse au moyen d'une énergie d'activation. Ce procédé est souvent utilisé dans l'industrie des semi-conducteurs pour produire des couches minces, sous des formes variées : monocristallins, polycristallins, amorphes, épitaxiés.

Les dépôts se font à pression variable, mais il faut systématiquement un apport énergétique pour favoriser ces réactions. Selon les matériaux à déposer, il existe plusieurs réactions chimiques et plusieurs méthodes dont quelques-unes sont rapportées ci-dessous.

### a) CVD thermique

Le CVD est le procédé le plus important des méthodes industrielles de dépôt chimique en phase vapeur. En effet, d'une manière générale, la pièce à recouvrir est positionnée dans la zone chauffée d'un réacteur. Une phase gazeuse contenant des molécules (précurseurs CVD) avec des éléments à déposer, est introduite dans le réacteur. La chaleur (l'énergie thermique) fournie permet la décomposition des précurseurs au voisinage de la pièce ou sur sa surface. Les produits volatils résultant des réactions sont évacués du réacteur à l'aide d'un système de pompage approprié.

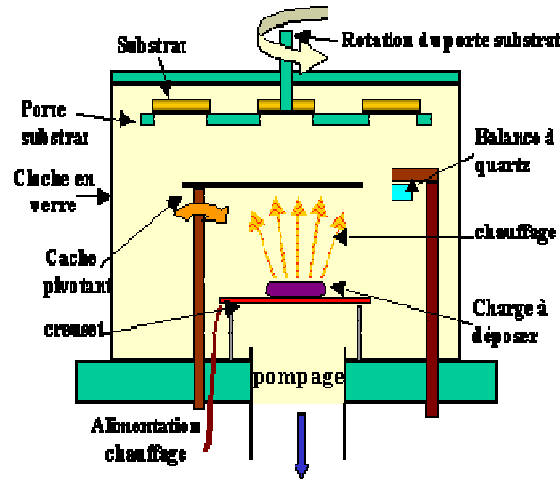


Figure (3.4) : Schéma de la technique de dépôt par évaporation thermique.

### b) CVD assistée par plasma PECVD

Le principe du dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma [13] PECVD, (*Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition*, en anglais) consiste à dissocier les précurseurs à déposer à basse température, créant ainsi un plasma grâce à un apport énergétique sous forme électromagnétique. Toutefois, afin d'améliorer la qualité du matériau des couches déposées, il est nécessaire de chauffer "légèrement" les substrats, quelques centaines de degrés éventuellement, pour assurer la croissance du film.

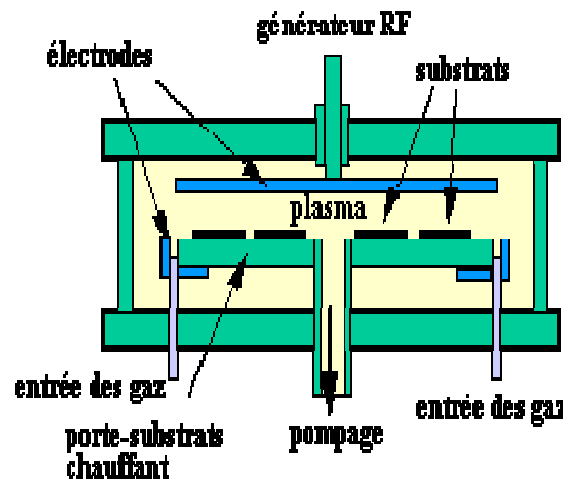


Figure (3.5) : Schéma de la technique de dépôt PECVD.

### c) L'Atomic Layer Deposition

L'Atomic Layer Deposition (ALD) [14] est un procédé de dépôt de couches minces atomiques. Le principe consiste à exposer une surface successivement à différents précurseurs chimiques afin d'obtenir des couches ultra-minces. Il est utilisé dans l'industrie des semi-conducteurs. Il consiste à injecter successivement des précurseurs gazeux sur la surface du substrat l'un après l'autre, en prenant le soin de purger la chambre de réaction après chaque injection. L'avantage de cette technique est évidemment de déposer des couches de très faibles épaisseurs de haute pureté d'un très grand nombre de matériaux.

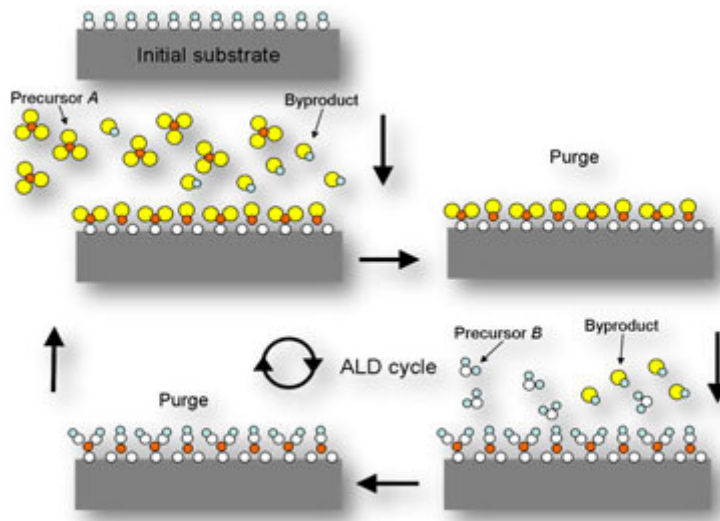


Figure (3.6) : Schéma de la technique de dépôt ALD.

## II. Diffusion des phonons via un film mince inséré en sandwich dans une structure cubique

Un film mince, de taille nanométrique, intercalé entre deux structures semi infinies donne naissance à des systèmes en structure sandwich avec des propriétés que leurs constituants élémentaires ne possèdent pas individuellement. Ces propriétés leur permettront de remplir de nombreuses fonctions techniques. Pour tirer le meilleur parti de leurs capacités, leur étude est indispensable. Dans le domaine vibrationnel, La diffusion d'ondes élastiques en présence de ce type de nanojonction est déterminée en utilisant le formalisme de transport proposé par Landauer et Büttiker [15-18], dans le cadre de l'approximation harmonique des forces centrales [19]. La méthode adoptée pour cette étude est la méthode de raccordement [20-23] décrite au chapitre II.

### II.1. Nanojonction de type $A/B/A$

Notre système modèle est constitué de deux systèmes semi-infinis d'un même matériau  $A$  dont les atomes sont de masses  $m_A$ , reliés par un film ultramince, composé de cinq plans atomiques d'un matériau  $B$ , de masse  $m_B$ , de même cristallisation que le matériau  $A$ . Les constantes élastiques des matériaux  $A$  et  $B$  sont notées, respectivement,  $k_A$  et  $k_B$ . Au niveau des interfaces, elles sont notées  $k_{AB}$ . L'onde incidente se propage dans la direction  $[100]$ .

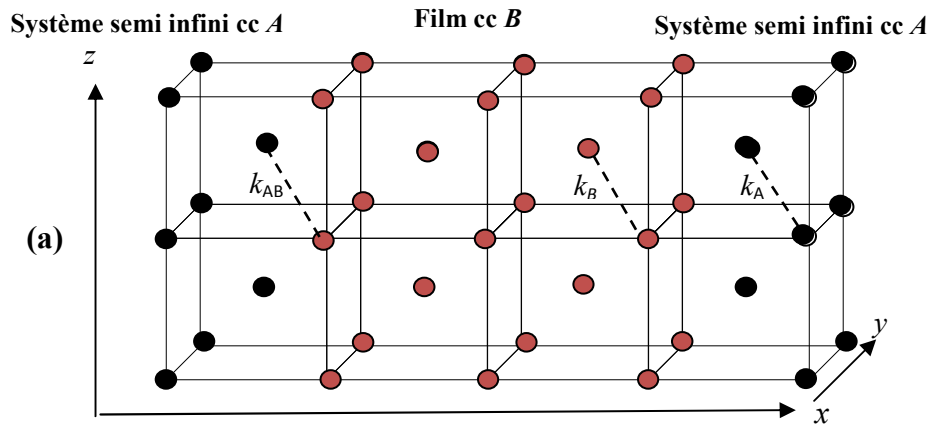


Figure (3.7) : Lamé atomique ultramince composée de cinq plans, insérée en sandwich dans une structure cc.

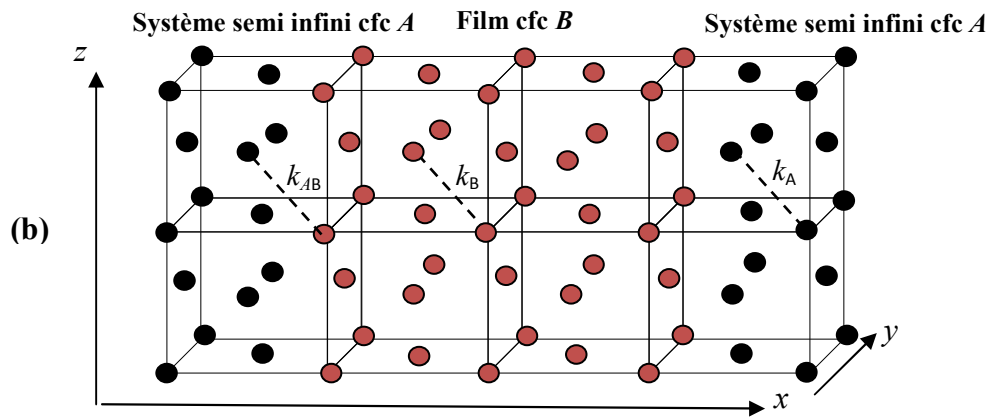


Figure (3.8) : Lamé atomique ultramince composée de cinq plans, insérée en sandwich dans une structure cfc.

L'équation (1.28), permet de décrire le mouvement des atomes de la zone de défaut et des zones de raccordement dans les trois directions de l'espace. La matrice dynamique obtenue est de taille  $(21 \times 27)$ .

Selon le type des matériaux mis en jeu, plusieurs cas peuvent se présenter. Nous allons examiner les trois possibilités suivantes :

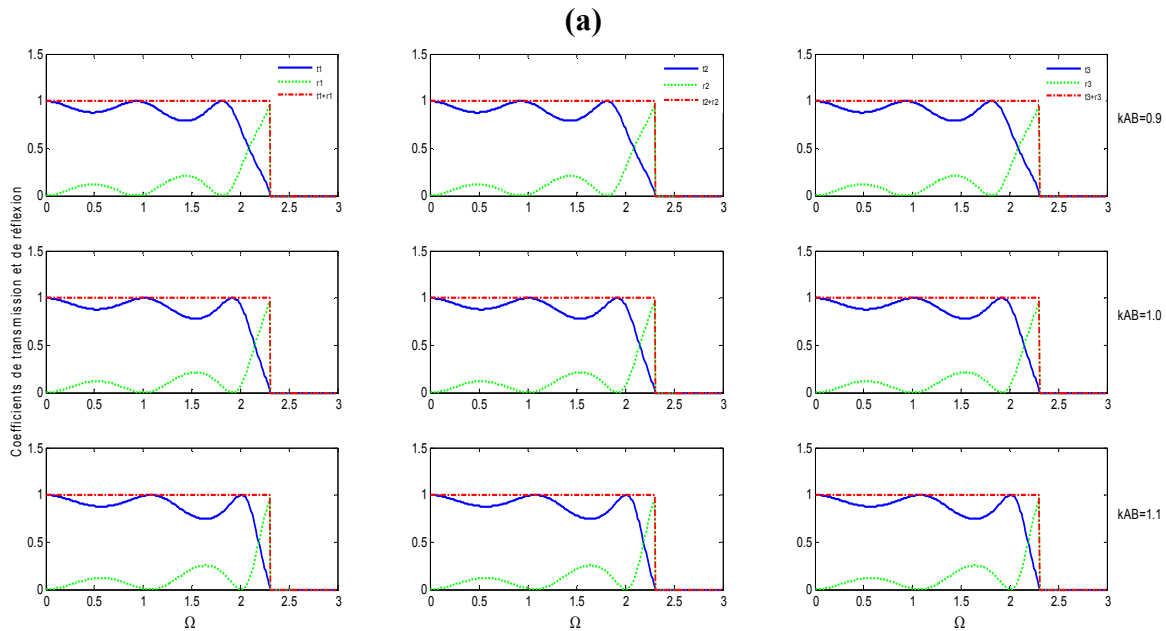
- i)  $m_B < m_A$
- ii)  $m_B = m_A$
- iii)  $m_B > m_A$

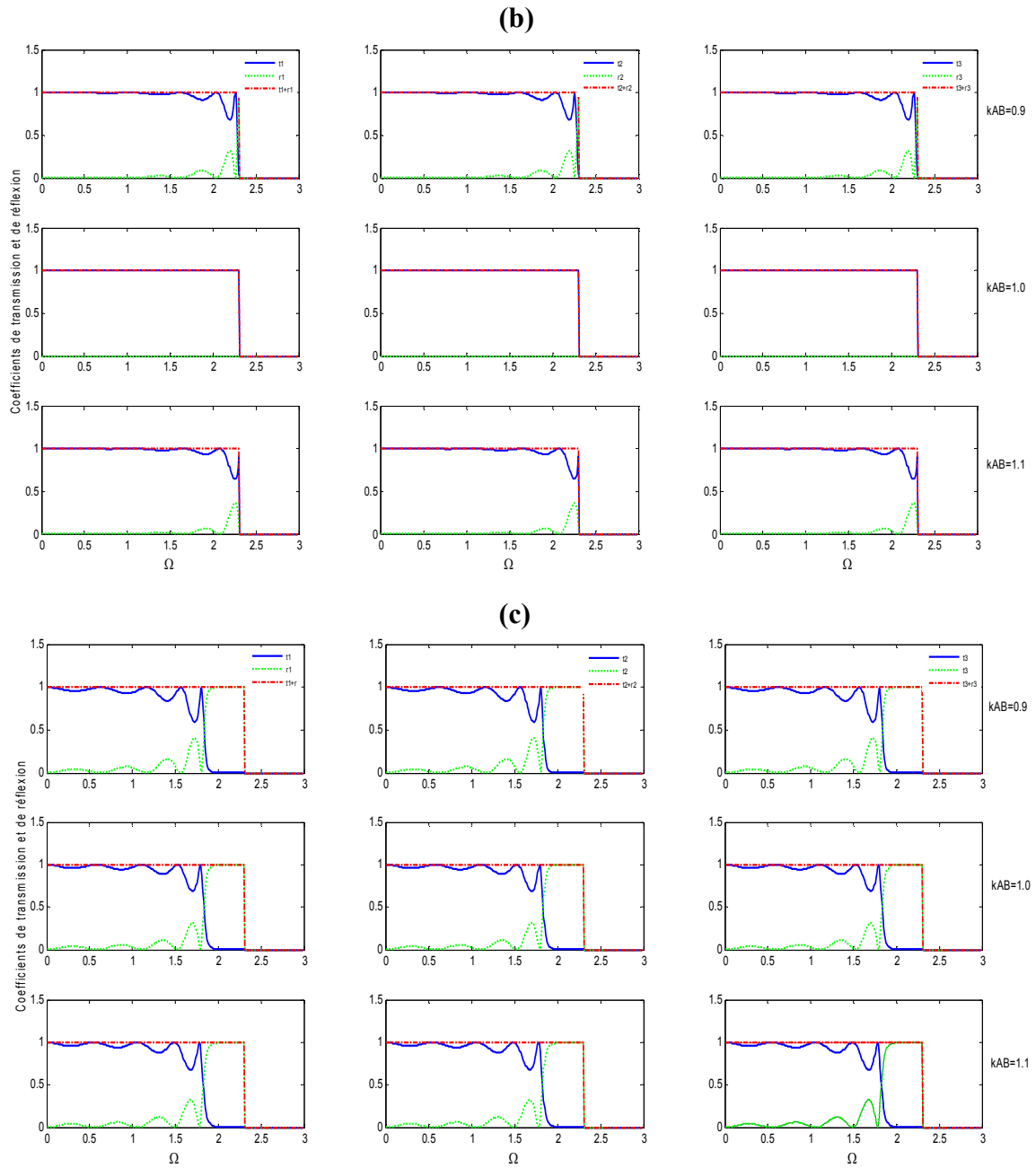
Pour chacun de ces cas, nous considérons trois possibilités élastiques, à savoir :

- a) Adoucissement des constantes de forces :  $k_{AB} < k_A$ ,
- b) Constantes de forces homogènes :  $k_{AB} = k_A$ ,
- c) Durcissement des constantes de forces :  $k_{AB} > k_A$ .

### II.1.1. Résultats obtenus pour le réseau cc

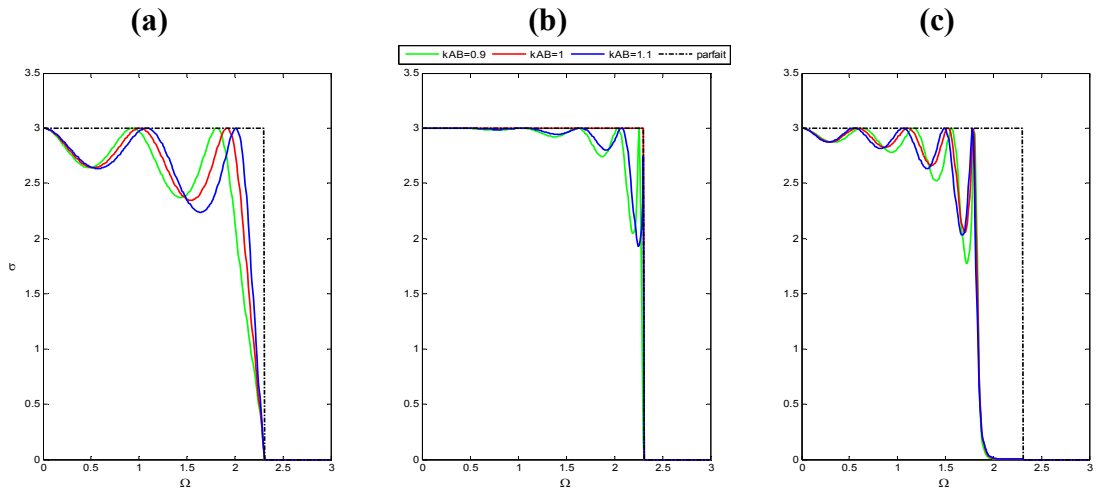
Dans ce qui suit, les figures (3.9a), (3.10a), (3.11a) et (3.12a) représentent les résultats obtenus pour  $m_B < m_A$ , les figures (3.9b), (3.10b), (3.11b) et (3.12b) ceux obtenus pour des masses homogènes ( $m_B = m_A$ ), et les figures (3.9c), (3.10c), (3.11c) et (3.12c), les résultats pour ( $m_B > m_A$ ). Dans chaque cas, trois types de contraintes élastiques sont examinées, à savoir les contraintes douces, homogènes et dures.



