

N° d'ordre :

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOULOU D MAMMERI DE TIZI-OUZOU
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE CHIMIE



DOMAINE : SCIENCES DE LA MATIERE
FILIERE : CHIMIE
MEMOIRE DE MASTER
SPECIALITE : CHIMIE –PHYSIQUE

THEME

**Spectres de vibration liés aux défauts d'empilement dans
les matériaux composites bidimensionnels**

Présenté par : **CHEBLI Sabrina**

Soutenu publiquement, le 18 / juin/2018, devant le Jury composé de :

CHAOUCHI	Ahcene	Professeur	UMMTO	Président
BOURAHLA	Boualem	Professeur	UMMTO	Encadreur
NAFA	Ouahiba	MC/B	UMMTO	Examinatrice
KHEFFACHE	Sedik	MA/A	U/Bouira	Examineur

Remerciements

Le travail de ce mémoire de master a été réalisé au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud MAMMERI de Tizi-Ouzou, sous la direction scientifique du Professeur Boualem BOURAHLA.

Je tiens à lui exprimer ma gratitude pour avoir dirigé mon mémoire de master. Je suis reconnaissante pour son aide, sa patience, sa disponibilité, ses encouragements, ses conseils et ses précieuses orientations tout le long de la durée de mon stage de formation, ce qui m'a permis de mener à bien mon travail.

Je tiens à remercier vivement les membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Monsieur CHAOUCHI AHCENE, Professeur à l'UMMTO, d'avoir accepté de présider le jury de soutenance.

Ma reconnaissance va aussi aux membres de jury, Madame NAFA OUAHIBA, (Epouse ZEKRI) maître de conférences/classe B à UMMTO, et Monsieur KHEFFACHE SEDIK, maître assistant / classe A à l'université de BOUIRA, qui m'ont fait l'honneur de contribuer à l'examen de mon modeste travail.

J'exprime aussi ma gratitude à tous les enseignants ayant contribué à ma formation durant tout mon cycle d'étude.

Mes remerciements vont aussi à mes camarades et amis qui ont partagé des moments de joie et de stress durant notre cursus.

Je n'oublie pas mes parents et toute ma famille. Je leur exprime les remerciements les plus vifs pour leurs soutiens, leurs encouragements et leurs patiences.

Sabrina CHEBLI

Sommaire

<i>Introduction générale</i>	3
<i>Chapitre I</i>	6
<i>Dynamique des matériaux composites parfaits bidimensionnels</i>	6
<i>Introduction</i>	6
<i>I.1. Rappels cristallographiques</i>	6
<i>I.2. Notions de dynamique du réseau</i>	6
<i>I.3. Dynamique des atomes d'un système parfait</i>	7
<i>I.4. Description du système modèle étudié</i>	10
<i>I.5. Résultats et discussion</i>	11
<i>Chapitre II</i>	15
<i>II.1. Défauts dans les cristaux</i>	15
<i>II.2. Méthodes employées pour étudier la dynamique des réseaux perturbés</i>	16
<i>II.3. Principe de la méthode de raccordement</i>	17
<i>II.4. Dynamique du système présentant un défaut d'empilement</i>	18
<i>II.4.1. Description du système perturbé</i>	18
<i>II.4.2. Matrice dynamique du système perturbé</i>	19
<i>II.4.3. Matrice de raccordement</i>	19
<i>II.4.4. Etats localisés de phonons</i>	21
<i>II.5. Discussion des résultats</i>	21
<i>Chapitre III</i>	255
<i>Densités spectrales et densités d'états vibrationnelles</i>	25
<i>Introduction</i>	255
<i>III.1. Densités spectrales et densités d'états vibrationnelles</i>	25
<i>III.1.1. Densités spectrales vibrationnelles</i>	25
<i>III.1.2. Spectres des densités d'états vibrationnelles</i>	26
<i>III.2. Résultats et discussion</i>	277
<i>Conclusion générale</i>	2929
<i>Références</i>	30
<i>Résumé</i>	30

Introduction générale

Un matériau composite est constitué d'assemblage de deux matériaux ou plus de nature différente. L'un de ces matériaux est dit matrice, les autres sont appelés renforts. La combinaison entre ces derniers permet d'avoir un nouveau matériau hétérogène avec des performances supérieures à celles des composants pris séparément. Le principal intérêt de l'utilisation des matériaux composites provient de ses excellentes caractéristiques et bonnes propriétés physiques, électroniques, mécaniques, etc. Les matériaux composites sont plus fiables par rapport aux matériaux traditionnels [1], ils apportent de nombreux avantages fonctionnels, nous citons : légèreté, grande résistance à la fatigue, liberté des formes, maintenance réduite, faible vieillissement sous l'action de l'humidité, la chaleur, la corrosion et insensibles aux produits chimiques sauf les décapants de peinture qui attaquent les résines, etc.

Les matériaux composites peuvent être appliqués dans plusieurs domaines de la technologie moderne (aéronautique, médecine, télécommunications, ...), où les grandes performances sont exigées. Mais leur utilisation reste tributaire de la maîtrise de leurs propriétés vibrationnelles qui sont à la base du mouvement des atomes autour des positions d'équilibre, engendrant ainsi la naissance et la propagation d'ondes de types élastiques dans ces matériaux. La science des matériaux composites intéresse différents secteurs d'activités, nous citons, le génie civil, la géologie, l'isolation vibratoire, etc.

Le contrôle des propriétés vibratoires permettra d'usiner des pièces avec des caractéristiques parfaitement connues et performances améliorées, pour utilisation dans des conditions spécifiques (grandes chaleurs ou froid extrême), ceci passe inévitablement par l'étude de la dynamique des réseaux et la propagation du paquet d'ondes dans le matériau.

Le concept de dynamique du réseau, définissant tout simplement les phonons, 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. Le phonon peut être assimilé à une particule d'énergie " $\hbar\omega$ ", de vecteur d'onde " \vec{q} ". Ce qui veut dire que le phonon est une particule fictive, il n'a pas d'existence propre, mais il peut être considéré si le réseau existe et que les atomes vibrent (en mouvement). Il se comporte comme une vraie particule à l'intérieur du cristal.

Comme toutes les particules, les phonons interagissent avec les autres particules présentent dans leur voisinage (électrons, spins). En effet, c'est par l'intermédiaire des phonons que les électrons libres du cristal échangent de l'énergie avec le réseau d'atomes [2].

Historiquement, l'étude des ondes a concerné 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. Ensuite, 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 propagent dans l'air donnent naissance au son. Les ondes du champ électromagnétique dans le vide génèrent la lumière. Les tremblements de terre sont l'une des conséquences directes de la propagation des ondes mécaniques dans le sol, et les ondes de déformations des matériaux solides sont les résultantes de la dynamique des réseaux atomiques [3].

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 [4], en utilisant les conditions aux limites périodiques dans le système infini. Par la suite, le physicien allemand W. Ledermann fut l'auteur des études sur la dynamique des systèmes semi-infinis [5], 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 [6]. La diffusion de phonons et le transport de chaleur dans les matériaux sont toujours des thématiques ouvertes [7].

La simulation numérique des phénomènes physiques de son côté, a conduit à une révolution scientifique permettant d'étudier le fonctionnement, les propriétés des systèmes et de prédire leurs évolutions (expériences virtuelles).

Mais, la problématique principale réside dans le choix des modèles physiques et dans la conception des méthodes numériques efficaces [8]. La confrontation des résultats prédits avec des données expérimentales disponibles constitue un moyen incontrôlable de vérification des modèles théoriques élaborés.

Le concept de dynamique du réseau, définissant tout simplement les phonons, 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. Le phonon

peut être assimilé à une particule d'énergie " $\hbar\omega$ ", de vecteur d'onde " \vec{q} ". Ce qui veut dire que le phonon est une particule fictive, il n'a pas d'existence propre, mais il peut être considéré si le réseau existe et que les atomes vibrent (en mouvement). Il se comporte comme une vraie particule à l'intérieur du cristal.

Le but de ce travail est de déterminer les propriétés vibrationnelles d'une structure composite 2D parfaite, obtenue par juxtaposition de séquences alternées de chaînes atomiques de deux matériaux *A* et *B*. La perturbation de l'ordre des séquences engendre un défaut d'empilement. La dynamique de ce dernier a fait l'objet d'une attention particulière, et ce dans le but de relever les modes de vibration supplémentaires qui apparaissent dans les spectres de vibration.