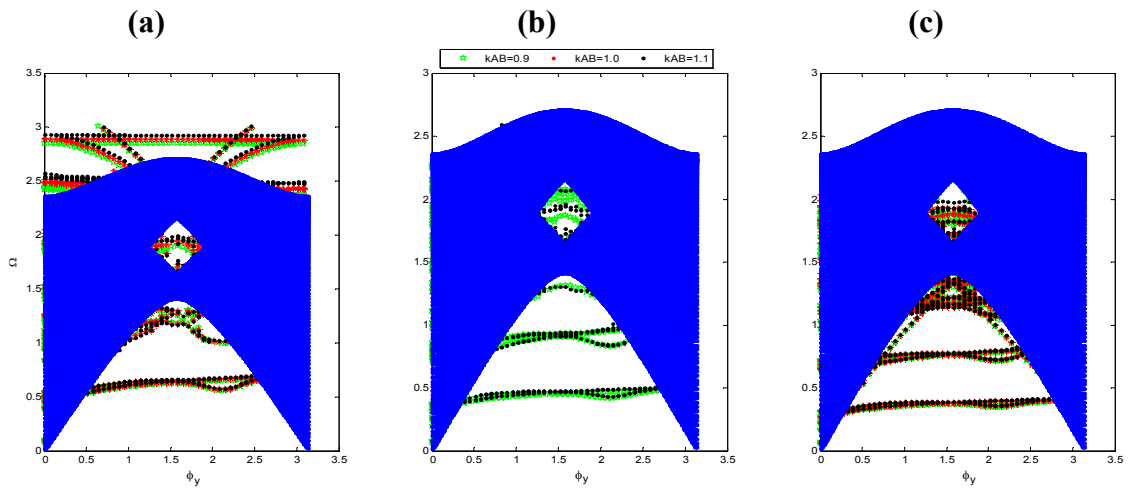


**Figure (3.9) :** Coefficients de transmission et de réflexion d'une nanojonction de type  $A/B/A$ .

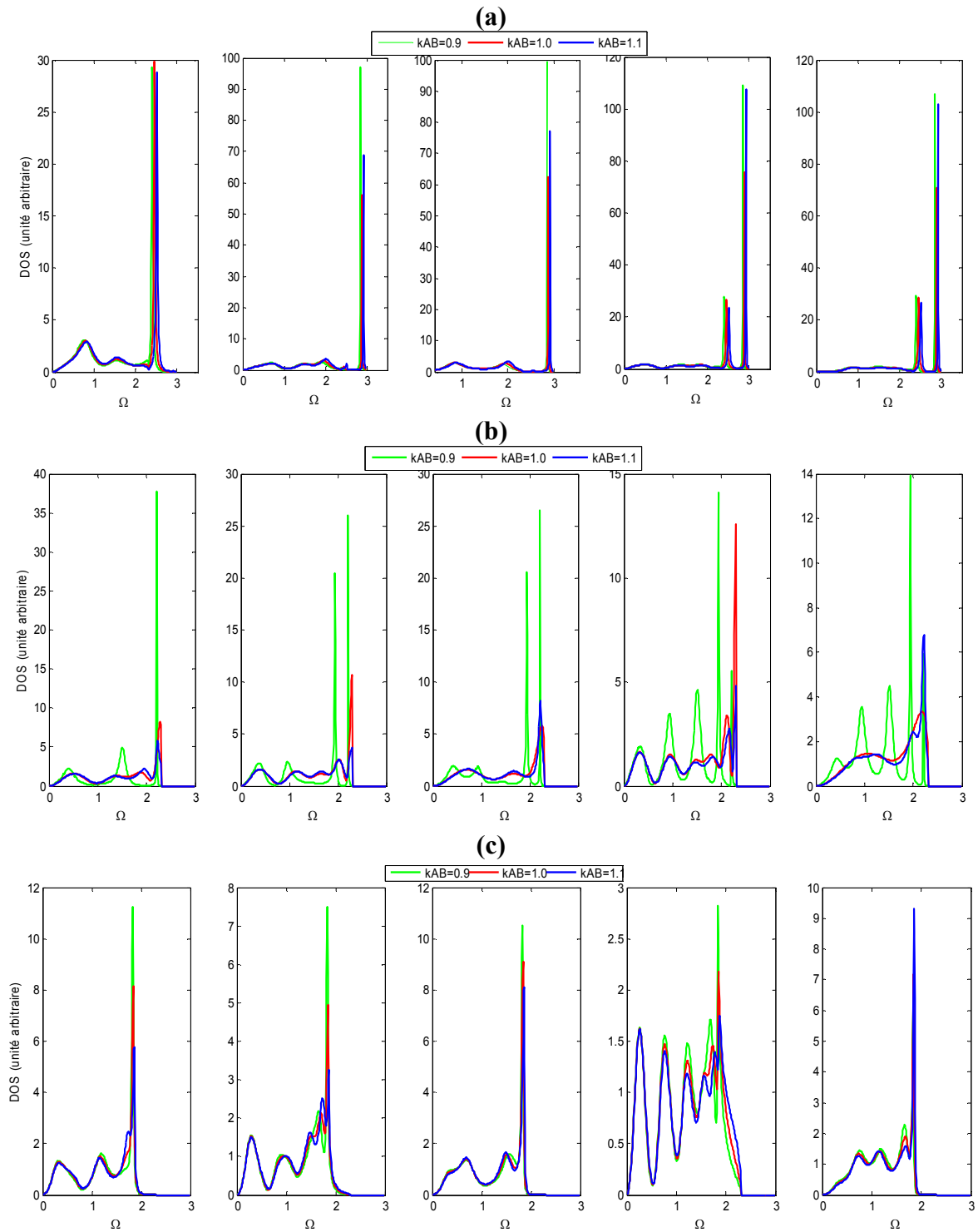
(a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$



**Figure (3.10)** : Transmittance phonique d’une nanojonction de type  $A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$



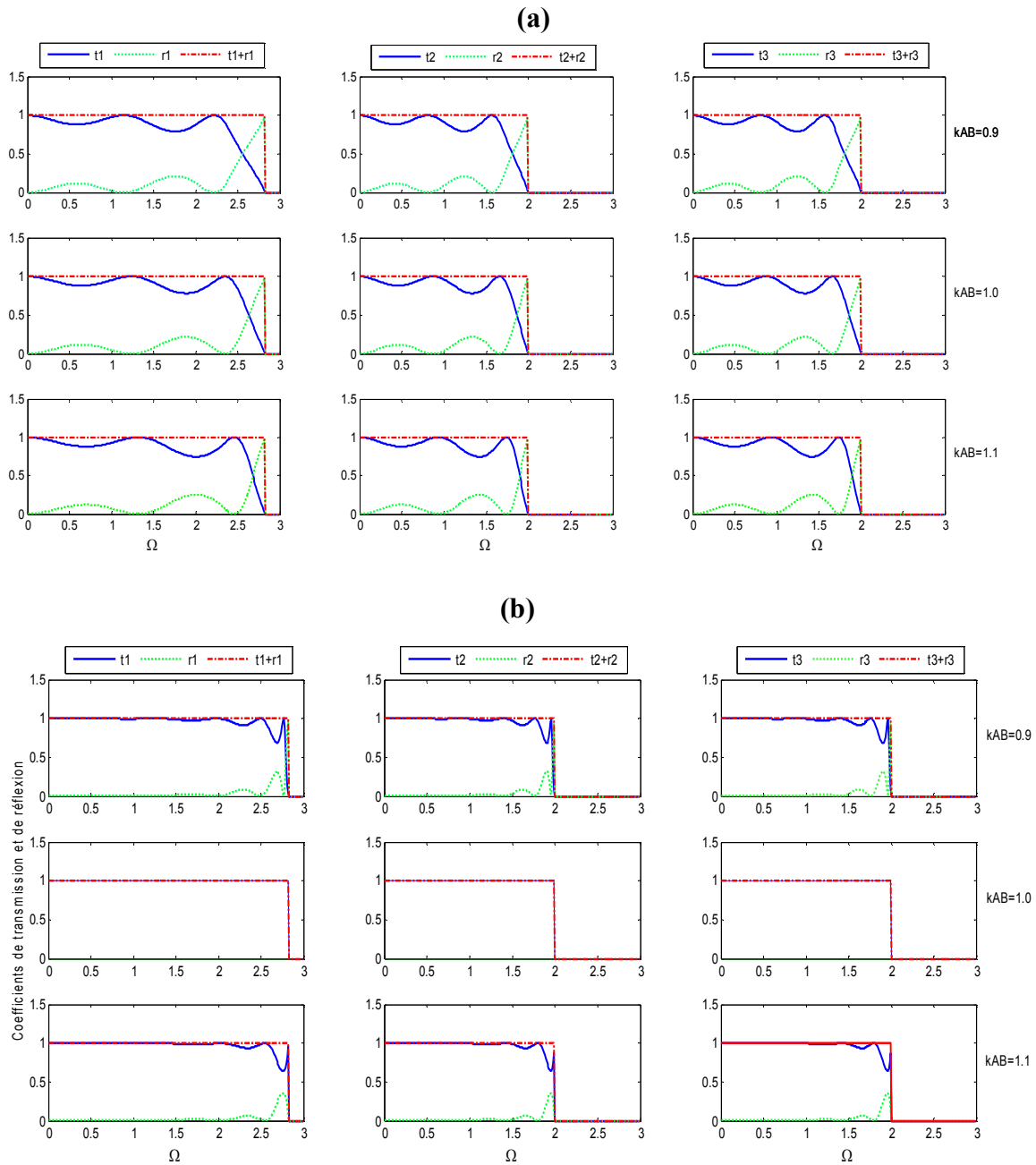
**Figure (3.11)** : Etats localisés d’une nanojonction de type  $A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$

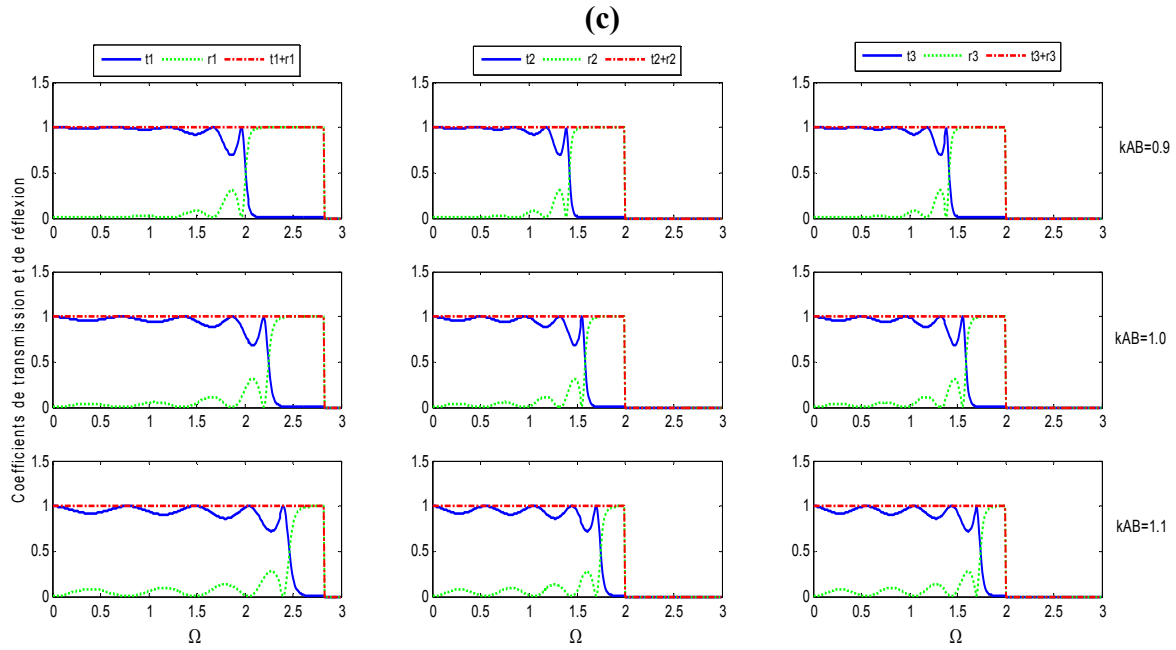


**Figure (3.12) :** Densités d'états d'une nanojonction de type  $A/B/A$ .

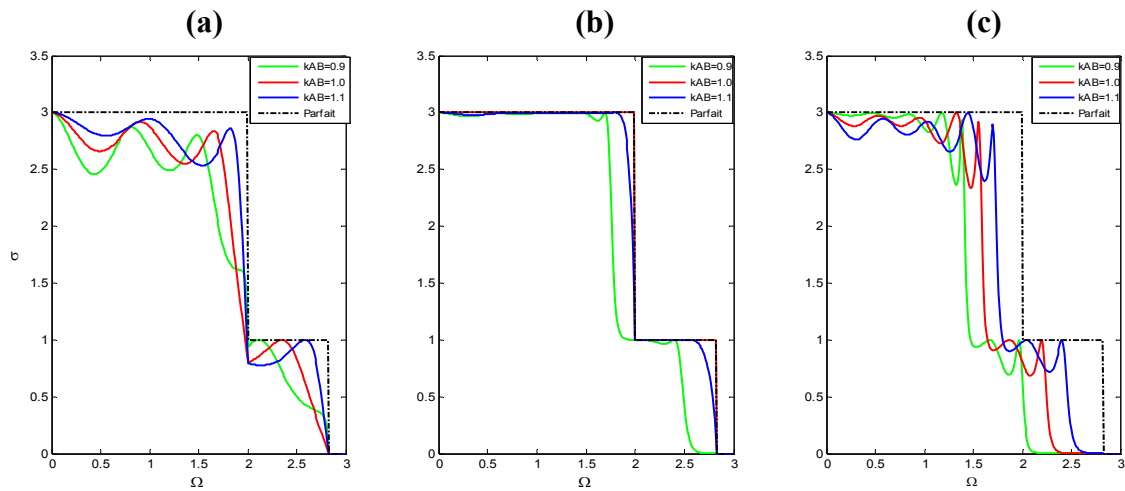
(a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$

II.1.2. Résultats obtenus pour le réseau cfc

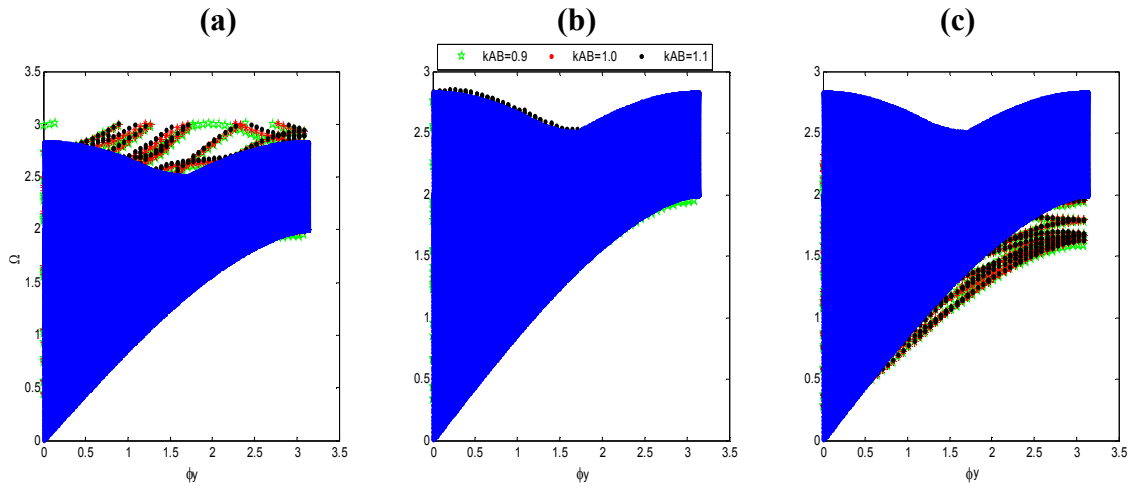




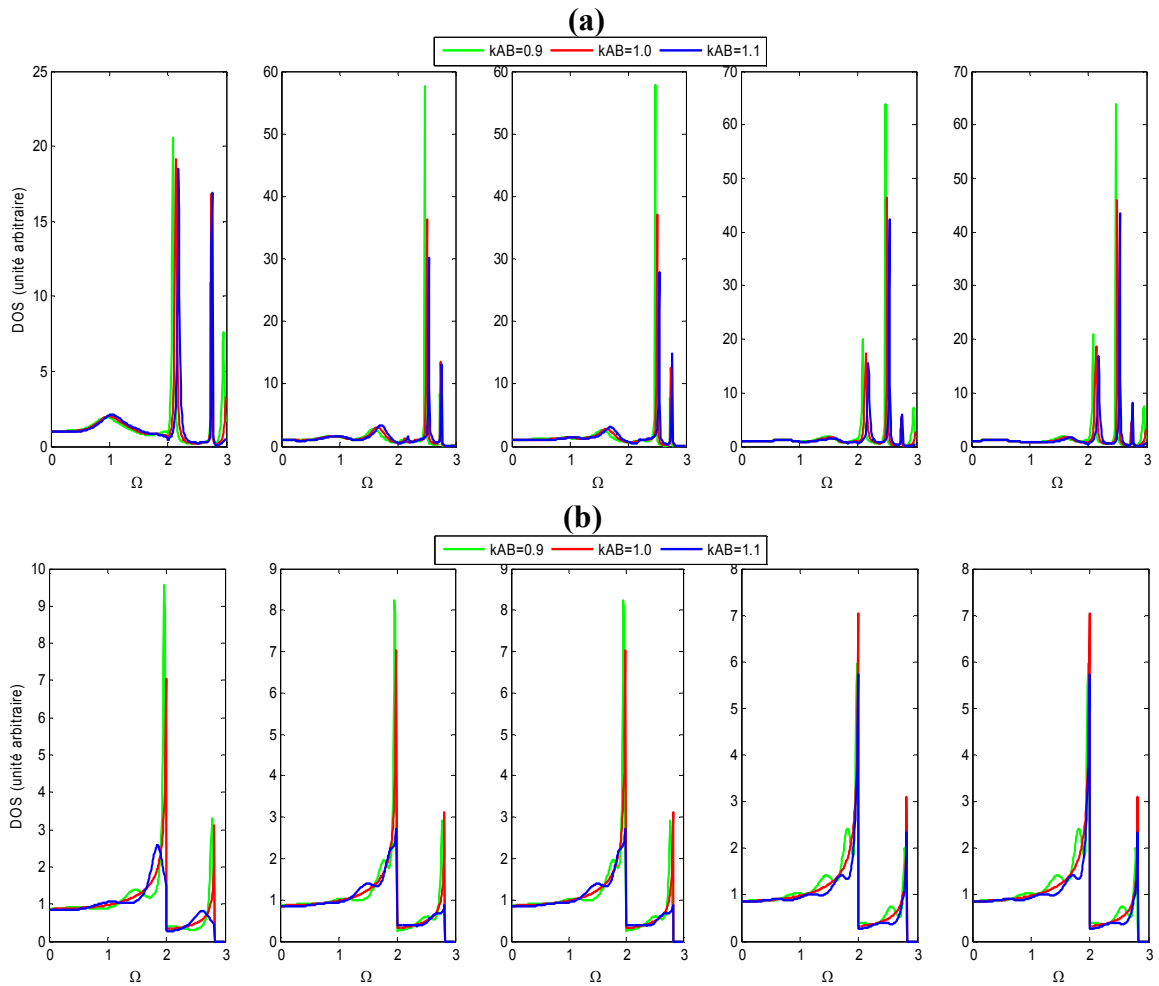
**Figure (3.13) :** Coefficients de transmission et de réflexion d'une nanojonction de type  $A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$

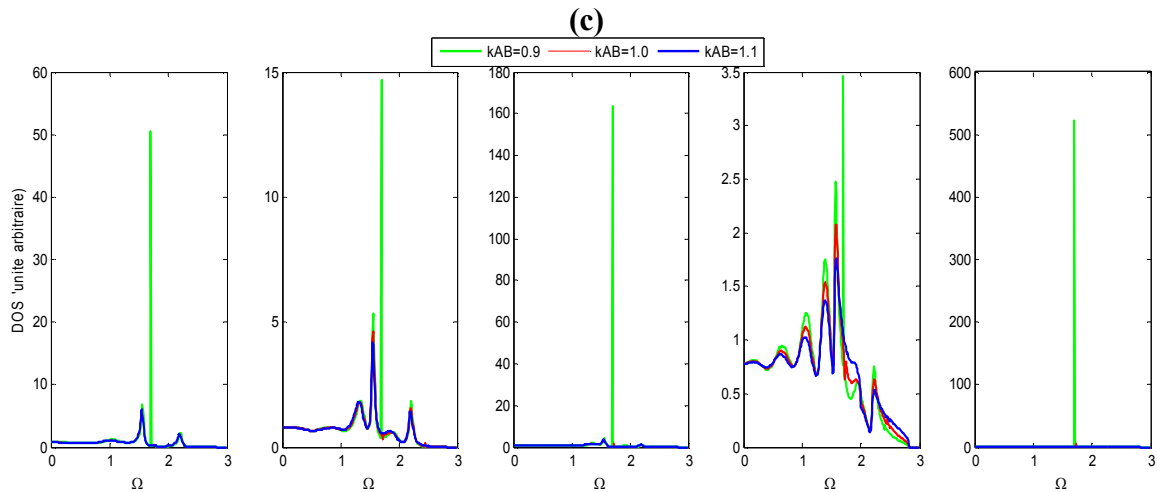


**Figure (3.14) :** Transmittance phonique d'une nanojonction de type  $A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$



**Figure (3.15) :** Etats localisés d'une nanojonction de type A/B/A.  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$





**Figure (3.16)** : Densités d'états d'une nanojonction de type  $A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$

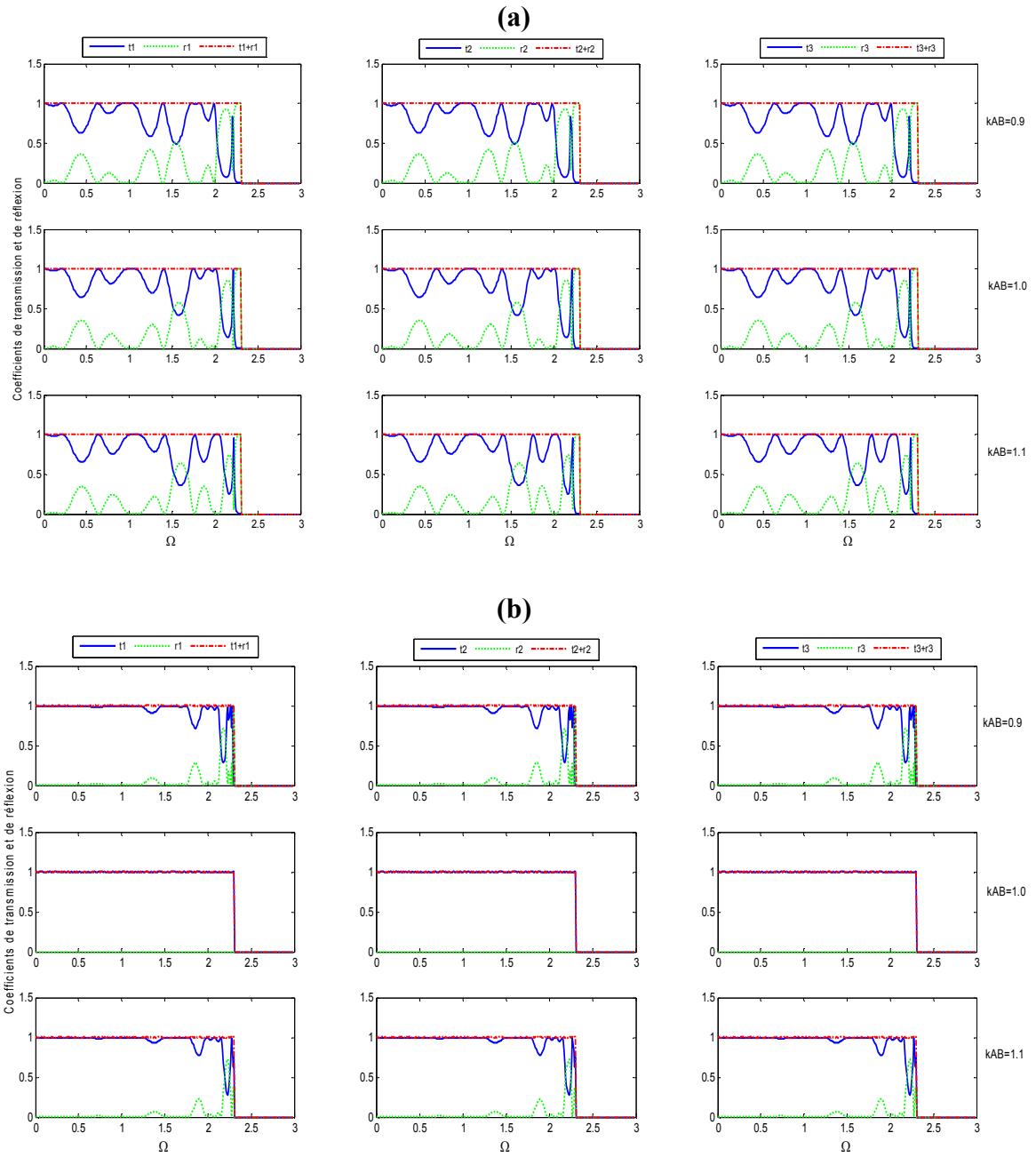
### III. Effet de la variation du nombre de films ultraminces sur la dynamique du réseau

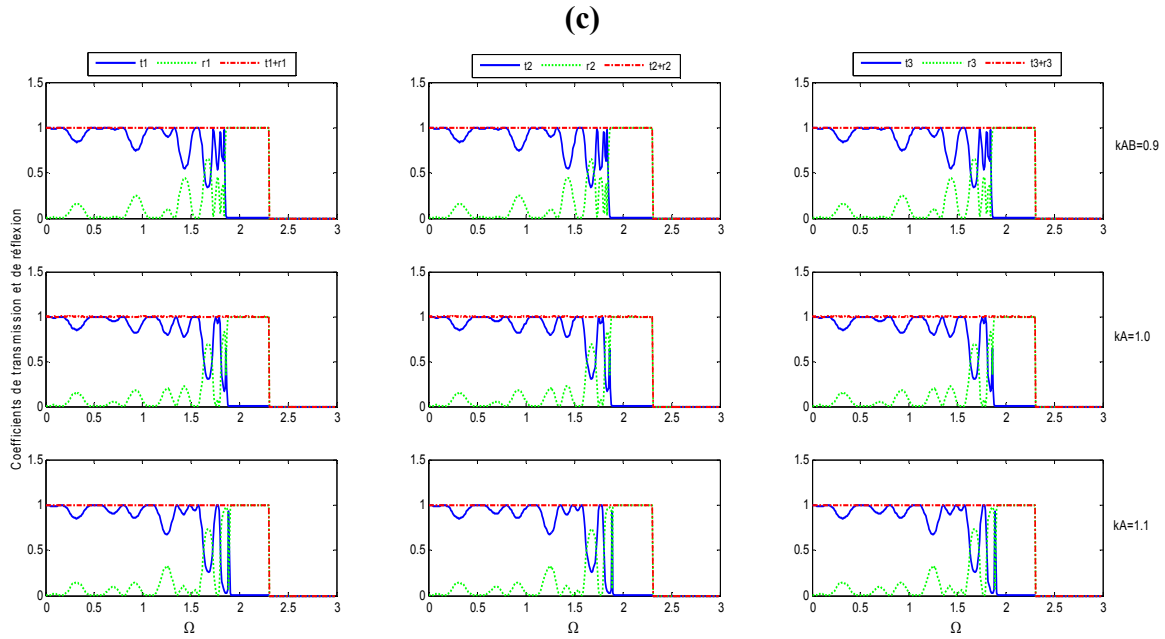
Afin de mettre en évidence l'effet de l'augmentation du nombre de films ultraminces intercalés dans des structures cubiques, nous allons faire varier le nombre de films minces insérés en sandwich dans ces structures et comparer ainsi le système à double interface précédent  $A/B/A$  aux systèmes à quatre interfaces de type  $A/B/A/B/A$ .

Chacune des lames nanométriques insérées est composée de cinq plans atomiques donnant lieu à quinze sites irréductibles et une matrice dynamique de taille  $(51 \times 57)$ . Les effets induits par ces films seront discutés à l'aide des courbes de transmission phononiques, des états localisés, et des densités d'états pour différents types de masses et de contraintes élastiques.

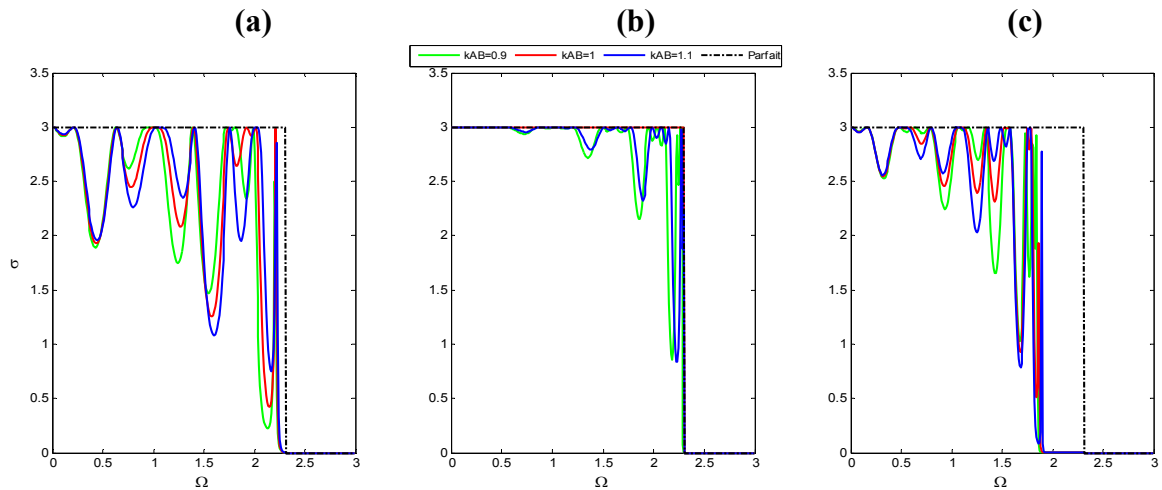
### III.1. Nanojonction de type A/B/A/B/A

#### III.1.1. Résultats obtenus pour le réseau cc





**Figure (3.17)** : Coefficients de transmission et de réflexion d'une nanojonction de type  $A/B/A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$



**Figure (3.18)** : Transmittance d'une nanojonction de type  $A/B/A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$

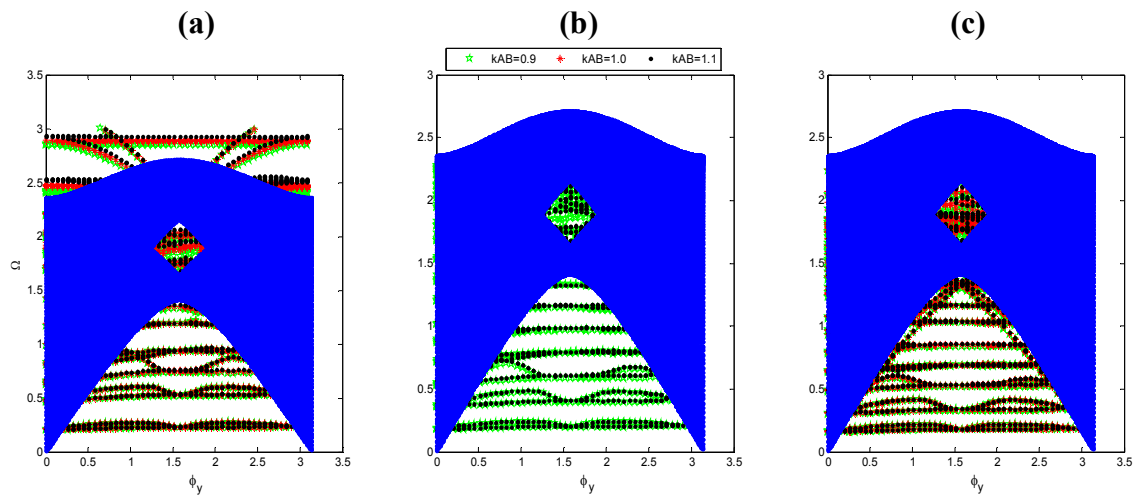
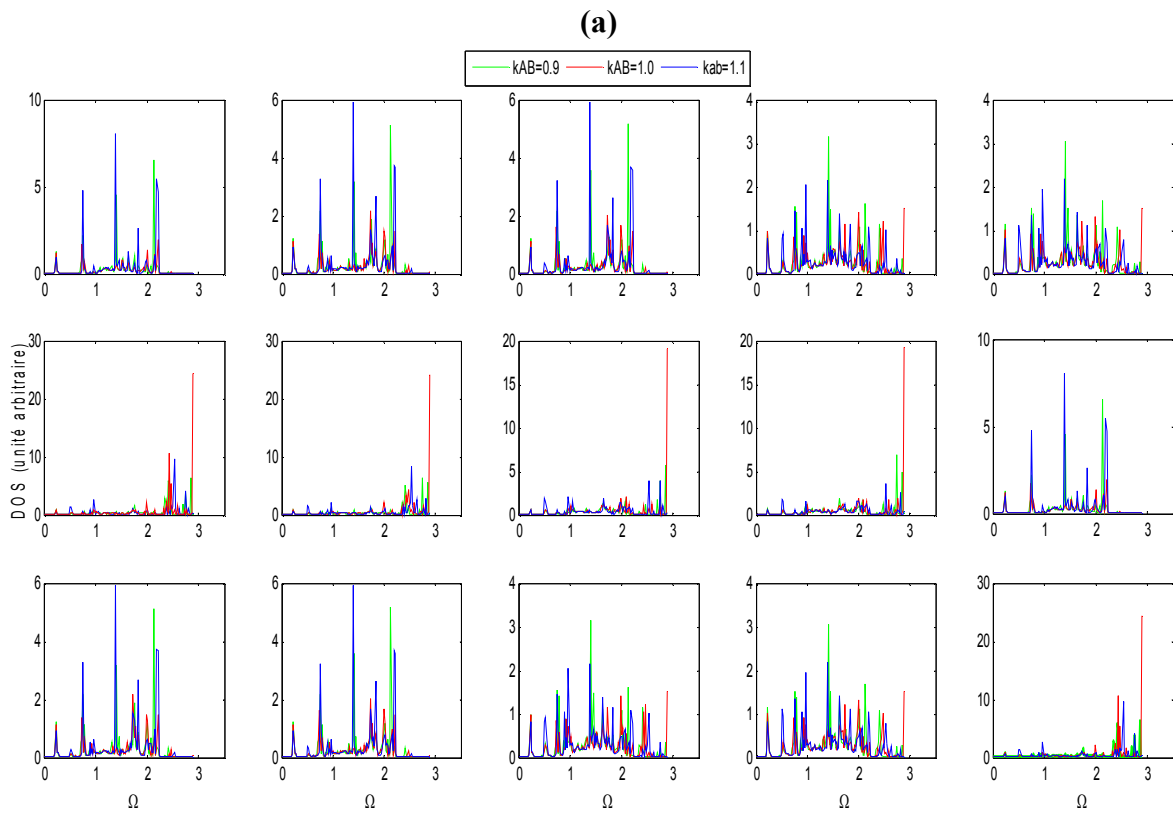
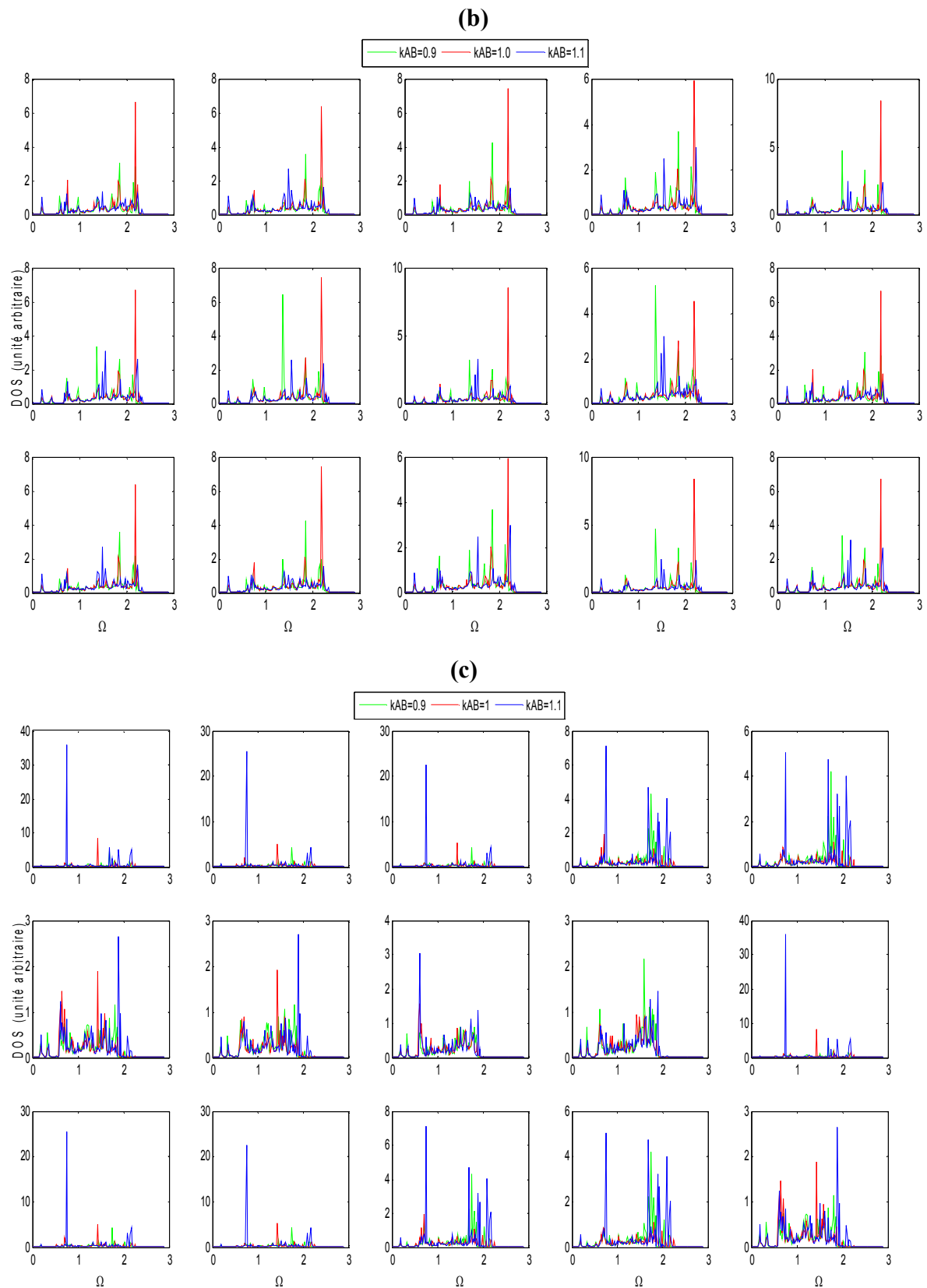