L'étude théorique, présentée, est basée sur des simulations numériques, utilisant le formalisme développé par Landauer-Büttiker. Le travail est mené à l'aide de la méthode de raccordement qui permettra de prendre en considération le problème de la brisure de symétrie causée par l'existence surfaces, interface, et/ou de défauts atomiques [9].

Nous utilisons l'approche basée sur la dynamique vibrationnelle classique de Newton.

L'ensemble du travail que nous présentons est structuré de la façon suivante :

Dans le premier chapitre, nous avons présenté les notions de base de la dynamique vibrationnelle d'un système cristallin parfait. Nous avons également exposé la démarche et les étapes à suivre dans l'écriture de l'équation du mouvement d'un atome dans son environnement élastique. Comme application, nous avons examiné la dynamique des structures composites bidimensionnelles (2D) parfaites, ce qui a permis de déterminer les modes propageant des systèmes sous étude et de tracer les courbes de dispersion dans des directions d'incidence arbitraires.

Le second chapitre est consacré à la description de l'effet d'un défaut d'empilement sur la dynamique d'une structure composite 2D, en déterminant la matrice dynamique ainsi la matrice de raccordement et les calculs associés.

Enfin, dans le troisième chapitre, nous calculons les densités spectrales et les densités d'états. Les densités sont tracées et commentées.

Nous terminerons le travail par une conclusion générale et des références bibliographiques.

Chapitre I

Dynamique des matériaux composites parfaits bidimensionnels

Introduction

L'objectif de ce chapitre est de présenter un ensemble d'outil mathématiques et les méthodes qui permettent de décrire le mouvement des atomes dans différentes structures composites. Tout d'abord, nous rappelons les éléments de base qui sont nécessaires pour mener à bien nos différents calculs. En second étape, nous présentons en détails comment obtenir la matrice dynamique de systèmes examinés. Ces matrices sont introduites dans des programmes informatiques. Ayant pour but la détermination des spectres donnant accès aux propriétés vibrationnelles des matériaux composites bidimensionnels (sous forme de couches multi-atomiques).

I.1. Rappels cristallographiques

Un solide cristallin 2D est constitué par une répétition périodique du motif atomique, dans les deux dimensions de l'espace. Le motif peut être mono ou polyatomique (dit aussi moléculaire). Cet arrangement régulier est appelé réseau cristallin, et les points qui le constitue sont appelés nœuds. La périodicité d'un cristal est décrite par des vecteurs positions qui localisent chaque maille élémentaire du cristal.

Notre étude est effectuée dans le réseau bidimensionnel (appelé aussi réseau plan). Ce dernier est défini par trois paramètres, deux vecteurs de base \vec{a} et \vec{b} dirigés, respectivement, suivant la direction (Ox) et (Oy) et l'angle (\vec{a}, \vec{b}) appelé γ . Les nœuds du réseau se déduisent par la translation d'un nœud origine à l'aide du vecteur période \vec{a} ou \vec{b} ou la combinaison des deux : $n\vec{a} + m\vec{b}$.

I.2. Notions de dynamique du réseau

Le phonon est l'énergie minimale associée à une oscillation (vibration cristalline). C'est une notion de mécanique quantique basée sur le concept de dualité onde-corpuscule, 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 particulier quand le réseau est traité d'un point de vue quantique.

Lorsqu'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 [10]. Cela signifie que chacun de ces modes peut vibrer indépendamment des autres modes. Leur nombre dépend de la structure du système considéré, de ses constituants ainsi que des conditions aux limites. Il est égal au nombre de sites par cellule unitaire qu'on multiplie par le nombre de degrés de liberté.

I.3. Dynamique des atomes d'un système parfait

Le résultat qu'on obtient dans le cadre d'une description classique de la dynamique de vibration, pourra être transposé sans difficulté au cas quantique, il s'accorde parfaitement avec les résultats expérimentaux [11]. C'est la raison pour laquelle on s'attache dans ce qui suit, à décrire classiquement les vibrations du réseau.

Les forces interatomiques, sont essentiellement la cause de l'arrangement spécifique des atomes du réseau cristallin. Elles font office de ressort reliant une paire d'atomes dans l'approche classique.

Concrètement, sous l'effet d'une excitation quelconque (thermique, électromagnétique, ou mécanique), tous les atomes vibrent en entraînant une modification du nuage électronique. Ceux-ci sont dus aux forces de rappel reliant les sites d'atomes voisins qui tentent de ramener le système à sa position d'équilibre [12 -13].

L'équation qui régit le mouvement d'un atome de masse m_n positionnée sur le site n est donnée par la deuxième loi de Newton :

$$m_n \frac{d^2 \vec{u}(n,t)}{dt^2} = \sum_{n'} \vec{f}_{nn'} \quad (1)$$

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. L'équation se met sous la forme :

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

Où : α et β désignent l'une des directions cartésiennes Ox , Oy , et $m \equiv m_n$ est la masse de l'atome positionné sur le site n , $\bar{u}_\alpha(n,t)$ l'amplitude de vibration suivant la direction α . La distance r_α est la composante selon la direction α du vecteur $\vec{r}(n,n')$ joignant les positions d'équilibre des atomes n et n' , d est le module du vecteur $\vec{r}(n,n')$, et $k(n,n')$ est la constante de force d'interaction entre les deux sites n et n' .

En raison de la périodicité du réseau, alors les conditions aux limites périodiques de Born Von Karman sont applicables. Dans ce cas, les solutions de l'équation (2) sont des ondes planes progressives de la forme

$$\bar{u}_\alpha(n,t) = \bar{u}_\alpha^0(n) \times \exp i[\vec{q} \cdot \vec{r}(n,n') - \omega t] \quad (3)$$

Où : $\bar{u}_\alpha^0(n)$ est l'amplitude vibrationnelle de l'atome n suivant la direction α , ω la fréquence de vibration.

En remplaçant l'expression $\bar{u}_\alpha(n,t)$ dans l'équation (2), on obtient une nouvelle équation, qui est donnée par

$$\omega^2 m \bar{u}_\alpha(n) = \sum_{n \neq n'} \sum_{\beta} \left[\frac{\vec{r}_\alpha \cdot \vec{r}_\beta}{d^2} \right] k(n,n') [\bar{u}_\beta(n',\omega) - \bar{u}_\beta(n,\omega)] \quad (4)$$

L'équation (4) peut être écrite pour les N atomes contenus dans la cellule élémentaire, et selon les deux directions cartésiennes. Nous sommes alors, en présence d'un système de $(2N)$ équations de mouvements (il y a 2 degrés de liberté par site), ce qui donne une matrice $D(2N \times 2N)$.

Comme, il y a deux sites par cellule unitaire, alors, on obtient une matrice carrée de taille (4×4) . Cette matrice peut être écrite sous la forme suivante

$$[\Omega^2 I - D(\vec{q}, r, r_{1A}, r_{1B})] |u\rangle = 0 \quad (5)$$

Dest appelée matrice dynamique, pour chaque vecteur d'onde $\vec{q} \equiv (q_x, q_y)$, le doublet (q_x, q_y) regroupe les composantes du vecteur d'ondes du réseau réciproque, respectivement

dans les directions, x et y . La matrice D dépend aussi des constantes de force entre les différents atomes ($r = \frac{k_{2AB}}{k_{1AB}}, r_{1A} = \frac{k_{1A}}{k_{1AB}}, r_{1B} = \frac{k_{1B}}{k_{1AB}}$), I est la matrice identité, elle a le même rang que la matrice D , et $|u\rangle$ le vecteur propre du système. Le $\Omega^2 = \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2$ est la fréquence normalisée donnée en fonction de la fréquence caractéristique ω_0 , définie par $\omega_0^2 = \frac{k_{1AB}}{m}$, où k_{1AB} est la constante d'interaction entre premiers voisins.

A l'aide de l'équation algébrique en ω^2 , on peut déterminer les différents modes de vibration du système qui sont caractérisés par les solutions ω_s , (avec $s=1, 2, \dots, 2N$, telles que $\omega_s \geq 0$).

Pour déterminer les pulsations propres de vibration du système, il faut calculer les valeurs propres de la matrice dynamique de l'équation (5).

Pour que ce système homogène ait des solutions non triviales, il faut que le déterminant soit nul.

$$\det[\Omega^2 I - D(Z, e^{i\phi_y}, r, r_{1A}, r_{1B})] = 0 \quad (6)$$

Cette condition dite de compatibilité du système parfait donne accès, pour chaque donnée (\vec{q}, Ω) à une équation séculaire en Z (Z est le facteur de phase suivant la direction de propagation (Ox)). Le doublet (q_x, q_y) peut être remplacé par l'écriture $(Z, e^{i\phi_y})$, le Z est appelé facteur de phase suivant Ox et $e^{i\phi_y}$ désigne l'angle d'incidence suivant Oy .

On distingue trois possibilités :

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

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

Pour $Z = 1$, les solutions correspondent à des modes propageant.

I.4. Description du système modèle étudié

Le système étudié, dans ce mémoire, consiste en un plan carré contenant deux types d'atomes A et B . Les sites atomiques sont repérés par les deux vecteurs \vec{a} et \vec{b} qui sont, respectivement, les vecteurs de base suivant les deux directions (Ox) et (Oy) de l'espace

cartésien. On peut dire que le système est composé de deux types de chaînes atomiques alternées (structure composite 2D).

Dans l'ensemble du travail, nous prendrons en considération les interactions jusqu'aux seconds voisins. Les interactions entre les deux différents types d'atomes, plus proche et second proche voisins, sont notées par k_{1AB} et k_{2AB} . Les interactions entre les plus proches voisins, pour les atomes de même type A sont notées k_{1A} et pour les atomes B sont notées k_{1B} . De plus, afin de relever l'effet de l'inertie, nous avons examiné l'impact de la variation du rapport des masses des deux sites différents ($\lambda = m_B/m_A$). La variation est prise pour deux situations $\lambda = 1$ (masses comparables) et $\lambda = 1,2$ (masses différentes).

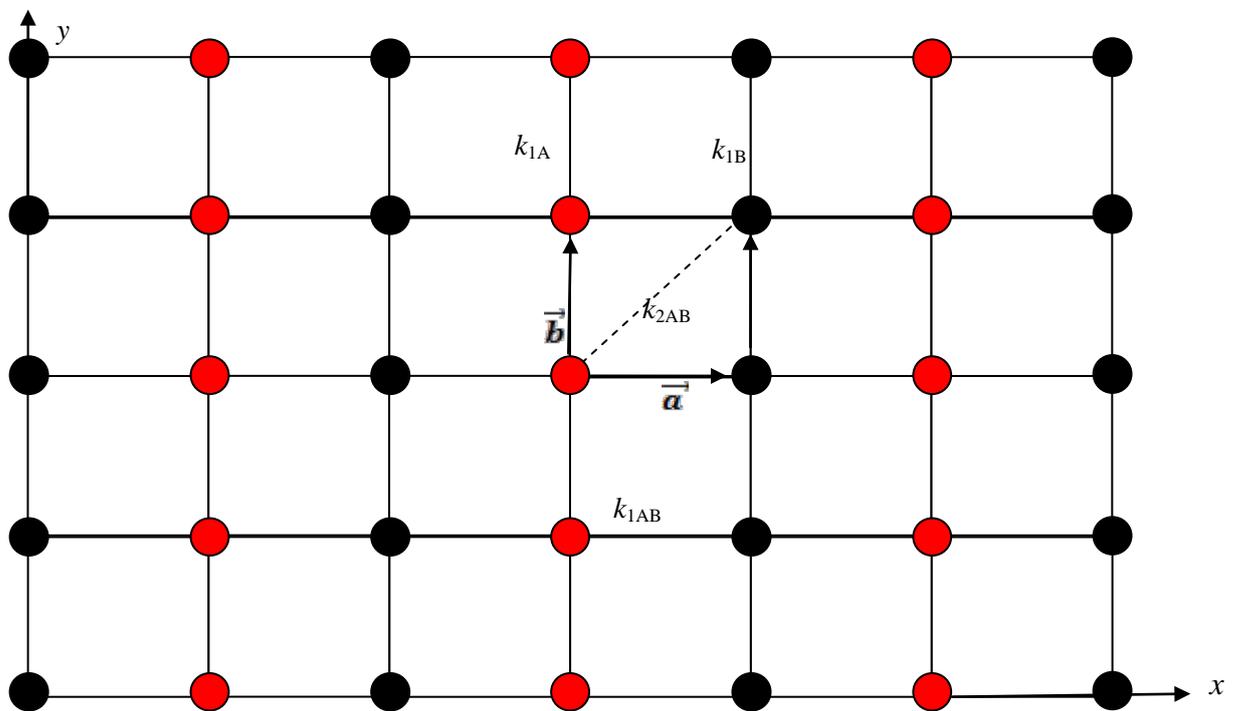


Figure 1 : Représentation schématique du système modèle étudié.

Dans ce système, en écrivant les équations du mouvement de deux sites (i,j) et $(i+1,j)$, respectivement (A et B), suivant les deux directions x et y , on aboutit à la matrice dynamique D du système parfait, qui est de dimension (4×4) .

$$D = \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & D_{13} & D_{14} \\ 0 & D_{22} & D_{23} & D_{24} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} & 0 \\ D_{41} & D_{42} & 0 & D_{44} \end{bmatrix} \quad (7)$$

Ses éléments ont les expressions suivantes :

$$D_{11} = m_A \omega^2 - 2k_{1AB} - 2k_{2AB}, D_{13} = k_{1AB}(1 + z_1^{-2}) + \frac{k_{2AB}}{2}(z_2 + z_2^{-1} + z_1^{-2}z_2 + z_1^{-2}z_2^{-1}),$$

$$D_{14} = \frac{k_{2AB}}{2}(z_2 - z_2^{-1} - z_1^{-2}z_2 + z_1^{-2}z_2^{-1}), D_{22} = m_A \omega^2 - 2k_{1A} - 2k_{2AB} + k_{1A}(z_2 + z_2^{-1}),$$

$$D_{23} = \frac{k_{2AB}}{2}(z_2 - z_2^{-1} - z_1^{-2}z_2 + z_1^{-2}z_2^{-1}), D_{24} = \frac{k_{2AB}}{2}(z_2 + z_2^{-1} + z_1^{-2}z_2 + z_1^{-2}z_2^{-1}),$$

$$D_{31} = k_{1AB}(1 + Z_1^2) + \frac{K_{2AB}}{2}(Z_2 + Z_2^{-1} + Z_1^2 Z_2 + Z_1^2 Z_2^{-1}), D_{32} = \frac{k_{2AB}}{2}(z_1^2 z_2 - z_1^2 z_2^{-1} - z_2 + z_2^{-1})$$

$$D_{33} = m_B \omega^2 - 2k_{1AB} - 2k_{2AB}, D_{41} = \frac{k_{2AB}}{2}(z_1^2 z_2 - z_1^2 z_2^{-1} - z_2 + z_2^{-1}),$$

$$D_{42} = \frac{k_{2AB}}{2}(z_2 + z_2^{-1} + z_1^2 z_2 + z_1^2 z_2^{-2}), D_{44} = m_B \omega^2 - 2k_{1B} - 2k_{2AB} + k_{1B}(z_2 + z_2^{-1}).$$

I.5. Résultats et discussion

Pour avoir les modes propres (les fréquences) de vibration, il faut diagonaliser la matrice dynamique du système (Eq. 7).

La diagonalisation de la matrice nous donne quatre valeurs propres. Ces dernières représentent les fréquences normalisées de vibration Ω_i , $i = 1, 2, 3, 4$. Ces valeurs sont exprimées en fonction de ϕ_x (on les appelle aussi modes propres de vibration).

La résolution numérique a permis de les tracer.