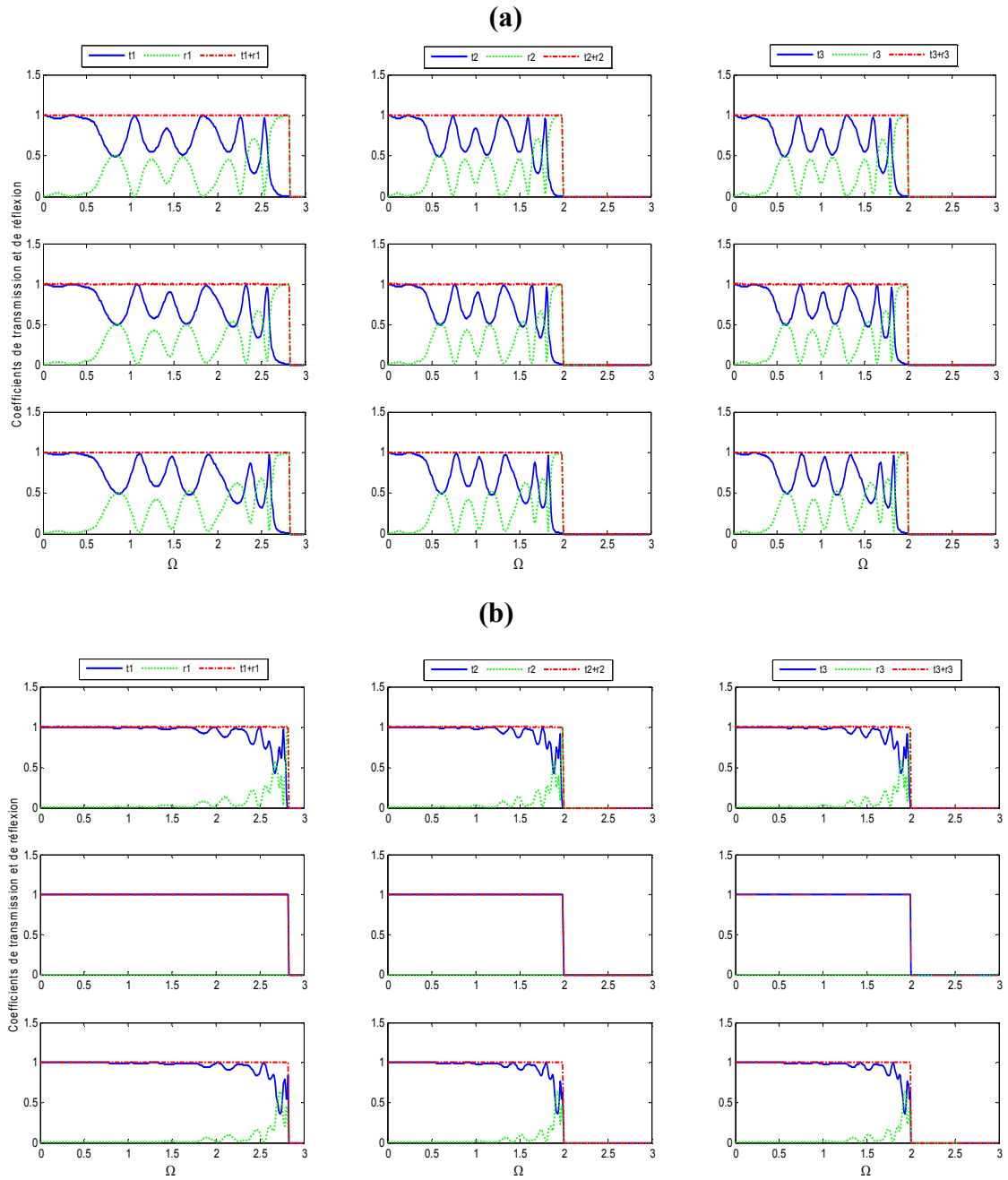
Figure (3.19) : Etats localisés d'une nanojonction de type A/B/A/B/A.  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$

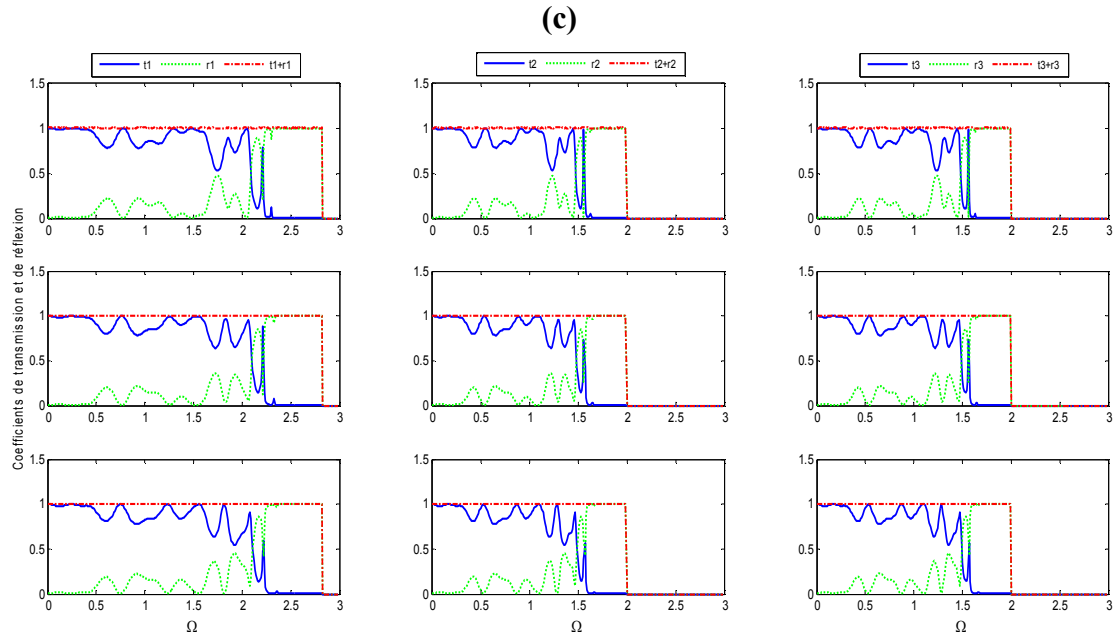




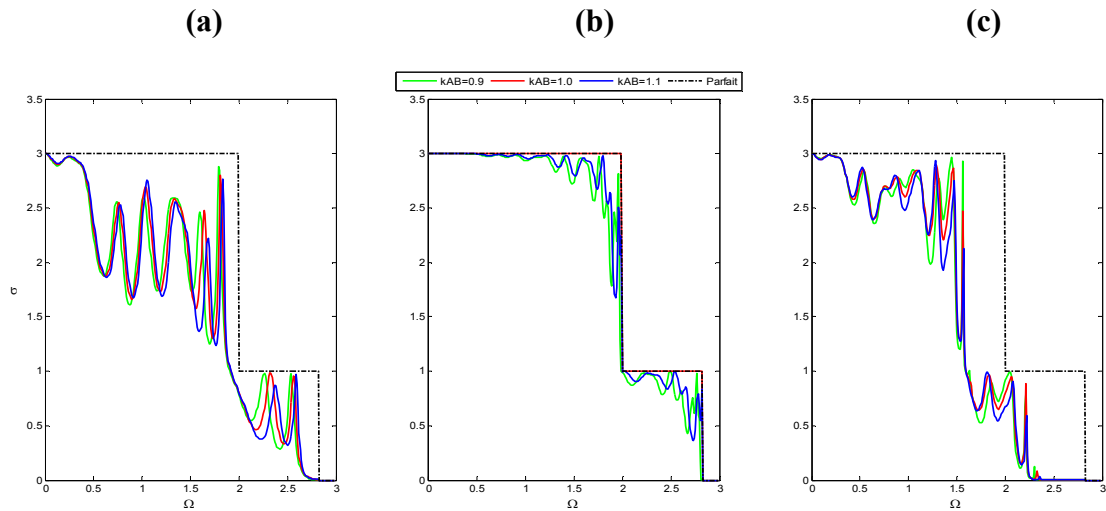
**Figure (3.20) :** Densités d'états d'une nanojonction de type  $A/B/A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$

III.1.2. Résultats obtenus pour le réseau cfc

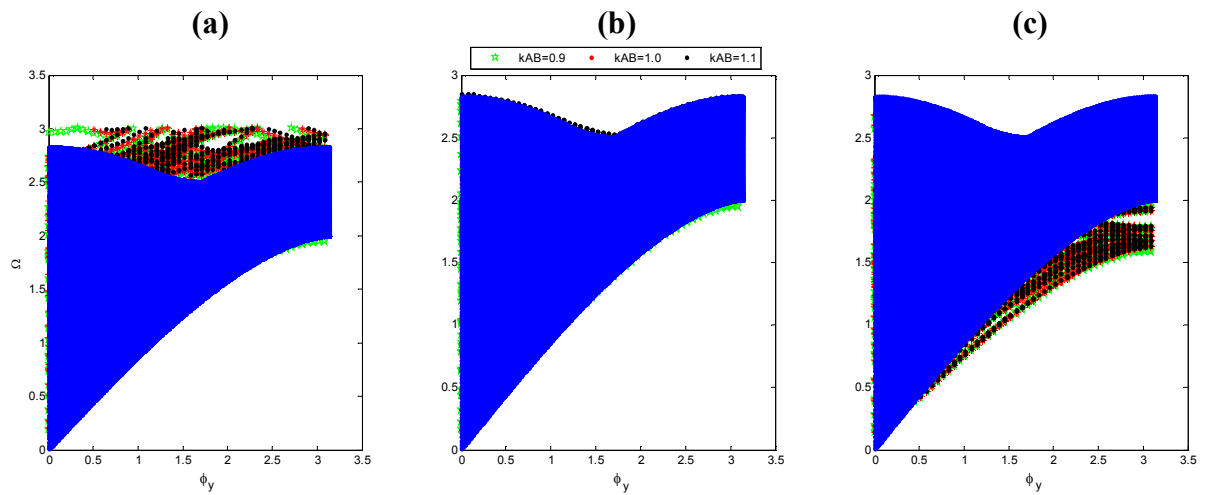




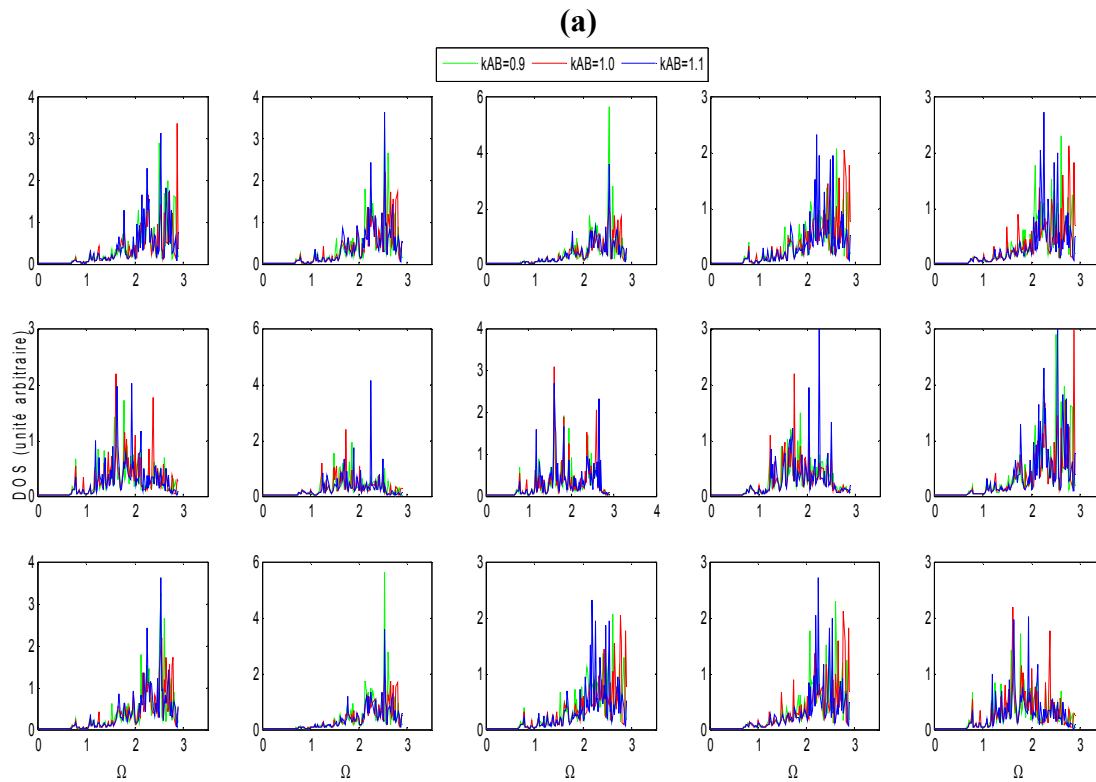
**Figure (3.21)** : Coefficients de transmission et de réflexion d'une nanojunction de type  $A/B/A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$