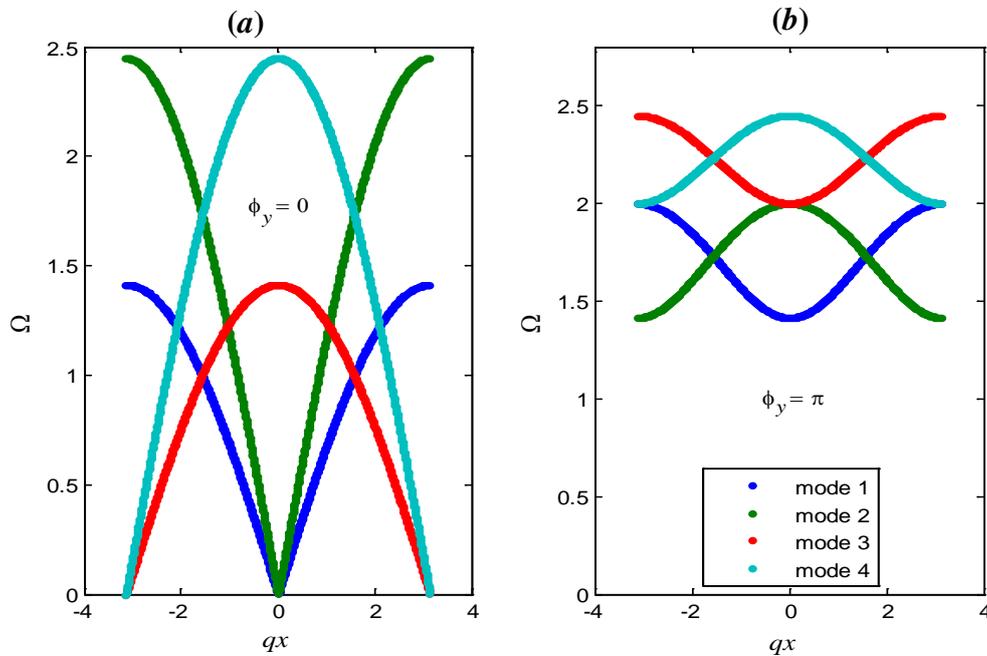


Figure 2 : Courbes de dispersion d'un système composite 2D, dans le cas où $\lambda=1$.

(a) Dans la direction d'incidence $\phi_y = 0$,

(b) Dans la direction d'incidence $\phi_y = \pi$.

Les limites des intervalles de propagation de chaque mode de vibration sont regroupées dans le tableau ci-dessous (cas de masses comparables).

Le mode Direction	Le mode 01	Le mode 02	Le mode 03	Le mode 04
$\phi_y = 0$	$\Omega_{1\min} = 0,00$ $\Omega_{1\max} = 1,41$	$\Omega_{2\min} = 0,00$ $\Omega_{2\max} = 2,45$	$\Omega_{3\min} = 1,41$ $\Omega_{3\max} = 0,00$	$\Omega_{4\min} = 2,45$ $\Omega_{4\max} = 0,00$
$\phi_y = \pi$	$\Omega_{1\min} = 1,50$ $\Omega_{1\max} = 1,73$	$\Omega_{2\min} = 2,09$ $\Omega_{2\max} = 1,90$	$\Omega_{3\min} = 2,09$ $\Omega_{3\max} = 2,23$	$\Omega_{4\min} = 2,57$ $\Omega_{4\max} = 2,45$

- On constate que les modes propres de vibration sont symétriques par rapport à l'origine (0) qui représente le centre de la zone de Brillouin.

- Les deux premiers modes (1 et 2) sont les modes de phonon du premier site atomique (A) et les modes 3 et 4 sont relatifs au site atomique B.

- Le calcul de la pente des tangentes des courbes de dispersion donne accès aux quatre vitesses de groupe de la structure composite 2D. Ces vitesses sont indispensables pour étudier la diffusion de phonons dans la structure étudiée (On ne les détermine pas dans ce travail, puisque on s'intéresse uniquement aux énergies localisées).

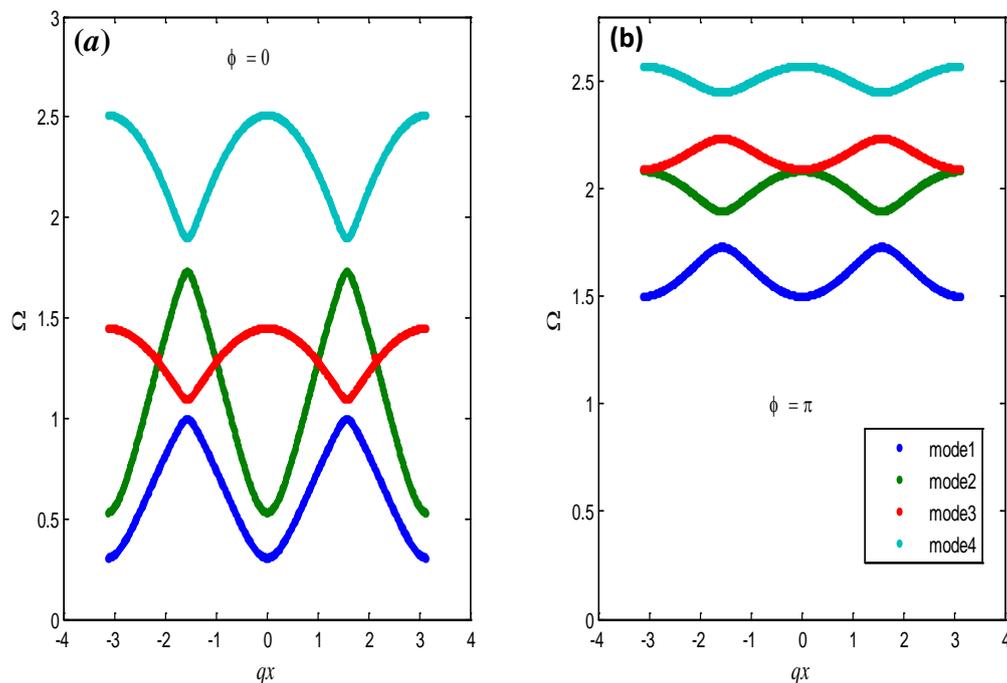


Figure 3 : Courbes de dispersion d'un système composite 2D, dans le cas où $\lambda = 1,2$,

- (a) Dans la direction d'incidence $\phi_y = 0$,
- (b) Dans la direction d'incidence $\phi_y = \pi$.

Les limites de propagation des modes propres de vibration sont les suivantes (cas où les deux masses sont différentes) :

Le mode Direction	Le mode 01	Le mode 02	Le mode 03	Le mode 04
$\phi_y = 0$	$\Omega_{1\min} = 0,30$ $\Omega_{1\max} = 1,00$	$\Omega_{2\min} = 0,53$ $\Omega_{2\max} = 1,73$	$\Omega_{3\min} = 1,10$ $\Omega_{3\max} = 1,45$	$\Omega_{4\min} = 1,90$ $\Omega_{4\max} = 2,51$
$\phi_y = \pi$	$\Omega_{1\min} = 1,50$ $\Omega_{1\max} = 1,73$	$\Omega_{2\min} = 2,09$ $\Omega_{2\max} = 1,90$	$\Omega_{3\min} = 2,09$ $\Omega_{3\max} = 2,23$	$\Omega_{4\min} = 2,45$ $\Omega_{4\max} = 2,57$

- Nous constatons que la dispersion de phonons est fortement dépendante de l'angle d'incidence des ondes élastiques dans les deux cas de λ .
- La dépendance des modes en fonction de ϕ_x (ou simplement q_x) n'est pas linéaire, ce qui veut dire que le système est dispersif.
- D'après les courbes, on observe des modes pour lesquels leurs fréquence tend vers zéro ($\Omega \rightarrow 0$), lorsque le vecteur d'onde $\phi_x = 0 \Rightarrow$ ces modes sont dits acoustiques, et dans le cas inverse les modes de vibration sont dits optiques. Et la gamme de propagation (tous les modes) définit la bande passante pour les phonons.

Pour visualiser cette bande, nous avons tracé ses limites (pour la bande passante lorsque les 4 modes de vibration sont excités) dans le système considéré. Elles sont représentées sur la figure 4.

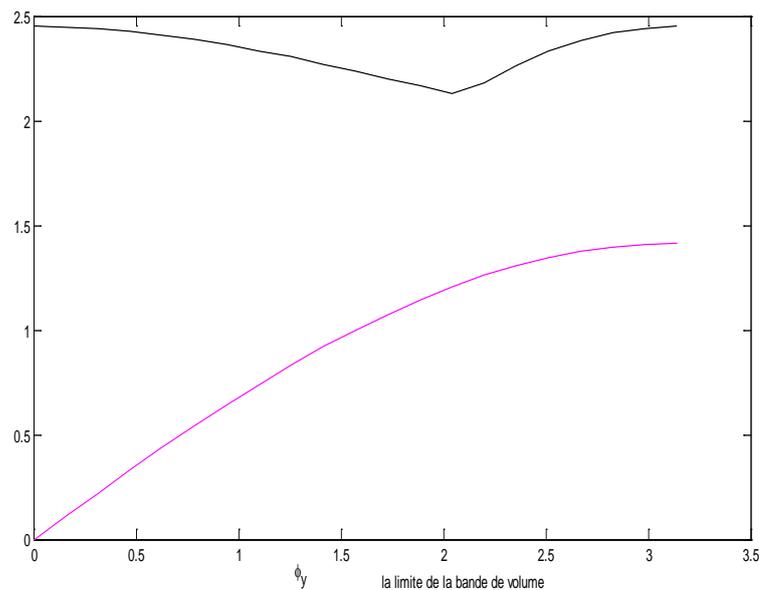


Figure 4 : Limites de la bande passante des phonons dans un système composite 2D parfait.

- Dans le cas où $\lambda = 1.2$, nous observons, sur les courbes de dispersion, l'apparition de bandes interdites nettes entre les modes de vibration (bande passante).
- Dans la bande passante, on retrouve la valeur max des modes propres de vibrations.
- La figure 4 représente les états énergétiques Ω en fonction q_x , de la structure composite parfaite 2D, (on rencontre aussi le mot en volume). Elle est constituée de deux limites, la première limite est aux basses énergies $\Omega \in [0,00 - 1.40]$, $\Omega \rightarrow 0$, contenant du fait les modes acoustiques. La deuxième limite se situe aux hautes énergies $\Omega \in [2,40 - 2,20]$, ce qui donne des valeurs de $\Omega \neq 0$, contenant ainsi les modes optiques. Les phonons se localisent à l'intérieur de ces limites.

Conclusion

Pour garantir l'existence de bandes interdites entre bandes passantes (créer un système selectif pour les phonons), il faut penser à la création de systèmes (couches) diatomique ou plus (triatomique, ...).

Chapitre II

Propriétés vibrationnelles d'une structure composite 2D avec défaut d'empilement

Introduction

Un cristal périodique parfait n'est que théorique et il n'a pas d'existence réelle, car dans la nature tout cristal est limité par des surfaces dans l'espace et son arrangement interne se trouve toujours perturbé par la présence de défauts atomiques [14]. Ces derniers sont importants parce qu'ils peuvent changer d'une façon très importante les propriétés des matériaux.

L'objectif de ce chapitre est de relever l'impact d'un défaut d'empilement sur la dynamique vibrationnelle d'une structure composite bidimensionnelle. Tout d'abord, nous rappelons les différents types de défauts qui peuvent perturber les structures atomiques parfaites. Nous décrirons, aussi la méthode employée dans ce travail, pour avoir accès aux états localisés de vibration qui sont liés aux défauts d'empilement dans les matériaux composites 2D. Bien sûr les outils mathématiques qui permettent la description du mouvement des atomes et la construction de la matrice dynamique rectangulaire sont mentionnés.

II.1. Défauts dans les cristaux

Ils sont classés suivant leur géométrie. Les grands types sont les suivants :

➤ *Défauts ponctuels*

Ce sont des défauts localisés. Ils regroupent entre autre, les lacunes, les atomes interstitiels et les atomes substitués. Ils concernent un nœud unique et ne perturbent que quelques sites voisins dans la matrice de la structure périodique. Concrètement, un défaut ponctuel typique est l'absence d'un atome (lacune), la présence d'un atome du réseau entre les atomes (défaut interstitiel), la présence d'un atome étranger entre les atomes du réseau (solution solide interstitielle) ou à la place d'un atome du réseau (solution solide de substitution).

➤ *Défauts linéaires*

Les dislocations sont des défauts linéaires, présentant une allure filiforme. Ce sont des défauts de dimension une, et résultent de la déformation du matériau sous l'effet de

contraintes de : traction, contraction, torsion, etc. Ces contraintes conduisent à des déformations plastiques. Il existe deux types de dislocations : dislocation coin et dislocations vis.

➤ *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 poly cristaux. 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.

➤ *Défauts à trois dimensions*

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

II.2. Méthodes employées pour étudier la dynamique des réseaux perturbés

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 devienne délicate et nécessite une nouvelle approche qui permet de limiter le nombre d'inconnus [15].

Par le passé, plusieurs méthodes de calculs ont été développées dans le but de remédier aux problèmes liés à l'étude de la dynamique vibrationnelle en présence de défauts. La méthode la plus utilisée est : méthode de diagonalisation directe (Slab method) [16]. Historiquement, cette méthode a été introduite par Clark en 1965, et sa première application à un système physique est réalisée par Allen, qui s'est intéressé au mode de surface d'un réseau cfc et les effets induits par une couche absorbée. Le nombre de plans utilisés pour la modélisation doit être grand pour garantir l'existence d'un volume, ce qui augmente la dimension de la matrice dynamique qui en résulte, ceci augmente, donc, le temps de calcul. Ce qui constitue l'inconvénient majeur de la méthode.

Une autre méthode a été introduite par G. Green en 1850, [17-23]. Ce fut une méthode très utilisée notamment par Neumann en 1877 pour sa théorie des potentiel Newtonien dans un espace à deux dimension, puis appliquée par Kirchhoff en 1882 pour l'équation de propagation des ondes dans un espace à 3D et en fin, par Helmholtz 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 a été introduite par Feuchtwang, en 1967, lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-fini à 3D, sous le nom de méthode de raccordement (Matching Method) [24], puis développée par Khater et Szeftel en 1987 [25]. Elle s'est imposée par la suite comme un outil incontournable dans la résolution des problèmes liés à la propagation d'ondes dans les systèmes perturbés.

II.3. Principe de la méthode de raccordement

L'exécution de cette méthode requiert la subdivision du cristal, contenant le défaut, en trois régions distinctes (voir une illustration sur la figure 5).

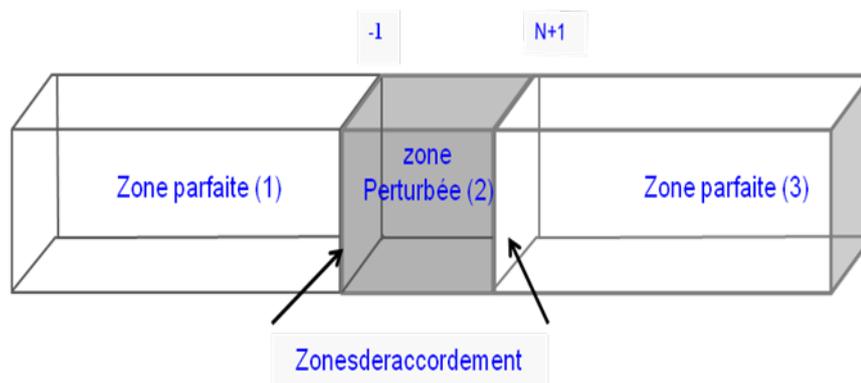


Figure 5 : Subdivision d'un cristal selon le concept de la méthode de raccordement

la figure 5, on distingue trois types de zones :

- *Zone parfaite*
C'est la région où on trouve le volume (ou bien structure parfaite), les atomes ne sont pas influencés par la présence du défaut, elle permet de tracer les courbes de dispersion en volume, elle est schématisée par les zone (1) et (3).
- *Zone de défaut (ou zone perturbée)*
C'est la région qui renferme toutes sortes de défauts. Elle est, en général, affectée par la relaxation et la reconstruction des plans atomiques, et la périodicité est perturbée dans cette zone, ce qui conduit à des propriétés différentes de celles des zones parfaites. Elle est indiquée par la zone (2).
- *Zone de raccordement*

C'est la région qui sépare les zones décrites précédemment. Elle est utilisée pour raccorder les modes propageant des zones parfaites aux modes localisés de vibration au niveau de la zone perturbée.

II.4. Dynamique du système présentant un défaut d'empilement

II.4.1. Description du système perturbé

Le système étudié consiste en réseau atomique plan de type composite bidimensionnel. L'édifice cristallin, qui est constitué d'une alternance de chaînes de séquence A et B , se trouve perturbé par un défaut d'empilement. Ce dernier défaut modifie profondément les propriétés vibrationnelles de la structure. Dans les systèmes réels, ces fautes d'empilement sont utilisées pour filtrer ou bien augmenter la propagation des ondes élastiques dans certains intervalles.

Nous prendrons en considération les interactions jusqu'aux seconds voisins. En plus des notations posées pour les interactions atomiques dans le cas de la partie parfaite, les interactions dans la zone perturbée sont notées k_{1d} et k_{2d} , respectivement, entre premiers et seconds proches voisins. L'effet de la masse est considéré aussi, en variant le rapport de masse ($\lambda = m_B/m_A$). Nous examinons les deux situations $\lambda = 1$ et $\lambda = 1,2$.