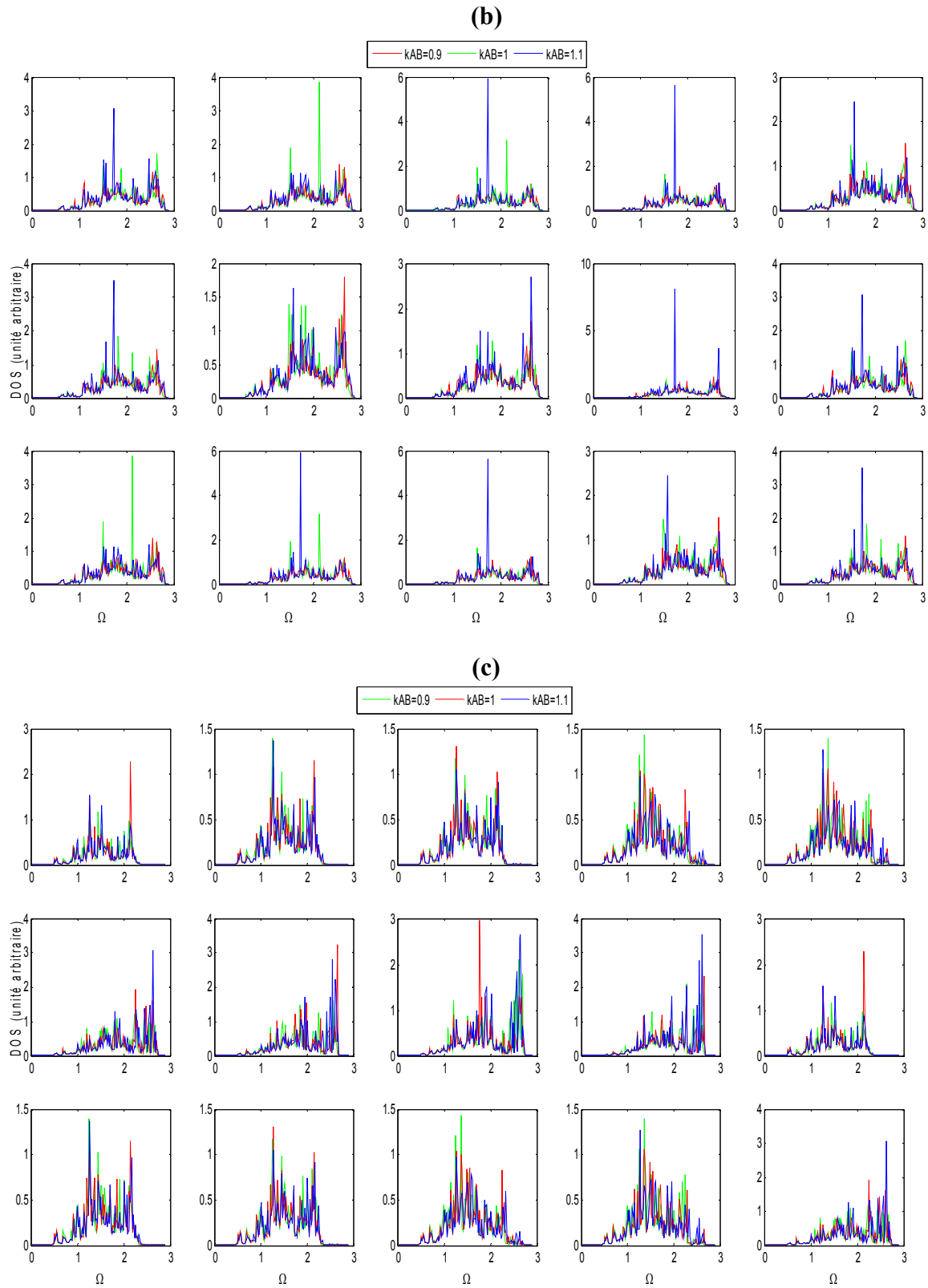


**Figure (3.22)** : Transmittance d'une nanojunction de type  $A/B/A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$



**Figure (3.23)** : Etats localisés d’une nanojonction de type  $A/B/A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$





**Figure (3.24)** : Densités d'états d'une nanojonction de type  $A/B/A/B/A$ .  
 (a)  $m_B < m_A$ , (b)  $m_B = m_A$ , (c)  $m_B > m_A$

### Discussion des résultats obtenus

Nous avons simulé, pour les deux types de cristallisation cc et cfc, les coefficients de transmission et de réflexion, la transmittance phononique et les états de phonons localisés. On remarque que les intervalles des fréquences des modes propageants des structures parfaites et des interfaces de type  $A/B$ , sont tels qu'ils sont définis dans les chapitres précédents à savoir :  $[\Omega_{1\min} = 0.00, \Omega_{1\max} = 2.35]$ , pour le mode (1),  $[\Omega_{2\min} = 0.00, \Omega_{2\max} = 2.31]$ , pour les modes (2) et (3) dans la structure cc.

Dans la structure cfc, les fréquences permises pour le mode (1) :  $[\Omega_{1\min} = 0.00, \Omega_{1\max} = 2.82]$  et celles permises pour les modes (2) et (3) sont  $[\Omega_{2\min} = 0.00, \Omega_{2\max} = 2.00]$ . Nous remarquons aussi que la somme des probabilités de transmission et de réflexion est toujours égale à un et que la condition d'unitarité est bien vérifiée ( $s_i = t_i + r_i = 1$ ), avec  $i = 1, 2, 3$ .

Quand aux densités d'états elles sont tracées pour les sites irréductibles qui sont au nombre de cinq dans la structure  $A/B/A$  et au nombre de quinze dans la structure  $A/B/A/B/A$ .

#### *i) Coefficients de transmission et de réflexion*

Comme le cas des nanojonctions mono-interface, les systèmes à double interfaces de type  $A/B/A$  présentent le même comportement des probabilités de transmission et de réflexion dans les deux cristallisations cc et cfc. Les fluctuations enregistrées, dans les mêmes conditions de masses et d'environnement élastiques, évoluent de la même manière. On constate tout de même une différence non négligeable qui concerne les fréquences auxquelles se produisent ces fluctuations en fonction de la cristallisation, qui sont plus importantes dans le cfc.

Lorsque le nombre d'interfaces augmente, cas de  $A/B/A/B/A$ , la transmission ne suit pas la même allure dans les deux systèmes à maillages cc et cfc. En comparant les courbes de transmission et de réflexion (3.17a), (3.17b), (3.17c) et (3.21a), (3.21b), (3.21c), on constate que les similitudes relevées sur les comportements de la transmission dans le cas des mono-interfaces et double interfaces des deux systèmes cc et cfc n'apparaissent plus.

Par ailleurs, dans tous les cas, la transmission est caractérisée par des oscillations et des résonances de type Fano [24] qui sont une signature du couplage entre le continuum et les états discrets, plus fréquemment aux fréquences maximales permises des différents modes de propagation avec une particularité dans le cas des masses homogènes ( $m_A = m_B$ ), où la transmission est totale aux basses fréquences, puis commence à fluctuer à mi-chemin. Ceci reflète l'effet unique des contraintes qui ne se fait ressentir qu'aux hautes fréquences. L'augmentation des valeurs des contraintes élastiques consiste à repousser les oscillations

vers des fréquences plus importantes et l'atténuation des résonances de Fano. Dans le même environnement élastique (pour  $k_{AB} = 0.9$ , puis pour  $k_{AB} = 1.0$  et enfin pour  $k_{AB} = 1.1$ ), on compare les courbes de transmission (3.9a), (3.9b), (3.9c) et (3.13a), (3.13b), (3.13c), obtenues pour les systèmes  $A/B/A$  afin d'examiner l'effet de la variation de la masse. On remarque un resserrement des oscillations et des pics qui se produisent à des fréquences plus rapprochées, avec l'augmentation de la masse  $m_B$  qui entraîne aussi un nombre plus important d'oscillations.

Comparé au cas mono-interface traité dans le chapitre précédent, on constate l'apparition d'oscillations et de résonances avec l'augmentation du nombre d'interfaces, qui vont encore se démultiplier en augmentant le nombre d'interfaces à quatre dans le cas où trois lames ultra minces sont insérées en sandwichs entre deux structures identiques de type  $A/B/A/B/A$ . On enregistre des fluctuations de différentes amplitudes qui s'accroissent avec l'augmentation de la masse  $m_B$ .

De ce fait, la zone nanostructurée sera le siège d'interférences multiples entre l'onde incidente, les ondes réfléchies sur les différentes interfaces, et les ondes évanescentes qui transitent à travers les premières interfaces, mais qui n'ont pas assez d'énergie pour traverser toute la zone perturbée. Leur interaction avec les états localisés va leur permettre un gain d'énergie supplémentaire et dépasser la nanojonction. Ces interactions sont complexes et donnent lieu à des pics de transmission et des pics de réflexion qui, grâce aux recombinaisons possibles donneront naissance à d'autres résonances aux fréquences supérieures définissant ainsi un résonateur de Fabry-Pérot [25].

Cette situation est également illustrée sur les courbes de transmittance phononique (3.18) et (3.22) où l'on observe également un nombre important de résonances dans les systèmes  $A/B/A/B/A$ , ce qui est logique puisque la transmittance phononique n'est autre que la somme des transmissions des trois modes de propagation. Sur les figures de transmittance (3.10) et (3.14) des systèmes  $A/B/A$ , et les figures (2.10b), (2.11b) des systèmes  $A/B$  les oscillations et les résonances diminuent avec la diminution du nombre d'interfaces.

L'effet de l'environnement élastique est mieux illustré quand les masses sont homogènes (2.10b), (2.11b) et (2.12b) pour les interfaces  $A/B$ , (3.10b), (3.14b) dans le cas double interfaces  $A/B/A$ , et (3.18b), (3.22b) dans le cas à quatre interfaces  $A/B/A/B/A$ . On remarque aisément que les fréquences caractéristiques des résonances dans le cas des contraintes douces sont inférieures à celles des contraintes dures ce qui implique que la rigidité des contraintes met en jeu des fréquences plus importantes afin d'avoir une meilleure transmittance.

### ii) Les états localisés

Sur les figures (3.11), (3.15), (3.19) et (3.23), nous avons représentés nos résultats correspondant aux spectres des états de phonons localisés pour les trois types de masses considérés sur les figures notées par (a), (b) et (c). Sur chacune des figures, l'environnement élastique est spécifié par une couleur bien définie.

On remarque pour les systèmes de type  $A/B/A$  à maillages cc et cfc, qu'il y a apparition de phonons localisés dans certaines zones de gap des cas parfaits. Pour les faibles fréquences situées au-dessous des bandes passantes on remarque cinq branches d'états localisés dans le système cc pour les masses légères et homogènes, tandis que pour le système cfc, on ne distingue qu'une branche pour des contraintes élastiques douces. L'augmentation de la masse  $m_B$  entraîne la densification des phonons localisés, contrairement au phénomène observé dans le gap supérieur où ces états sont absents aux masses homogènes et  $m_B \square m_A$  élevées. Ceci reste valable avec l'augmentation du nombre d'interfaces pour les systèmes  $A/B/A/B/A$ , où les états localisés suivent le même comportement mais en quantité plus importante dans toutes les zones de gaps. Ceci induit bien évidemment un nombre plus importants de résonances sur les spectres de transmission.

Comparé aux résultats obtenus pour le cas des interfaces du chapitre II, on constate que l'augmentation du nombre de lames minces insérées en sandwich entre deux réservoirs infinis provoque l'apparition de nouveaux états localisés, qui suivent le même comportement que celui observé dans le cas de deux et quatre interfaces.

### iii) Les densités d'états

Les densités d'états sont illustrées sur les figures (3.12), (3.16) pour les cinq sites irréductibles des systèmes  $A/B/A$ , et sur les figures (3.20) et (3.24) pour les systèmes ayant quinze sites irréductibles (système  $A/B/A/B/A$ ). La caractéristique principale des courbes des densités d'états du système  $A/B/A$  à cristallisation cc et cfc, est l'existence de pics de grandes amplitudes pour tous les types de masses et de l'environnement élastique pour les cinq sites considérés en bord supérieur de zone de propagation, avec des pics très visibles pour des masses homogènes sur la figure (3.16b) dans le cfc reflétant exactement les limites supérieures des plages de propagation permises des modes de propageants ( $\Omega_{1\max} = 2$  et  $\Omega_{2\max} = 2.82$ ). On remarque également l'augmentation des densités d'états avec l'augmentation de la masse  $m_B$ .

En outre, les fréquences limites des intervalles de propagation sont des zones intéressantes vu qu'on y trouve des pics de transmission et aussi des pics de réflexion qui vont interférer avec les états localisés provoquant ainsi une densité d'état importante. Le même phénomène est observé au voisinage des interfaces dans le cas des lames ultraminces confinées entre deux systèmes infinis où les ondes réfléchies sur diverses interfaces interfèrent entre elles et avec les états localisés générant de très fortes densités et des pics à certaines fréquences caractéristiques.

### **Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons mis en évidence, grâce aux résultats présentés, l'effet de films nanométriques insérés en sandwich entre deux systèmes semi infinis à maillage cc et cfc, sur la transmission et la réflexion, les états localisés et les densités d'états induits par les nanojonction résultantes. La présence de plusieurs interfaces permettra à la partie réfléchie de l'onde incidente de rebondir sur les différentes zones d'interfaces tout en interagissant avec les états localisés et d'autres ondes réfléchies à différents niveaux d'acquérir de nouvelles énergies créant ainsi de nouveaux états localisés, de fortes densités d'états et des pics de transmission à des fréquences bien déterminées formant dans certains cas des résonateurs à caractère Fabry-Pérot.

## Références

- [1] Foxon, C. T., Acta Electron. 21 139 (1978).
- [2] Paul K. Hansma and Jerry Tersoff, J. Appl. Phys. 61, R1 (1987).
- [3] G. Binning, C. F. Quate, and Ch. Gerber, Phys. Rev. Lett. 56, 930 (1986) ; T. R. Albrecht and C. F. Quate, J. Appl. Phys. 62, 2599 (1987).
- [4] Green, M. L., Schenck, P. K., Chang, K.-S., Ruglovsy, J., and Vaudin, M., 2009. "Higher-k dielectrics for advanced silicon microelectronic devices: A combinatorial research study". *Mic. Eng.*, 86 (7-9), Jul-Sep, pp. 1662–1664.
- [5] Vastola, G., Marzegalli, A., Montalenti, F., and Miglio, L., 2009. "Strain and strain-release engineering at epitaxial SiGe islands on Si(001) for microelectronic applications". *Mat. Sci. Eng. B*, 159-160 (Sp. Iss), Mar, pp. 90–94.
- [6] Liu, M., Lu, Y., Zhang, J., Xia, S., and Yang, J., 2009. "MEMS/microelectronics self-assembly based on analogy of Langmuir-Blodgett approach". *Microel. Eng.*, 86 (11), Nov, pp. 2279–2282.
- [7] Lee, K.N., Lee, D.S., Jung, S.W., Jang, Y.H., Kim, Y.K., and Seong, W.K., "A hightemperature MEMS heater using suspended silicon structures". *J.Micromech. Microeng.*, 19 (11), Nov 2009.
- [8] T. Minami, S. Ida, T. Miyata, Y. Minamino, *Thin Solid Films*, 445 268 (2003).
- [9] N. Nakamura, H. Nakagawa, K. Koshida, M. Niiya, *Proceeding of the 5th International Display workshops*, 511 (1998).
- [10] Mc Clanahan E.D., Laegreid N., "Sputtering by particle bombardment III", Berlin: Springer Verlag, (1991). Chapter 7, Production of thin films by controlled deposition of sputtered material, pp. 339.
- [11] Maissel L., Glang R., "Handbook of thin film technology". New York: McGraw-Hill, 1970.
- [12] Douglas B. Chrisey and Graham K. Huubler, "Pulsed Laser Deposition of Thin Film". ed. Wiley interscience, New York 258 (1994).
- [13] J. Lu, Z. Ye, J. H. Huang, L. Wang, B. Zhao, *Appl. Surf. Sci.*, 207 (2003).
- [14] J. W. Elam, Z. A. Sechrist, S. M. George, *Thin Solid Films*, 43, 414 (2002).
- [15] R. Landauer, *Phylos.* 21, 863 (1970).
- [16] R. Landauer, *Z. Phys.* B68, 217 (1987).
- [17] R. Landauer, *J. Phys.*, *Condensed Matter* 1, 8099 (1989).
- [18] C. Berthod, F. Gagel and K. Maschke, *Phys.Rev.B* 50, 18299 (1994).
- [19] A. Maradudin, R. F. Wallis and L. Dobrzynski, *Handbook of Surfaces and Interfaces*, Vol. 3 Garland, New York (1980).
- [20] B. Bourahla, O. Nafa and R. Tigrine, *Physica B* 406, 725 (2011).
- [21] A. Khater, R. Tigrine, B. Bourahla, *Physica Status Solidi (b)* 246, No. 7, 1614 (2009).
- [22] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater and R. Tigrine, *Physica E* 43, 1213 (2011).
- [23] M. Boucherrab, R. Tigrine and B. Bourahla, *Inter. J. Mod. Phys. B* 28, 1350199/1-19 (2014).
- [24] A. R. P. Rau, *Physica Scripta*, 69.15 (2004).
- [25] H. Aouchiche, A. Kaddouri, *Acta Physica Polonica* ,106 (2004).

## CHAPITRE IV

### Transfert thermique par une lame métallique mince insérée en sandwich dans un système cubique semi-conducteur

#### Sommaire

---

Introduction

I. Chaleur spécifique et conductivité thermique des phonons

I.1. Estimation de la chaleur spécifique

I.2. Conductivité thermique

II. Formalisme mathématique du transport des phonons

II.1. Diffusion des ondes élastiques et vitesses de groupe

II.2. Application au système Si/Al/Si

Discussion des résultats obtenus

Conclusion

---

## Introduction

Avec le développement des nanotechnologies qui a conduit à la miniaturisation des dispositifs et composants électroniques, le contrôle des flux de chaleur est devenu une nécessité. La fiabilité de ces systèmes est fortement liée aux propriétés thermiques des matériaux considérés et à la dissipation de la chaleur générée.

A l'échelle nanométrique, les propriétés thermiques des matériaux nanostructurés diffèrent de celles des matériaux massifs et leurs comportements dépendent de la température. Dans les matériaux métalliques les porteurs de chaleur sont les électrons, tandis que dans des matériaux semi-conducteurs et isolants les porteurs sont les phonons [1]. Le couplage électrons-phonons peut aussi être responsable du transport thermique, mais l'étude de cette contribution reste difficile. Les températures ou les gradients de températures générées peuvent détériorer les composants et limiter leurs durée de vie, d'où la nécessité d'une canalisation rigoureuse de ces flux de chaleurs afin d'optimiser le rendement des dispositifs électroniques.