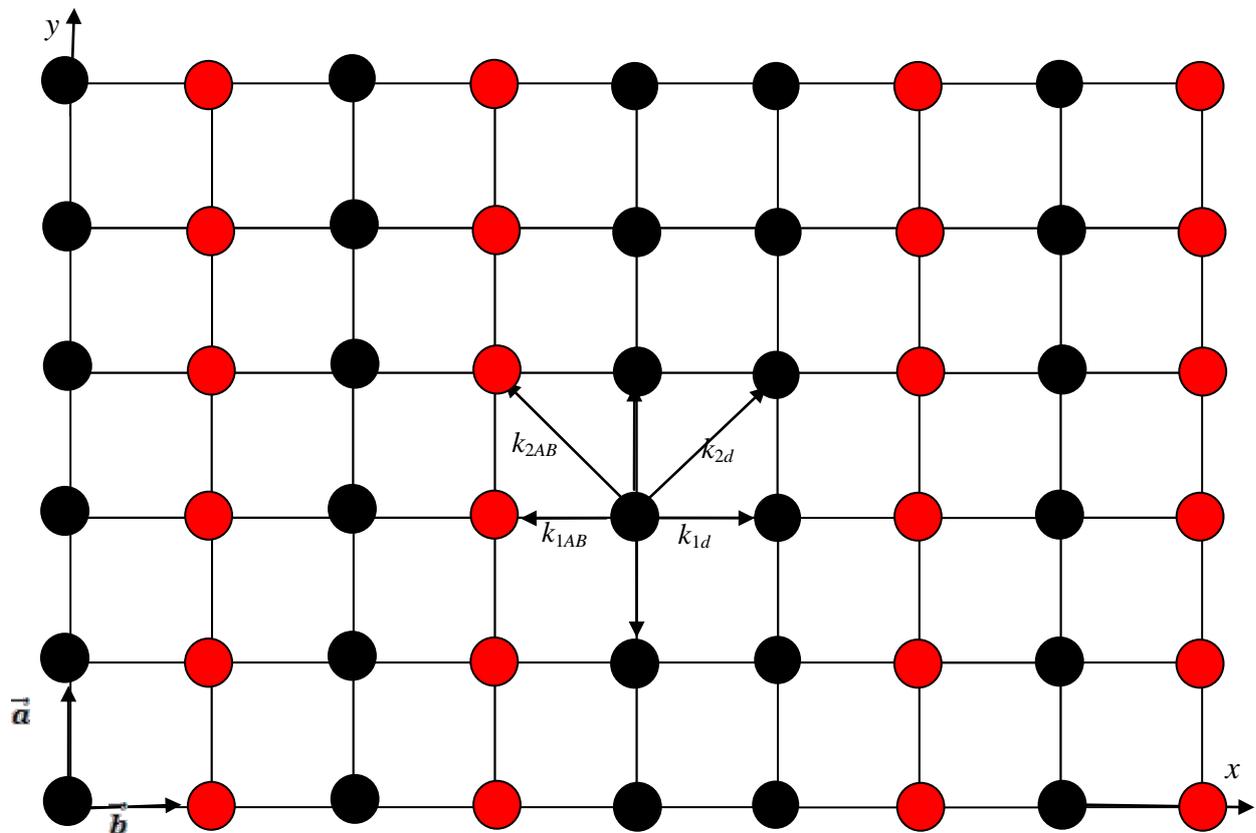


Figure 6 : Représentation schématique d'une structure en présence d'un défaut d'empilement.

II.4.2. Matrice dynamique du système perturbé

La matrice dynamique D_d du système, avec le défaut, trouve son origine dans l'écriture des équations du mouvement des atomes du système perturbé. Il faut écrire les équations des sites atomiques du défaut lui-même, ainsi que celles des sites atomiques appartenus aux frontières, qui sont les sites de la région de raccordement présentant un environnement de la région du volume.

L'ensemble de ces équations du mouvement constitue un système linéaire homogène qu'on peut mettre sous forme d'une matrice rectangulaire D_d . La taille de cette matrice dépend du nombre d'atomes de la zone perturbée, sachant bien qu'il y a deux degrés de liberté par site.

Alors, il y a plus d'inconnues que d'équations (dans le système considéré, on aura 12 équations et 20 inconnues).

Si on pose : $\dim (D_d) = (p \times q)$.

$p \equiv$ le nombre d'atomes dans la zone du défaut plus ceux de raccordement multipliés par deux degrés de liberté.

$q \equiv p +$ le nombre d'atomes qui sont reliés directement aux atomes de raccordement multipliés par deux degrés de liberté.

En résumé la matrice D_d se compose de :

$$\begin{cases} 12 \text{ Lignes} \equiv [2 \text{ sites (zone défaut)} + 4 \text{ sites (zones de raccordement)}] \times 2 \text{ ddl} = 12 \text{ équations} \\ 20 \text{ Colonnes} \equiv 12 + 4 \text{ sites (adjacents)} \times 2 \text{ ddl} = 20 \text{ inconnues.} \end{cases}$$

La matrice rectangulaire $D_d (12 \times 20)$ est appelée aussi matrice dynamique du système composite en présence du défaut d'empilement.

II.4.3. Matrice de raccordement

Si nous relient les déplacements vibrationnels des atomes appartenant au domaine de l'interface, aux champs vibrationnels des modes évanescents des deux zones parfaites, nous obtenons une matrice dite de raccordement.

Dans ce travail, il y a deux zones de raccordement (gauche et droite). Nous devons définir deux bases distinctes $\{R\}$ et $\{T\}$; la première sera utilisée pour l'étude du mouvement des atomes se trouvant à gauche de l'interface, et la deuxième base sera utilisée pour l'étude de la dynamique des atomes se trouvant à droite de la zone défaut.

Pour procéder à la construction de la matrice de raccordement, on exprimera l'ensemble des déplacements atomiques en fonction uniquement des déplacements de la zone défaut et zones de raccordement (à gauche et à droite de l'interface) ainsi que les grandeurs de raccordement dans les deux bases définies dans l'espace des phases.

Les déplacements atomiques seront exprimés comme une combinaison linéaire des vecteurs $\{R, T\}$ définissant ainsi un espace vectoriel de dimension finie. Ils sont de dimension égale au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude de la dynamique de chaque zone parfaite, située de part et d'autre du défaut d'empilement.

Dans la base $\{T\}$ (à droite de la zone défaut), les déplacements vibrationnels d'un atome sont de la forme [26-31]

$$u_{\alpha}(n_x, n_y) = \sum_{\nu=1}^2 Z_{\nu}^{n_x} A'(\alpha, \nu) T_{\nu} \quad (8)$$

Idem, dans la base $\{R\}$ (avant la zone défaut sur le schéma) :

$$u_{\alpha}(n_x, n_y) = \sum_{\nu=1}^2 Z_{\nu}^{n_x} A(\alpha, \nu) R_{\nu} \quad (9)$$

Où : R_i est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents selon le mode $\bar{\nu}$ dans la base $\{R\}$. T_{ν} est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents ν dans la base $\{T\}$. α Désigne les deux directions de l'espace (Ox) et (Oy).

Les deux coefficients A et A' représentent les poids pondérés associés aux différents modes évanescents de vibration. Ils sont déterminés à l'aide des vecteurs propres issus de l'étude de la dynamique de la zone parfaite (vecteurs propres associées aux valeurs propres lors de la diagonalisation de la matrice dynamique du système parfait figure 1).

Dans la zone de défaut, le vecteur déplacement est noté $|u\rangle$. Il est composé de deux parties : $|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix}$.

Le vecteur $|irr\rangle$ est constitué par les déplacements des sites irréductibles formant la zone de défaut, qui sont au nombre de deux (2). On en déduit $dim(|irr\rangle) = 2 \times 2 = 4$ (le nombre 2 est le degré de liberté). Quant à la deuxième partie (vecteur $|rac\rangle$), elle renferme les

déplacements des sites formant les deux zones de raccordement (à gauche et à droite) qui sont au nombre de deux. On en déduit, aussi $\dim(|rac\rangle) = 2 \times 2 = 4$.

Le raccordement des atomes se met sous la forme matricielle suivante

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & R_2 & 0 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & R_4 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [D_R] \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \quad (10)$$

Où I_d est la matrice identité dont la taille dépend du nombre d'atomes irréductibles multiplié par deux (2 degrés de liberté 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 , Z_3 et Z_4 , et des poids pondérés associés aux modes (appelés cofacteurs). Elles dépendent du nombre de modes propageants du système parfait, et sont de dimensions (4×4).

L'ensemble des sous-matrices est noté D_R , et appelée matrice de raccordement. Sa taille est de dimension ($q \times p$). Elle a une forme rectangulaire. Dans ce travail, elle est de taille : $D_R(20 \times 12)$.