Contrôler le déplacement des porteurs thermiques dans les nanomatériaux donnerait naissance à une nouvelle physique où la conduction et le transfert se ferait non pas grâce aux électrons mais grâce aux phonons et permettrait la conception de composants thermiques (tels que les diodes thermiques, portes logiques et mémoires thermiques, ...), et apporterait des solutions aux problèmes de l'industrie des semi-conducteurs dont le développement se trouve freiné par la difficulté de la gestion thermique des flux de chaleur générés.

Le transfert de chaleur dans les systèmes nanométrique étant très difficile d'accès d'un point de vue expérimental, et la simulation numérique reste la meilleure alternative pour la prédiction du comportement thermique des systèmes nanostructurés notamment à très basses et très haute températures. Plusieurs paramètres tels que la rugosité des interfaces [2-4], la température, le désaccord de deux mailles cristallines, la périodicité du super réseau peuvent affecter la conductivité thermique. Le travail réalisé dans les chapitres précédents nous servira de support, afin de simuler pour une certaine gamme de températures, l'allure de la conductivité thermique, par phonons, via une lame nanométrique insérée en sandwich dans une structure cfc, en faisant varier le nombre de plans atomiques qui composent la lame ultramine. L'intervalle de température considéré varie entre des températures proches de zéro jusqu'à la température de Debye. Le choix de cet intervalle n'est pas fortuit. En effet, à des températures bien déterminées, ne disposant de valeurs des contraintes élastiques

expérimentales que pour certains matériaux, nous avons appliqué notre modèle au système Si/Al/Si dans l'intervalle cité ci-dessus.

## I. Chaleur spécifique et conductivité thermique des phonons

Les propriétés thermiques des matériaux massifs ont été traités jusque là, à température ambiante dans le cadre de la thermodynamique classique élaborée dans les années 60. Aujourd'hui, ces théories se trouvent incapables d'expliquer le comportement thermique des nanomatériaux, à basses températures, et nécessitent un traitement quantique.

La mesure de la chaleur spécifique ou la capacité thermique permet de quantifier la capacité d'un corps à céder ou à emmagasiner de l'énergie thermique quand sa température varie. D'un point de vue expérimental, la chaleur spécifique à pression constante est déterminée dans le cas des solides et diffère peu de la chaleur spécifique à volume constant. Elle est donnée par la variation de l'énergie interne en fonction de la température.

$$c_v = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_V \quad (4.1)$$

### I.1. Estimation de la chaleur spécifique

#### a) Loi de Dulong et Petit

A température ambiante, il a été établi expérimentalement par Dulong et Petit, en 1819 [5], que la capacité calorifique de tous les solides est une grandeur constante indépendante de la température voisine de  $3R$  ( $R = 8.314 \text{ (J mol}^{-1}\text{K}^{-1})$  est la constante universelle des gaz parfaits). Ce résultat a été expliqué dans le cadre de la physique classique, pour des systèmes de particules où les forces interatomiques sont harmoniques et les atomes sont assimilés à des oscillateurs harmoniques effectuant de faibles mouvements de vibrations autour de leurs positions d'équilibres. L'énergie moyenne d'un tel système est

$$E = 3N_A k_B T \quad (4.2)$$

Où  $N_A = 6.023 \cdot 10^{23}$  (SI) est le nombre d'Avogadro,  $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$  (J.K<sup>-1</sup>) est la constante de Boltzmann. Il en résulte

$$c_v = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_V = 3N_A k_B = 3R = 25 \text{ J.mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}. \quad (4.3)$$

Ce modèle valable aux températures suffisamment élevées, s'avère infructueux aux basses températures.

### b) Modèle d'Einstein

A basse température, on constate que la chaleur spécifique est une fonction monotone croissante de la température. Sa valeur tend de façon asymptotique vers un maximum qui correspond à la valeur prédite par le modèle de Dulong et Petit.

En utilisant la statistique quantique, Einstein a proposé, en 1907, un modèle [6] selon lequel un solide est formé d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques vibrant indépendamment à la pulsation  $\omega$ , dans les trois directions de l'espace, et que leurs énergies sont quantifiées.

Il en résulte que l'énergie moyenne d'un oscillateur ou d'un mode de vibration est donnée par

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (4.4)$$

L'énergie thermique totale due aux vibrations du réseau est

$$E = 3N_A \langle E \rangle = 3N_A \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (4.5)$$

L'équation (4.1) permet d'obtenir la valeur de la chaleur spécifique.

Aux températures élevées,  $k_B T \gg \hbar\omega$ , sa valeur tend vers la valeur classique de Dulong et Petit. Par contre, aux basses températures,  $k_B T \ll \hbar\omega$ , la chaleur spécifique tend vers zéro

suivant la loi exponentielle  $e^{-\hbar\omega/k_B T}$ .

On définit la température caractéristique d'Einstein  $\Theta_E$ , qui est la température à laquelle commence la décroissance brutale de la chaleur spécifique. De plus, elle est fortement dépendante des propriétés des matériaux, et elle est donnée par

$$\hbar\omega_E = k_B \Theta_E \quad (4.6)$$

$\omega_E$  est la fréquence d'Einstein.

Pour  $T \gg \Theta_E$ , l'estimation de la chaleur spécifique peut être déterminée à partir de la théorie classique, alors que pour  $T \ll \Theta_E$ , une analyse quantique est nécessaire.

### c) Modèle de Debye

Le modèle d'Einstein donne des résultats corrects à hautes températures ou les modes acoustiques peuvent être négligés mais pour des températures inférieures à  $\Theta_E$ , la capacité calorifique décroît avec la température plus rapidement. Sachant qu'en réalité, elle varie en  $T^3$  d'après l'expérience. Ceci est dû au fait que les atomes sont supposés vibrer à la même pulsation  $\omega$ . Debye [7] a complété le modèle d'Einstein en supposant que les oscillateurs harmoniques vibrent avec des pulsations différentes.

On définit la température caractéristique du solide ou température de Debye  $\Theta_D$ , qui dépend elle aussi des propriétés du matériau, par :

$$\hbar \omega_D = k_B \Theta_D \quad (4.7)$$

$\omega_D$  est la fréquence de Debye.

L'équation (4.7) définit la quantité d'énergie maximale capable d'exciter les vibrations du réseau.

Ce modèle conduit au résultat de Dulong et Petit pour des températures élevées. Aux basses températures, l'énergie des vibrations d'ondes acoustiques qui en résulte varie en  $T^4$ . La chaleur spécifique va donc varier en  $T^3$  conformément à l'expérience pour des températures  $\leq 10 K$ . Pour cette plage de températures, les branches optiques ne sont pas thermiquement activées. Seuls les modes acoustiques de grandes longueurs d'ondes sont excités.

## I.2. Conductivité thermique

La conduction thermique est un transfert de chaleur entre deux milieux appelés réservoirs de température en contact. Elle peut être définie comme la transmission de proche en proche de l'agitation thermique qui s'effectue de la région de température élevée (chaude) vers la région de température moins élevée (froide). Sous l'effet d'un apport extérieur de chaleur dont le flux est  $P$ , un cristal sera soumis à un gradient de température  $\Delta T$ .

Les deux grandeurs  $P$  et  $\Delta T$  sont reliées, entre elles, par la relation [8]

$$P = \kappa \times \Delta T \quad (4.8)$$

Ici la constante de proportionnalité  $\kappa$  est une constante positive et elle mesure la capacité d'un matériau à conduire la chaleur.  $C$ 'est la conductivité thermique.

## II. Formalisme mathématique du transport des phonons

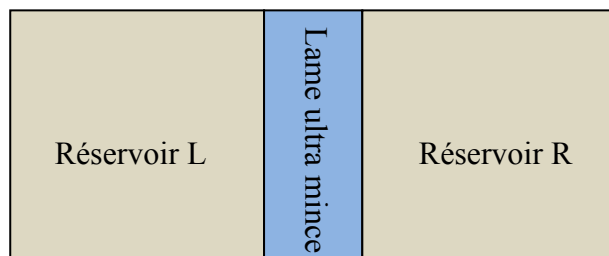
Sous l'effet d'un gradient de température, un transfert de chaleur va s'effectuer de la zone chaude vers la zone moins chaude par un flux de phonons. La théorie cinétique élaborée par analogie à la théorie cinétique des gaz permettra de suivre le déplacement des phonons et de dénombrer l'ensemble des phonons avec leur énergie, leur vitesse et leur répartition. Le flux de chaleur est donné en ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) par l'équation suivante [8]

$$\dot{Q} = \frac{1}{V} \sum_k v E(k) f(r, p) \quad (4.9)$$

Où  $V$  est le volume du système à travers lequel les phonons sont diffusés avec une vitesse  $v$  dans la direction qui nous intéresse,  $E$  leur énergie et  $f$  leur fonction de distribution dans l'espace  $(r, p)$  qui donne la probabilité de trouver un phonon dans l'état  $p$  situé dans une unité de volume autour de  $r$ .

S'agissant de basses températures, un traitement quantique est nécessaire pour expliquer le phénomène observé.

Le formalisme utilisé pour cette étude est analogue à celui du transport électronique [9-11] de Landauer. Le système modèle est composé d'une lame ultramince reliant de deux sous-systèmes semi-infinis considérés comme deux réservoirs de température  $L$  et  $R$  et supposés maintenus à deux températures  $T_L$  et  $T_R$  légèrement différentes tel que  $\Delta T = T_L - T_R > 0$ .



**Figure (4.1)** : Deux réservoirs de températures reliés par une lame atomique ultramince.

Le transport de chaleur de la zone chaude vers la zone froide est donné par les contributions de la dispersion des phonons au niveau des nanojonctions couplant les deux systèmes semi

infinis. Les phonons étant des bosons, ils vont donc obéir à la statistique de Bose-Einstein dont la fonction de distribution s'écrit

$$n = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad (4.10)$$

Les phonons issus du réservoir  $L$  vers le réservoir  $R$ , génèrent un flux de chaleur qui s'écrit sous la forme [12-13]

$$\dot{Q}_{LR} = \frac{1}{V} \sum_j \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q v_{gj}(q) \hbar \omega_j(q) t_j(\omega_j, q) n(T_L, \omega_j(q)) \quad (4.11)$$

Inversement, le flux de chaleur dû aux phonons issus du réservoir  $R$  vers le réservoir  $L$  (partie réfléchie) s'écrit

$$\dot{Q}_{RL} = \frac{1}{V} \sum_j \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q v_{gj}(q) \hbar \omega_j(q) t_j(\omega_j, q) n(T_R, \omega_j(q)) \quad (4.12)$$

Le flux d'énergie thermique qui s'écoule du réservoir chaud vers le réservoir froid est dû au déséquilibre qui se crée entre la transmission du réservoir  $L$  vers le réservoir  $R$  et celle qui s'effectue du réservoir  $R$  vers le réservoir  $L$ . Il est donné par

$$\dot{Q} = \frac{1}{V} \sum_j \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q v_{gj}(q) \hbar \omega_j(q) t_j(\omega_j, q) n(T, \omega_j(q)) \quad (4.13)$$

Où :  $q$  est le vecteur d'onde,  $\omega_j(q)$  est la relation de dispersion d'un mode  $j$  dans la zone perturbée.  $t_j(\omega_j, q)$  est la transmission pour la branche de phonons de vecteur d'onde  $q$ .  $n(T, \omega_j(q))$  est la fonction de distribution de Bose-Einstein définie par  $n = n_L - n_R$

On déduit la conductivité thermique [14-15] qui se met sous la forme

$$\kappa = \frac{\dot{Q}}{\Delta T} = \frac{1}{V} \sum_j \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q v_{gj}(q) \hbar \omega_j(q) t_j(\omega_j, q) \frac{\partial n(T, \omega_j(q))}{\partial T} \quad (4.14)$$

Fondamentalement, pour résoudre ce problème lié à la chaleur, il est impératif de déterminer la transmission phononique et les vitesses de groupe du système étudié.

### II.1. Diffusion des ondes élastiques et vitesses de groupe

Le modèle classique des forces centrales dans l'approximation harmonique, associé à la méthode de raccordement [16-18] adopté dans les chapitres précédents pour l'étude des systèmes sandwichs, peut être transposé à l'étude quantique du transport de chaleur.

L'équation (2.2) permet de déterminer les vitesses de groupe dans différentes directions du système parfait. Dans le système perturbé  $A/B/A$ , l'équation (1.28) nous permet de décrire le mouvement des atomes dans les trois directions de l'espace de la zone de défaut et des zones de raccordement. La matrice dynamique  $D$  obtenue sera de taille  $(p \times q)$ . Elle est dépendante du nombre de plans  $n$ .

$$n = 1, \quad D(9 \times 15),$$

$$n = 2, \quad D(12 \times 18),$$

$$n = 3, \quad D(15 \times 21),$$

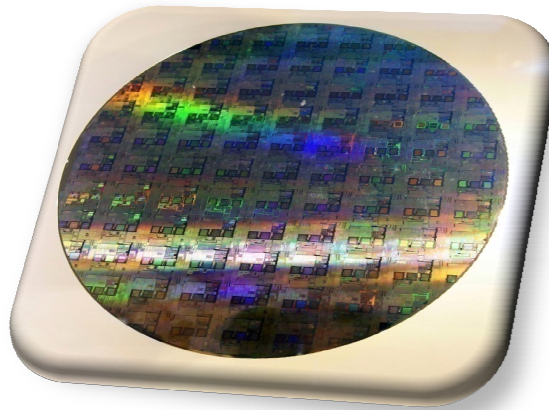
$$n = 4, \quad D(18 \times 24),$$

$$n = 5, \quad D(21 \times 27).$$

### II.2. Application Si/Al/Si

Le transport de chaleur par les phonons étant prépondérant dans les semi-conducteurs [19-20], nous allons donc appliquer notre modèle, qui est un modèle général, au cas d'une lame métallique d'aluminium, reliant deux réservoirs de températures semi-infinis de silicium.

Le silicium a la structure de type diamant qui est une dérivée de la structure cubique à faces centrées. Sa masse atomique est  $m_{\text{Si}} = 4.66 \cdot 10^{-26}$  kg et son paramètre de mailles est  $a_{\text{Si}} = 5.43$  Å. Il est très utilisé dans les technologies des circuits intégrés comme matériau de base. Le silicium étant un matériau semi-conducteur de largeur de bande interdite moyenne (1,12 eV), il s'adapte bien aux contraintes imposées par les applications à des températures normales, soit de 0 à 100°C. Aux plus hautes températures, la performance des systèmes à base de silicium se dégrade progressivement.



**Figure (4.2)** : Plaque de matériau semi-conducteur de silicium [21].

L'augmentation des puissances de fonctionnement nécessitent une bonne gestion thermique des chaleurs générées dans les composants semi-conducteurs. Un refroidissement inapproprié altère considérablement l'efficacité et la fiabilité des ces composants en provoquant des défaillances dont plus de la moitié sont dues aux influences thermiques. Pour y remédier, les composants électroniques doivent être assemblés sur des substrats qui agissent en tant que dissipateurs de chaleur pour permettre leur refroidissement. Seuls quelques matériaux possèdent les propriétés requises pour dissiper la chaleur de manière fiable. On peut citer, à titre d'exemple, le cuivre et l'aluminium qui sont relativement bons conducteurs thermiques et sont largement utilisés comme dissipateurs de chaleur dans l'industrie électronique. Mais leurs coefficients de dilatation thermique élevés limitent leur utilisation et ne peuvent par conséquent servir de substrats pour les semi-conducteurs de haute performance qui sont exposés à d'importantes charges thermiques où l'on préfère les métaux réfractaires comme le molybdène et le tungstène.

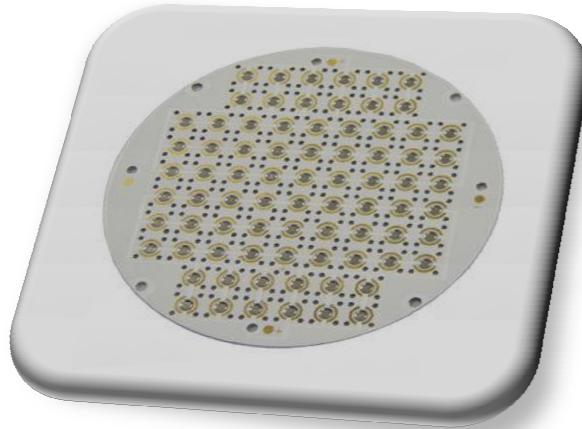
La conductivité thermique et les caractéristiques de la dilatation thermique du semi-conducteur et du substrat doivent être harmonisées de façon optimale afin d'éviter les distorsions indésirables au semi-conducteur.

En revanche, l'aluminium est l'un des métaux les plus couramment utilisés pour des applications industrielles et techniques. Sa température de fusion  $933\text{ K}$  est relativement faible, et la stabilité thermodynamique, à des températures élevées, est d'une grande importance technique et scientifique. En raison de sa structure électronique simple, l'aluminium métallique est utilisé dans les tests des modèles théoriques dans l'étude thermodynamique des cristaux [22-23]. L'aluminium est non-magnétique, de sorte que son

entropie provient majoritairement des phonons [24-25]. Cette entropie peut être attribuée aux vibrations harmoniques des noyaux autour de leurs positions d'équilibre.

L'aluminium cristallise dans le système cubique à faces centrées. Sa masse atomique est de  $m_{Al} = 4.48 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$  et son paramètre de mailles est de  $a_{Al} = 4.05 \text{ \AA}$ . Il est par conséquent en accord de mailles avec le silicium.

La principale utilisation du silicium en tant que corps simple est comme élément d'alliage avec l'aluminium. Les alliages aluminium-silicium sont utilisés pour l'élaboration de pièces moulées, en particulier pour l'automobile (par exemple jantes en alliage) et l'aéronautique (par exemple éléments de moteurs électriques embarqués). Les alliages aluminium-silicium représentent à peu près 55 % de la consommation mondiale de silicium.