La matrice de raccordement D_R est une matrice rectangulaire de dimension inverse de la matrice dynamique du système perturbé D_d .

II.4.4. Etats localisés de phonons

Le produit de la matriciel : $[D_d \cdot D_R] = S$. Elle est de forme carrée, elle définit un système d'équations homogènes.

$$[D_d(p \times q)] \cdot [D_R(q \times p)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [S(p \times p)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = 0 \quad (11)$$

Les états localisés d'énergie de vibration de la structure en présence du défaut d'empilement sont déterminés à partir de la relation de compatibilité

$$\det[S(r, r_{1d}, r_{2d}, r_{1A}, r_{1B}, e^{i\phi_y})] = 0 \quad (12)$$

Cette relation permet de calculer plusieurs grandeurs physiques intéressantes, telles que les états énergétiques localisés de vibration qui sont au voisinage du défaut ; les densités spectrales et les densités d'états de vibration associées aux différents modes de vibration.

II.5. Résultats et discussion

II.5.1. Présentation des résultats

Sur la figure 7, nous avons représenté les états localisés de vibration d'une structure composite en présence d'un défaut d'empilement (perturbation de l'ordre séquentiel). Les simulations numériques sont réalisées, en tenant compte de plusieurs paramètres, qui sont les suivants :

- Nous considérons deux cas de rapports de masse (masses comparables et masses légèrement différent) $\lambda = 1$ et $\lambda = 1,2$.

- Dans chaque situation, nous avons examiné l'effet des contraintes élastiques dans la zone défaut, ce qui permet de relever leurs empreintes sur les spectres de vibration :

i) adoucissement des contraintes ($r_{1d} = 0.8$, $r_{2d} = 0.45$),

ii) homogénéités des contraintes ($r_{1d} = 1$, $r_{2d} = 0.5$),

iii) durcissement des interactions ($r_{1d} = 1.2$, $r_{2d} = 0.55$).

Afin d'avoir une idée sur l'ordre de grandeur des états énergétiques localisés, nous avons représenté la bande de volume (en bleu).

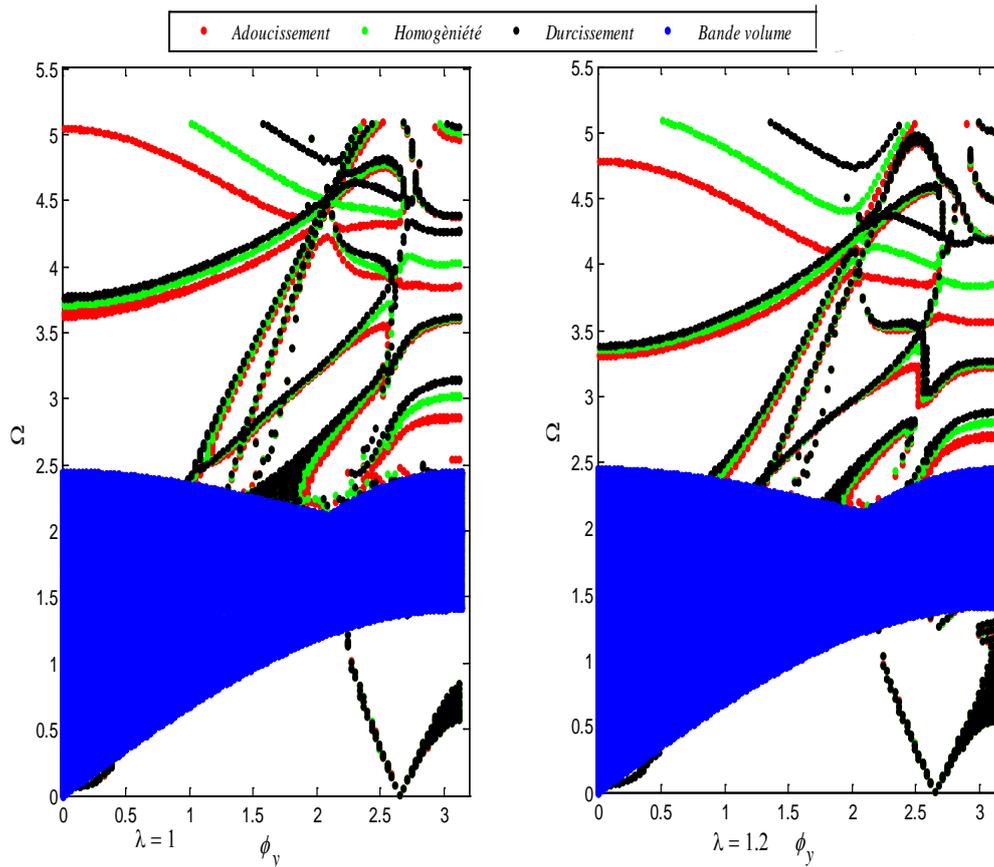


Figure 7 : Les états localisés et la bande passante des phonons du système parfait, en variant l'environnement élastiques indiqués (en légende) et ce pour les deux cas de rapport de masses : $\lambda = 1$ et $\lambda = 1,2$.

II.5.2. Discussion des résultats

Le problème de matrice rectangulaire est contourné par l'introduction de la méthode de raccordement (ce qui conduit à la réduction du nombre de variables inconnues pour en déduire un système d'équations homogène).

Nous constatons qu'une forte présence d'états localisés a été constatée pour les deux rapport de masses 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 à celles des intervalles de propagation des phonons de volume, on remarque une faible présence même pour les basses fréquences qui sont superposer l'un sur l'autre.

Par comparaison entre les courbes des états localisés de vibration, entre celle relative à $\lambda = 1$ et celle relative à $\lambda = 1,2$, nous constatons que lorsque λ augmente (autrement m_B augmente aussi) les branches relatives au défaut d'empilement deviennent moins énergétiques.

Les spectres relatifs au défaut sont insensibles aux variations des contraintes de force dans la zone perturbée lorsque le système vibre à basses fréquences, d'ailleurs tous les états localisés se superposent quand on est sous la bande de volume.

Par contre, les branches se décalent légèrement vers les hautes fréquences, lorsque les valeurs des constantes d'interaction s'adoucissent. C'est-à-dire on obtient l'inverse de la proportionnalité. Ceci s'explique par le fait que le système devient rigide et les ondes élastiques seront amorties lorsqu'elles franchissent ce défaut d'empilement.

Par conséquent, si nous voulons fabriquer matériellement un obstacle au déplacement des phonons (un filtre), il faut introduire un deuxième type d'atomes dans une matrice mère avec de fortes interactions. Et si nous cherchons un amplificateur de phonons il faut utiliser des atomes B avec de faibles interactions.

Chapitre III

Densités spectrales et densités d'états vibrationnelles

Introduction

Plusieurs propriétés physiques intéressantes sont induites par les excitations élastiques ou magnétiques, et elles sont obtenues par un calcul mathématique. Ces propriétés jouent un rôle très important dans la compréhension des différents phénomènes au voisinage de défaut.

L'objectif de ce chapitre est de calculer et tracer les densités spectrales et les densités d'états vibrationnelles locales dans un système composites contenant un défaut d'empilement.

III.1. Densité spectrale et densité d'état vibrationnelles

III.1.1. Densités spectrales vibrationnelles

La densité d'état $N(\omega)$ [32-33] quantifie le nombre d'états de vibration de fréquence ω donnée dans le cristal, tel que la quantité $N(\omega)d\omega$ soit le nombre d'états d'énergie comprise entre ω et $\omega + d\omega$ par unité de défaut. 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. Cet opérateur est obtenu à partir de la matrice dynamique du système. Il est défini par

$$G(\omega^2) = (\omega^2 I - D)^{-1} \quad (13)$$

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

$$\gamma(\omega) = \sum_n \delta(\omega - \omega_n) \quad (14)$$

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

$$\text{Sachant que } \gamma(\omega) = \frac{1}{2N} \sum \gamma_n(\omega)$$

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

$$\gamma_n(\omega) = \sum_i \langle e_n | u_n \rangle \delta(\omega - \omega_n) \quad (15)$$

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

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\varepsilon/\pi}{(\omega^2 - \omega_n^2)^2 + \varepsilon^2} = \delta(\omega^2 - \omega_n^2) \quad (16)$$

On trouve

$$\gamma_n(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \langle e_n | G(\omega) | e_n \rangle \quad (17)$$

Les valeurs propres ω_n^2 de D_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 ε à la variable ω^2 , ce qui donne

$$\gamma_n(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [\text{Im} \langle e_n | G(\omega + j\varepsilon) | e_n \rangle] \quad (18)$$

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

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{n,n'}(\Omega) = \Omega \sum_{\nu} P_{\alpha\nu}^n P_{\beta\nu}^{n'} \delta(\Omega^2 - \Omega_{\nu}^2) = 2\Omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im}[G_{\alpha\beta}^{nn'}(\Omega^2 + j\varepsilon)]) \quad (19)$$

Où n et n' représentent deux sites atomiques différents, α et β les directions cartésiennes, et $P_{\alpha\nu}^n$: la composante α du vecteur déplacement de l'atome n dans le mode Ω_{ν} .