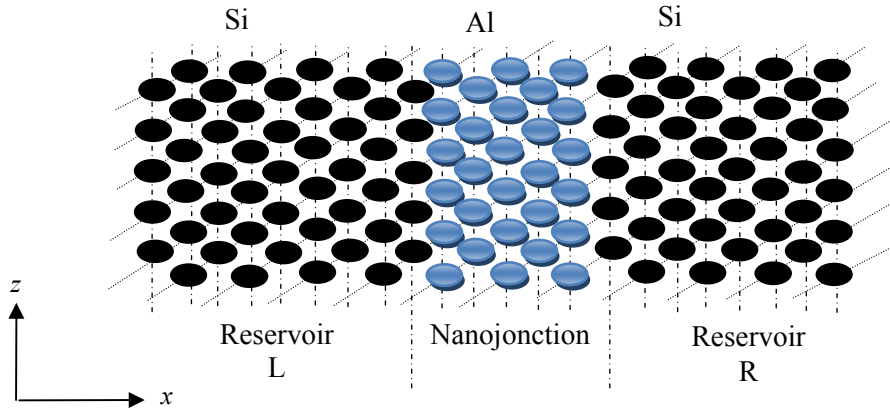


**Figure (4.3)** : Module de composant électronique à base d'aluminium [26].

Le transport thermique à travers les interfaces atomiques peut être amélioré par l'insertion d'une couche intermédiaire entre deux semi-conducteurs semi-infinis. Les structures sandwichs peuvent présenter certaines caractéristiques physiques supplémentaires, avec de meilleures performances que les structures idéales pour des applications spécifiques.

Il est possible de modifier le spectre de fréquences et les propriétés vibratoires, en combinant les couches métalliques avec des structures à base de matériaux semi-conducteurs. Il est donc important de comprendre comment le phénomène de transport à l'échelle nanométrique influe sur le comportement thermique des matériaux super-réseaux et de semi-conducteurs.

### II.2. 1. Système modèle



**Figure (4.4)** : Réservoirs de température semi infinis en Si reliés par une lame métallique en Al.

La figure (4.4) représente deux réservoirs de température semi-infinis en silicium reliés par une lame métallique ultramince en aluminium. Dans les zones  $L$  et  $R$ , les atomes de silicium et d'aluminium sont reliés à leurs proches voisins par des constantes de force élastique  $k_{Si}$  et  $k_{Al}$ , respectivement, alors que dans le domaine de l'interface, la constante de force couplant les deux zones est notée  $k_{Si-Al}$ . Elle est prise comme moyenne arithmétique des deux constantes  $k_{Si}$  et  $k_{Al}$ . Leurs valeurs numériques sont tirées d'un précédent travail. Pour plus de détails, le lecteur trouvera des compléments d'information dans les références [27-28]. Afin de calculer les fréquences normalisées du système, nous définissons pour les régions parfaites en Si, les constantes suivantes

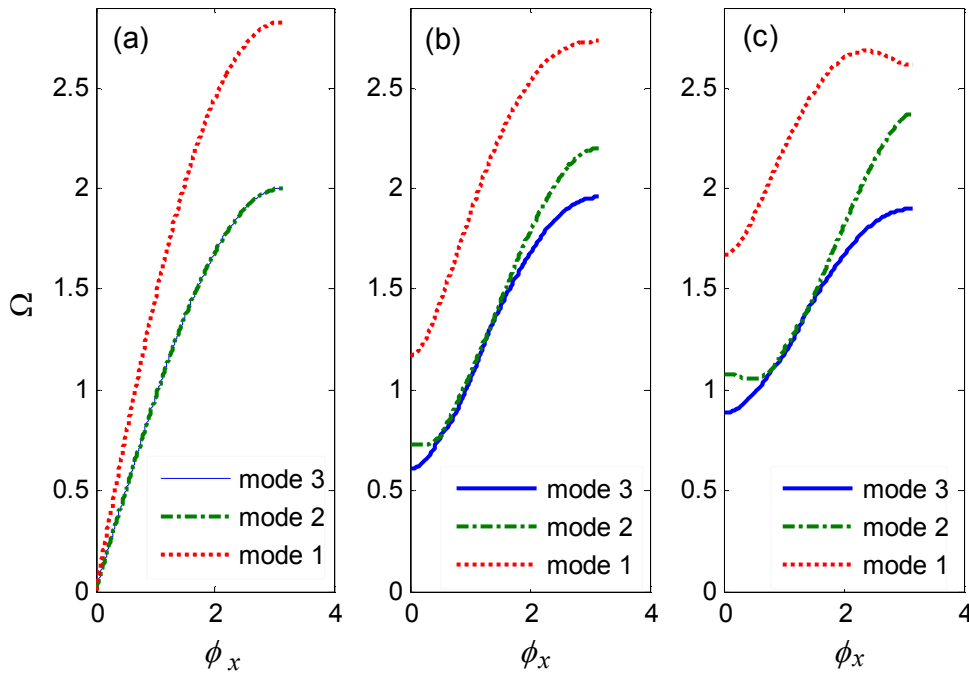
$$m = \frac{m_{Al}}{m_{Si}} \quad \mu_i = \frac{k_{i(Al-Al)}}{k_{1(Si-Si)}} \quad \lambda_i = \frac{k_{i(Si-Al)}}{k_{1(Si-Si)}}$$

Les courbes de dispersion et les vitesses de groupe sont représentées sur les figures (4.5) et (4.6) respectivement, à  $T = 300 K$  dans trois directions différentes.

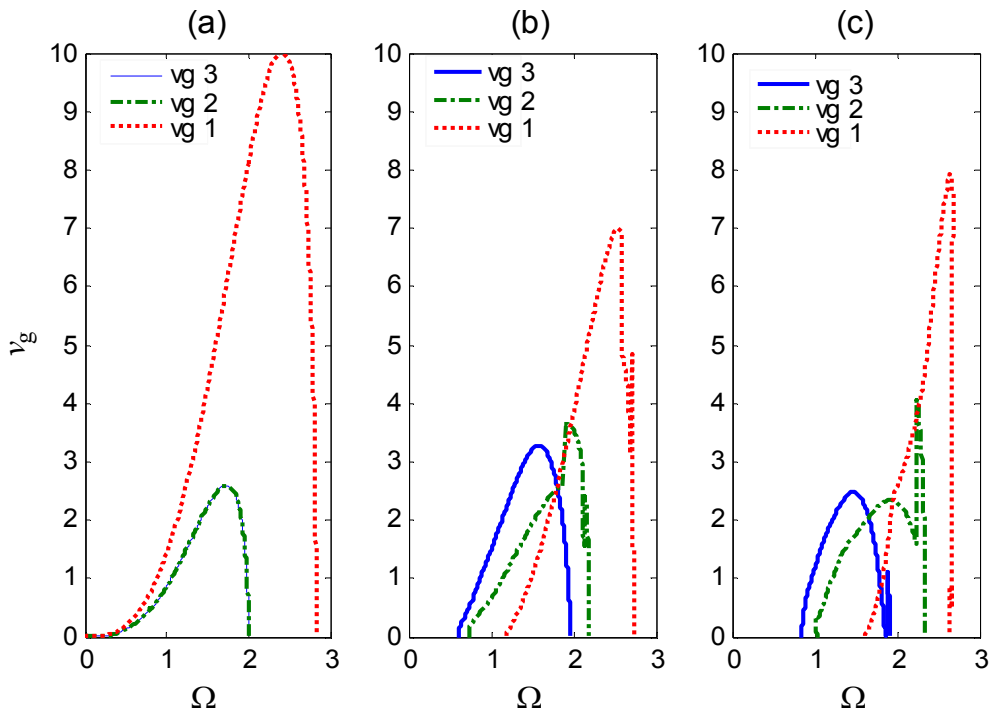
Nous examinerons ensuite la transmittance phononique pour une lame ultramince composée de cinq plans atomiques d'aluminium pour différentes températures.

La conductivité thermique en fonction de la température du système Si/Al/Si sera également calculée en faisant varier le nombre de plans atomiques qui constituent le film d'aluminium. Elle est représentée sur la figure (4.9).

II.2.2. Résultats obtenus



**Figure (4.5) :** Courbes de dispersion de phonons pour le réseau parfait cfc dans la première ZB ( $\phi_x = [-\pi/a, +\pi/a]$ ), pour différents angles d'incidence (a)  $(\phi_y, \phi_z) = (0,0)$ , (b)  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/6, \pi/6)$ , (c)  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/4, \pi/4)$ .



**Figure (4.6) :** Vitesses de groupe du réseau cfc parfait en fonction des composantes  $(\phi_y, \phi_z)$  (a)  $(\phi_y, \phi_z) = (0,0)$ , (b)  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/6, \pi/6)$ , (c)  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/4, \pi/4)$ .

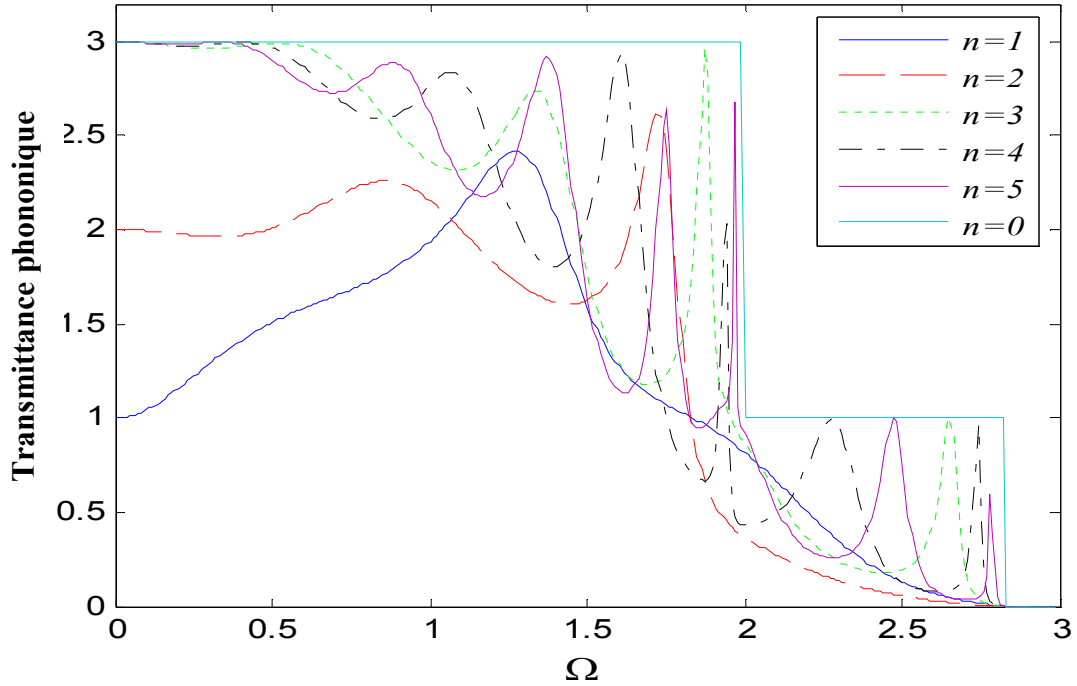


Figure (4.7) : Transmittance phononique du système Si/Al( $n$ )/Si pour différentes épaisseurs de la Al a la température  $T = 300\text{ K}$  dans la direction  $(\phi_y, \phi_z) = (0, 0)$ .

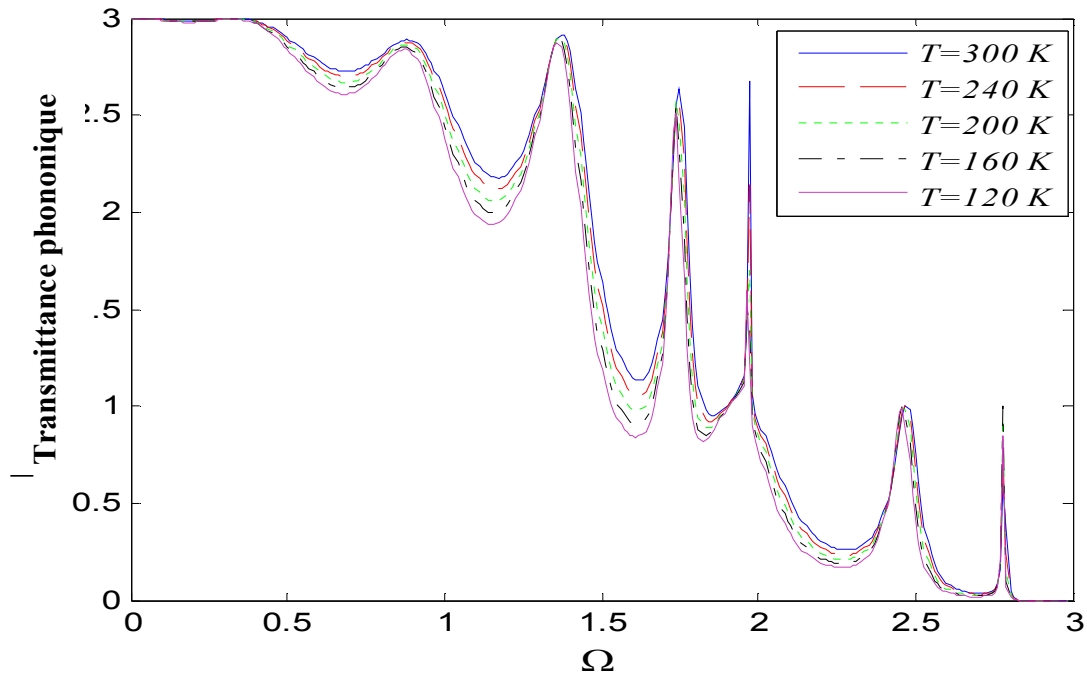
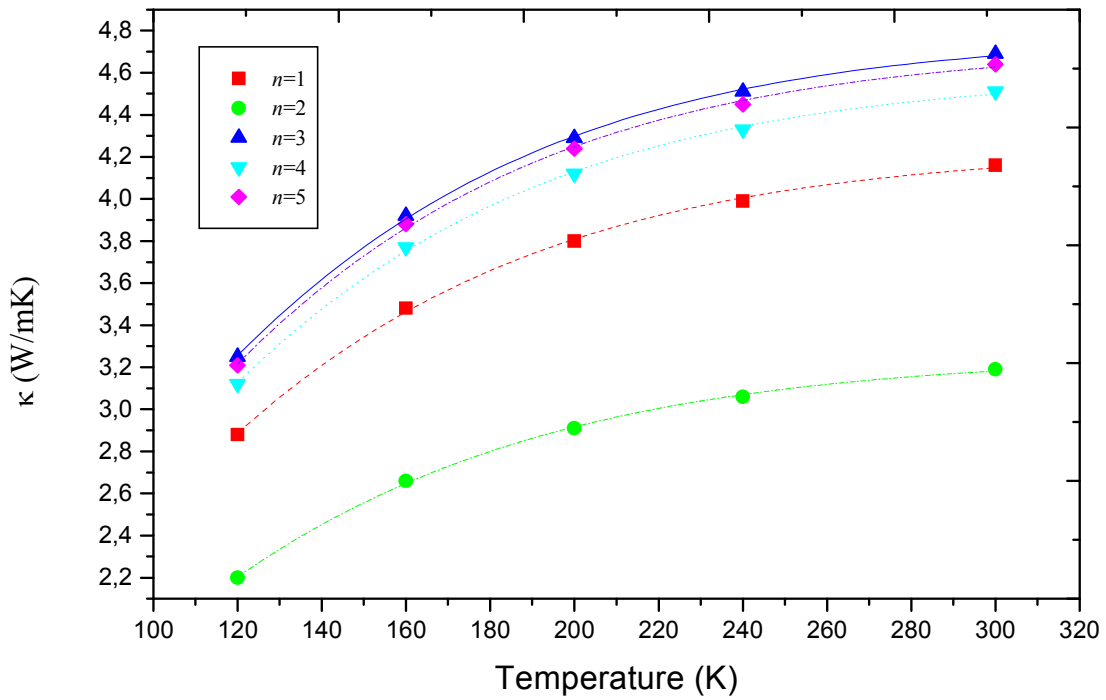


Figure (4.8) : Transmittance phononique de la structure Si/Al(5)/Si, en fonction de différentes températures dans la direction  $(\phi_y, \phi_z) = (0, 0)$ .



**Figure (4.9) :** Conductivité thermique à travers la nanojunction atomique Si/Al/Si, en fonction de la température, pour différentes épaisseurs de la lame métallique ultramince Al.

### Discussion des résultats obtenus

#### i) Courbes de dispersion

Trois branches illustrent sur la figure (4.5) la dispersion des phonons dans la structure parfaite de Silicium pour  $\phi_x \in [-\pi/a, +\pi/a]$ , à la température  $T = 300 K$ , dans les directions  $(\phi_y, \phi_z)$  données par :

- (a)  $(\phi_y, \phi_z) = (0,0)$ ,
- (b)  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/6, \pi/6)$ ,
- (c)  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/4, \pi/4)$ .

Elles correspondent aux trois modes de propagation acoustiques s'étalant chacun sur un intervalle de fréquences bien spécifique.

Nous remarquons, aussi, que les deux modes (1) et (2) sur la figure (4.5a) dans la direction (a)  $(\phi_y, \phi_z) = (0,0)$  sont dégénérées. Ils sont propageants dans l'intervalle de fréquences  $[\Omega_{1\min} = 0.00, \Omega_{1\max} = 2.00]$ , tandis que le mode (3) est propageant dans l'intervalle  $[\Omega_{3\min} = 0.00, \Omega_{3\max} = 2.82]$ , avec des grandeurs normalisées. La fréquence angulaire de vibration du système de Si/Al/Si est donnée par  $\omega = \Omega \times \omega_0$ , où  $\Omega$  est la fréquence normalisée

schématisée en fonction de  $\phi_x$  sur la figure (4.5), et  $\omega_0$  correspond à la fréquence caractéristique du réseau parfait.

Notons que  $\omega_0$  dépend de la température et n'a pas la même valeur pour les structures parfaites de l'aluminium et du silicium. A titre d'exemple, à  $T = 300 K$ , elle vaut approximativement  $37.76 \times 10^{12} \text{ (s}^{-1}\text{)}$  pour le silicium et environs  $21.25 \times 10^{12} \text{ (s}^{-1}\text{)}$  pour l'aluminium. En conséquence, à l'état pur, le silicium a un spectre plus dispersif que celui de l'aluminium.

Dans les deux autres directions  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/6, \pi/6)$  et  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/4, \pi/4)$ , on constate la levée de la dégénérescence sur les figures (4.5b) et (4.5c) des modes (1) et (2), et leurs nouveaux intervalles de fréquences sont, respectivement,

- dans la direction  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/6, \pi/6)$  : mode (1) : [0.60, 1.95], mode (2) : [0.60, 2.20] et mode (3) : [1.18, 2.73] ;
- dans la direction  $(\phi_y, \phi_z) = (\pi/4, \pi/4)$  : mode (1) : [0.90, 1.90], mode (2) : [0.90, 2.37] et mode (3) : [1.67, 2.68].

On constate que les trois modes changent de nature et deviennent optiques puisque  $\Omega \neq 0$ , quand  $\phi_x$  tend vers zéro.

### ii) Vitesses de groupe

Les vitesses de groupes sont schématisées sur la figure (4.6) pour les directions citées ci-dessus. Certains modes de dispersion présentent des zones où la pente est négative, reflétant un changement de sens de propagation dans la structure.

La différence entre les masses atomiques du silicium (28.1) et de l'aluminium (27.0) est négligeable, mais la différence entre leurs vitesses de groupe est importante. Cette différence de vitesses de groupe provoque des effets hétérogènes qui deviennent plus importants lorsque les ondes élastiques se propagent dans la structure Si/Al/Si.

Les vitesses de groupes illustrées sur la figure (4.6a), correspondant à la direction  $(\phi_y, \phi_z) = (0,0)$ , sont plus importantes que celles des figures (4.6b) et (4.6c) dans les deux autres directions  $(\pi/6, \pi/6)$  et  $(\pi/4, \pi/4)$ . Ceci signifie que les phonons optiques se déplacent à de très faibles vitesses de groupe par rapport aux phonons acoustiques. En effet, à basses température, les branches optiques étant thermiquement inactives, nous retiendrons par conséquent la direction  $(\phi_y, \phi_z) = (0,0)$  pour la suite de notre travail de simulation.

### **iii) Transmittance phononique dans le système Si/Al( $n$ )/Si**

Nous avons analysé en premier lieu la transmittance phononique des modes propageants dans le système sandwich Si/Al $_n$ /Si, pour cinq différentes épaisseurs du film mince Al,  $n = 1, 2, 3, 4$  puis 5 plans atomiques. Les résultats sont calculés pour un angle d'incidence  $(\phi_y, \phi_z) = (0,0)$  et à la température  $T = 300 K$  (nettement inférieure à la température de Debye des deux matériaux constituant notre système). Nous rappelons que la température de Debye des systèmes parfait Si et Al sont respectivement  $T_D(\text{Si}) = 640 K$  et  $T_D(\text{Al}) = 426 K$  [29].

Ils sont présentés sur la figure (4.7).

Les nanojonctions composées de un et deux plans atomiques présentent une faible transmittance aux basses fréquences, puis elle augmente avec l'augmentation de la fréquence pour atteindre son maximum dans les deux cas, au centre de l'intervalle des fréquences. Au delà de cette zone, une décroissance monotone est observée tendant vers zéro aux fréquences élevées. Les faibles valeurs de la transmittance aux basses fréquences obtenues dans ces configurations peuvent donc être attribuées à la réduction de l'ensemble des interactions élastiques de même nature sur la zone interfaciale, en comparaison avec les autres nanojonctions considérées.

Concernant les nanojonctions à trois, quatre et cinq plans atomiques, un spectre de pics de type Fabry-Pérot est observé indiquant une importante transmission à ces fréquences, au delà desquelles la transmittance subit une décroissance rapide avec l'augmentation de la fréquence. On remarque également que le nombre de minimas de la conductance est égal dans chaque configuration au nombre de plans atomiques qui composent la lame ultra mince reflétant la chute de la conductance au voisinage de chaque plan.

La transmission totale sur le réseau Si parfait est décrite par le cas  $n = 0$ . Nous l'avons représentée sous la forme d'un histogramme global pour la comparaison avec le spectre de vibration des nanojonctions après l'introduction de la lame atomique.

### **iv) Conductance phononique dans le système Si/Al(5)/Si à différentes températures**

La figure (4.8) illustre les résultats de la conductance phononique dans la direction  $(\phi_y, \phi_z) = (0,0)$ , obtenue pour une nanojonction aluminium à cinq plans atomiques de type Si/Al(5)/Si à différentes températures, strictement inférieures aux températures de Debye de l'aluminium et du silicium. On constate que la conductance suit le même comportement à caractère Fabry-Pérot à ces températures avec une proportionnalité entre la transmission et la température. Dans ce domaine de températures, les atomes de silicium imposent leur

mode de vibration via les constantes élastiques aux atomes de l'aluminium, ce qui maintient un certain ordre atomique dans le système. Cependant, cet effet n'est pas homogène à travers la nanojonction, et l'influence des réservoirs de Si diminue avec l'augmentation du nombre de plans atomique composant la lame ultramince de Al.

#### v) *Conductivité thermique du système Si/Al(n)/Si*

La conductivité thermique  $\kappa$  des modes de vibration est calculée à l'aide de l'équation (4.16), en fonction de la température. Notre modèle pour le transport thermique à travers une nanojonction métallique ultramince donne des résultats numériques pour le système Si/Al( $n$ )/Si. Les calculs sont effectués pour cinq épaisseurs différentes de la nanojonction Al à savoir 1, 2, 3, 4 et 5 plans. Les résultats de la conductivité thermique  $\kappa$  sont exprimés en ( $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ), sont représentés sous forme de points sur la figure (4.9), et les courbes continues, illustrent les meilleurs ajustements dans la gamme de température de 120K à 300K. Plusieurs conclusions peuvent être tirées. Dans le cas d'une nanojonction à un seul plan atomique, la conductivité thermique  $\kappa$  est relativement faible et varie peu en fonction de la température. Pour les autres cas, aux basses fréquences, les faibles conductivités thermiques sont attribuées aux faibles vitesses de groupe des phonons et de la transmittance phononique qui en découle. Les résultats montrent que la variation de l'épaisseur de la lame d'aluminium ne détermine pas un comportement bien spécifique de la conductivité thermique. Il est à noter également, que le transport de chaleur à travers ces nanojonctions atomiques pourrait être réduit ou augmenté en contrôlant leurs propriétés élastiques et l'épaisseur de la nanojonction.

#### **Conclusion**

Nous avons présenté un modèle de calcul concernant le transport thermique par phonons, à travers une nanojonction intercalée entre deux réservoirs de températures semi-infinis.

Le modèle est général, et appliqué numériquement à une lame métallique en aluminium d'épaisseurs variables, reliant deux sous-systèmes semi-infinis en silicium de type Si/Al( $n$ )/Si,  $n$  étant le nombre de couches composant le film mince. Nous avons montré l'existence de résonances qui peuvent présenter des comportements très différents au voisinage des zones interfaciales, qui sont d'autant plus importantes en augmentant l'agitation thermique. Le transfert thermique dans ces structures est fortement lié à

l'environnement élastique et à l'épaisseur des films minces joignant les deux réservoirs semi-infinis.

### Références

- [1] J. M. Ziman. *Electrons and Phonons*. Oxford University Press, New York, (2001).
- [2] D. H. Santamore and M. C. Cross, *Phys. Rev. B* 66, 144302 (2004).
- [3] D. H. Santamore and M. C. Cross. *Phys. Rev. B* 63, 184306 (2001).
- [4] D. H. Santamore and M. C. Cross. *Physica B* 316–317, 1-622 (2002).
- [5] A. T. Petit and P. L. Dulong. *Annal. Chim. Phys.* 10, 395 (1819).
- [6] Albert Einstein, *Annalen der Physik*. 22, 180 (1907).
- [7] P. Debye, *Annalen der Physik* 39, 789 (1912).
- [8] J. Savin Heron, Thèse de doctorat d'état, Université Joseph Fourier-Toulouse, France (2009).
- [9] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Mareland and C. T. Foxon, *Rev. Lett.* 60, 848 (1988).
- [10] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D.C. Peacock, D. A. Ritchie and G. A. C. Jones, *J. Phys. C*, 21: L209 (1988).
- [11] M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* 57, 1761 (1986).
- [12] B.C. Daly, H. J. Maris and K. Imamura, *J. Phys. Rev. B* 66, 024301 (2002).
- [13] H.K. Lyeo and D.G. Cahill, *Phys. Rev. B* 73, 144301 (2006).
- [14] K. Schwab, J. L. Arlett, J. M. Worlock 1, M. L. Roukes . *Physica E* 9, 60 (2001).
- [15] A. Khater, M. Belhadi and M. Abou Ghantous, *Eur. Phys. J. B* 80, 363 (2011).
- [16] B. Bourahla, O. Nafa, R. Tigrine, *Physica B* 406, 725 (2011).
- [17] O. Nafa, B. Bourahla, A. Khater, *Physica B* 407, 1027 (2012).
- [18] A. Khater, B. Bourahla and R. Tigrine, *J. Phys.: Conf. Ser.* 92, 012032 (2007).
- [19] B. C. Daly, H. J. Maris and K. Imamura, *J. Phys. Rev. B* 66, 024301 (2002).
- [20] H. K. Lyeo and D. G. Cahill, *Phys. Rev. B* 73, 144301 (2006).
- [21] [www.futura-sciences.com/magazines/matiere/infos/dico/d/chimie-silicium-14517](http://www.futura-sciences.com/magazines/matiere/infos/dico/d/chimie-silicium-14517).
- [22] M. Zoli and V. Bortolani, *J. Phys.: Condens. Matter* 2, 525 (1990).
- [23] K. Moriguchi and M. Igarashi, *Phys. Rev. B* 74, 024111 (2006).
- [24] M. Zoli and V. Bortolani, *J. Phys.: Condens. Matter* 2, 525 (1990).
- [25] K. Moriguchi and M. Igarashi, *Phys. Rev. B* 74, 024111 (2006).
- [26] <http://m.fr.dhgate.com/product/electronics-component-module-aluminum-based>.
- [27] G. Gilat and R. M. Nicklow, *Phys. Rev.* 143, 487 (1966).
- [28] G. Kresse and J. Furthmüller, *Comput. Mater. Sci.* 6, 15 (1996).
- [29] [https://fr.wikipedia.org/wiki/Temperature\\_de\\_Debye](https://fr.wikipedia.org/wiki/Temperature_de_Debye).

## **Conclusion générale**

Les nanotechnologies se sont imposées comme l'une des branches les plus prometteuses de la recherche scientifique, vu leurs applications multiples dans divers domaines en relation directe avec notre quotidien. Les télécommunications, la santé, l'électronique et bien d'autres disciplines sont des domaines qui ont très souvent recours à des micro- et nano-dispositifs renfermant des interfaces qui sont le siège de phénomènes physiques fortement modifiés par la brisure de symétrie engendrée par ces interfaces. De plus, le transfert de chaleur à l'échelle nanométrique, particulièrement par les phonons dans les semi-conducteurs, constituent un enjeu industriel majeur vu que le développement de cette discipline est conditionné par une bonne gestion thermique et la mise en place de procédés de dissipation de chaleur efficaces dans les composants nanométriques.

Les structures à interfaces ont fait l'objet de plusieurs investigations par de nombreux auteurs. La plupart de leurs travaux sont orientés vers l'étude du comportement des excitations élémentaires (électrons, phonons et magnons). Notre contribution dans ce domaine consiste à traiter la problématique du transport des phonons à travers les interfaces et les lames atomiques minces confinées dans des structures cubiques de type cc et cfc. Notre étude est théorique basée sur l'approximation harmonique associée au modèle des forces centrales et à la méthode de raccordement. Les simulations numériques sont menées à l'aide de programmes élaborés par nous même, ce qui a permis de relever le comportement et les propriétés des systèmes étudiés et de prédire leurs évolutions. En particulier, nos résultats montrent à l'échelle des petites longueurs d'ondes, que les phonons sont sensibles à la structure microscopique des surfaces et des interfaces en contact, et la détermination des courbes de dispersion correspondantes peuvent fournir des informations capitales concernant ces structures et les forces interatomiques mises en jeu par les différentes espèces présentes. De plus, les mécanismes du transport thermique dû aux phonons notamment dans les matériaux diélectriques et semi-conducteurs, sont d'une importance cruciale, et la maîtrise du déplacement de ces porteurs de chaleur ouvre la voie à la conception de milieux aux propriétés nouvelles.

Nous avons montré que la présence d'une interface atomique modifie les spectres de transmission/réflexion des ondes élastiques, dont le comportement est fortement dépendant des masses atomiques et de l'environnement élastique des matériaux considérés. La brisure de symétrie laisse apparaître de nouveaux états localisés au voisinage de l'interface qui vont

interagir avec les modes propageants du volume, générant des résonances dont certaines sont identifiées comme des résonances de type Fano.

En augmentant le nombre d'interfaces, engendré par l'insertion de lames atomiques de taille nanométriques dans les structures cubiques ( $A/B/A$  et  $A/B/A/B/A$ ), nous avons montré que les structures obtenues constituent des résonateurs de Fabry-Pérot. Chaque film ultramince se compose d'un nombre fini de plans atomiques. L'augmentation du nombre de zones assurant la nanojonction dans les structures cc et cfc forment des systèmes multi-interfaces. Ces derniers permettent de comprendre comment ces structures en sandwich affectent le mouvement des atomes, leurs densités d'états, et l'amplitude de leurs déplacements ainsi que la propagation d'ondes élastiques. Une attention particulière est accordée aux interactions entre les modes localisés au voisinage des nanojonctions et les états propageants du continuum, suivant une direction donnée. Les spectres de vibration montrent la dépendance du transport phononique, des dimensions et de la géométrie des structures et des lames atomiques insérées.

Grâce aux résultats de la transmission obtenus, nous avons pu déterminer le flux de chaleur diffusé par une lame métallique d'aluminium insérée en sandwich dans une structure de silicium. L'accent est mis sur l'effet de la variation de la température sur la transmittance phononique ainsi que sur l'effet de la variation de l'épaisseur de la lame métallique sur la conductivité thermique du système étudié. Cette recherche s'inscrit dans un domaine scientifique à l'interface de l'énergétique traitant le transfert de chaleur et de la science des matériaux, ce qui ouvre la voie à de nouvelles perspectives visant principalement la maîtrise de la matière nanométrique et ses applications. On peut citer entre autres :

- étudier la diffusion via des interfaces entre des structures à maillages différents,
- tenir compte des interactions entre phonons et électrons,
- évaluer la conductivité et la capacité calorifique des systèmes multi-interfaces.

**Résumé**

Cette thèse est consacrée à l'étude théorique de la dynamique vibrationnelle des structures atomiques. Le but est de comprendre les mécanismes relatifs à la diffusion et à la propagation des ondes élastiques via les interfaces et les lames atomiques ultraminces insérées dans des structures cubiques. Les systèmes modèles sous étude sont répartis en deux catégories. La première décrit l'effet d'une seule interface de type A/B sur les propriétés dynamiques des structures cc et cfc, obtenues par la juxtaposition de deux systèmes semi-infinis ayant différents paramètres élastiques. Quant à la deuxième, elle fait l'objet des systèmes à plusieurs interfaces, formant un résonateur de Fabry-Pérot. En particulier, elle traite l'impact de deux puis quatre zones interfaces sur les spectres vibrationnels des structures de types A/B/A et A/B/A/B/A. Ces structures sont obtenues par insertion de films ultraminces en sandwich dans un système cubique cc et cfc. Chaque lame atomique se compose d'un nombre fini de plans atomiques, et de plus le choix est fait de telle sorte que les cristallisations du système soient reproduites. La dynamique des atomes qui sont les excitations élémentaires se propageant collectivement sur les plans atomiques des systèmes par l'intermédiaire des interfaces et les lames insérées en sandwichs a été réalisée en employant la méthode de raccordement. Le transfert de chaleur via ces interfaces est également déterminé et analysé pour les semi-conducteurs. Les résultats des spectres de vibration (coefficients de transmission, états localisés, transmittance et DOS) montrent la sensibilité et la dépendance du transport phononique des dimensions et de la géométrie des structures et des lames atomiques insérées. Ils sont calculés comme éléments d'une matrice de diffusion de type Landauer, par analogie avec le transport électronique cohérent.

**Mots clés :** Dynamique des interfaces – Systèmes à plusieurs interfaces – Transfert de chaleur par phonons

**Abstract**

This thesis is dedicated to the study of vibrational dynamics of atomic structures. The main interest is to understand the mechanisms for the diffusion and propagation of elastic waves through the atomic interfaces and ultrathin atomic films inserted into cubic structures.

The model systems under study are divided into two categories. The first one describes the effect of a single interface, type A/B, on the dynamic properties of fcc and bcc structures, obtained by juxtaposition of two semi-infinite systems with different elastic parameters.

As for the second one, it is the subject of systems with multiple interfaces, forming a Fabry-Perot resonator. In particular, it deals the impact of two, then four interface zones on the vibrational spectra of the sandwich type systems A/B/A and A/B/A/B/A. These structures are built by inserting ultrathin films in fcc and bcc systems. In addition, each atomic film is compound of a finite number of atomic layers; furthermore the choice is made such that the crystallizations of the cubic mesh are reproduced.

The dynamics of atoms, which are the elementary excitations propagating collectively on the atomic planes of the reservoirs through the interfaces and the thin films inserted, was achieved using the matching method. Heat transfer through these interfaces is also determined and analyzed for semiconductor lattices. The results of vibration spectra (transmission coefficients, localized phonon states, transmittance and DOS) show the sensitivity and the dependence of the transport phononic dimensions and geometry of structures and atomic inserted thin films. They are calculated as elements of a Landauer-type scattering matrix, by analogy with coherent electron transport.

**Keywords:** Interfaces dynamic – Systems multi-interfaces – Phonons heat transfer