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

$$N(\Omega) = \sum_{n,\alpha} \rho_{(\alpha,\alpha)}^{n,n'}(\Omega) = (-2\Omega/\pi) \sum_{n,\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (\text{Im}[G_{\alpha\alpha}^{nn'}(\Omega^2 + j\varepsilon)]) \quad (20)$$

III.1.2. Spectres des densités d'états vibrationnelles

Les densités d'états vibrationnelles locales (LDOS) sont, particulièrement très importantes et utiles, du fait qu'elles sont une signature caractéristique locale pour les interfaces. En effet, elles permettent de calculer de toutes les quantités thermodynamiques pour ces systèmes d'intérêt à partir de la fonction de partition, dans l'approximation harmonique, de la dynamique du réseau. La quantité principale d'intérêt à cet égard est la contribution vibrationnelle à l'énergie libre, ce qui est donné par la définition standard $F = U - TS$, où U est l'énergie interne, S l'entropie du système, et T la température absolue.

Les densités d'états vibrationnelles locales (LDOS) sont calculées numériquement par site atomique, en utilisant le formalisme des fonctions de Green.

Les LDOS sont données en fonction de la fréquence normalisée Ω dans la première zone de Brillouin.

III.2. Résultats et discussion

L'évolution des courbes des densités spectrales suivant les deux directions de l'espace (Ox) et (Oy), sont représentées sur la figure suivante, pour les deux atomes A et B .

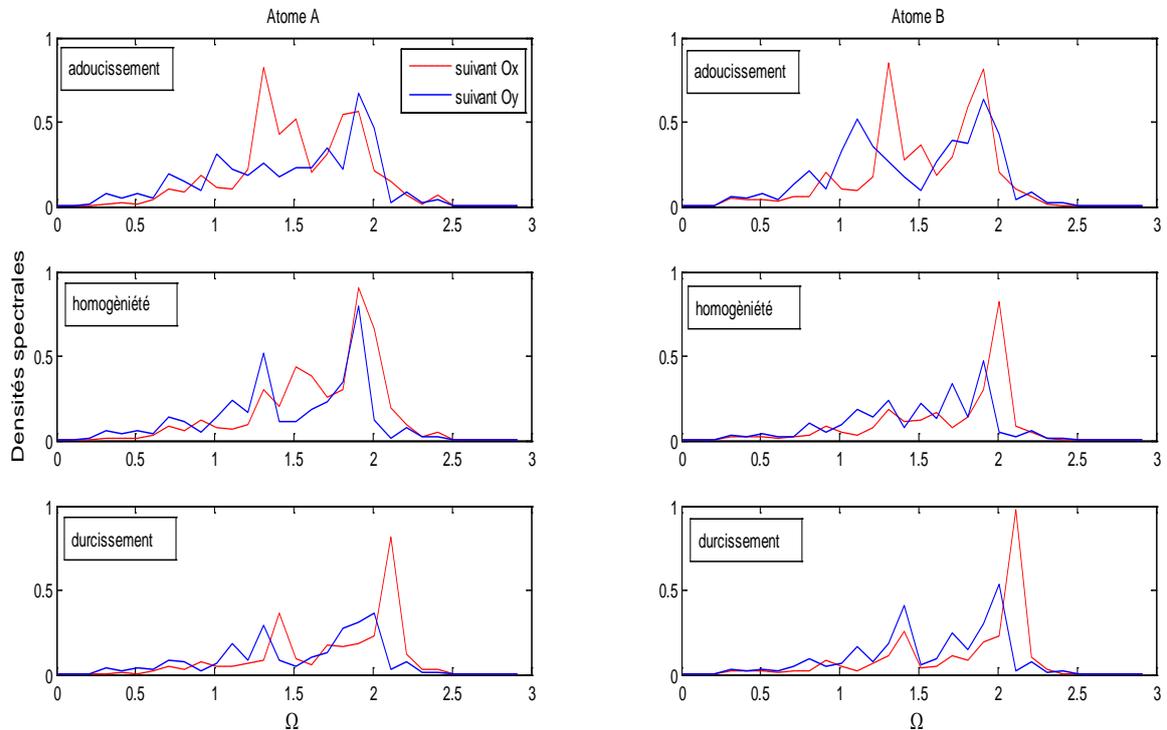


Figure 8 : Densités spectrales vibrationnelles des sites atomiques A et B , pour $\lambda = 1,2$.

Les courbes des densités d'états correspondantes sont représentées sur la figure 9, pour les deux atomes A et B .

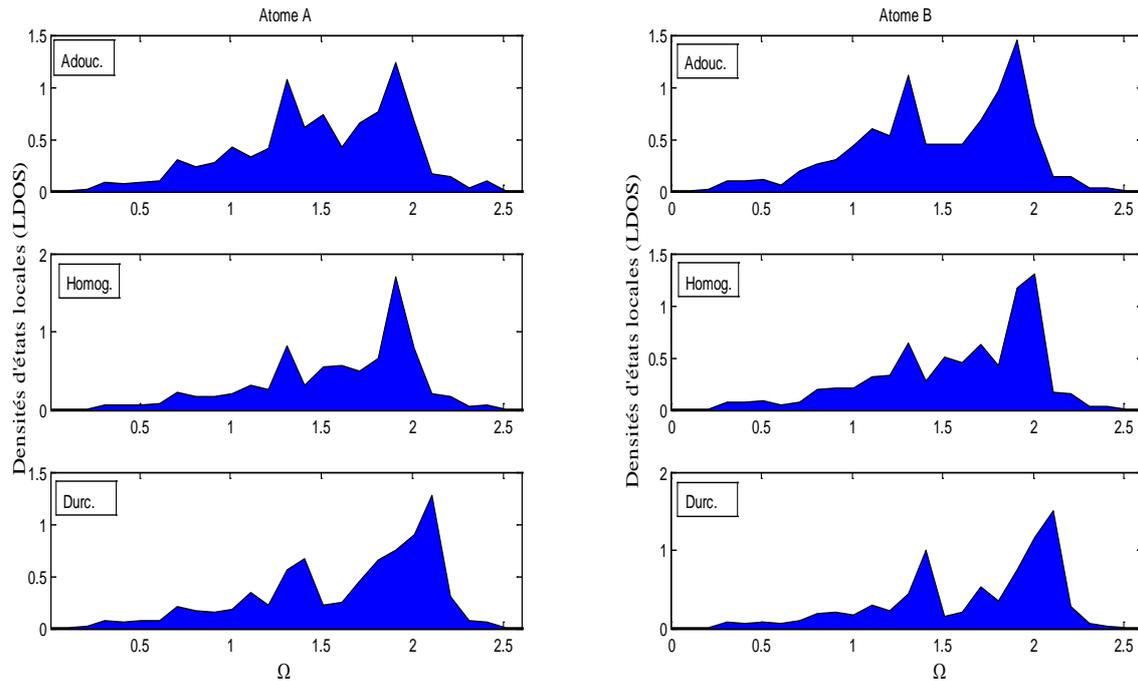


Figure 9 : Courbes des densités d'états vibrationnelles des atomes *A* et *B*, pour $\lambda = 1,2$.

L'évolution des densités spectrales /d'états, des sites atomiques *A* et *B*, est exprimée en unités arbitraires. Les spectres des densités spectrales sont représentés sur la Fig. 8. Et ceux des densités d'états sont représentés sur la Fig. 9.

Nous constatons que, pour chaque spectre, il y a une variété de pics, ayant des amplitudes, des largeurs dépendantes des paramètres du système (masse, constante de force et la fréquence Ω) et de la position des atomes par rapport à la zone de défaut.

Notons aussi que, les densités spectrales s'étalent sur un intervalle de fréquence $[0.00, 2.50]$, qui correspond à la plage de l'intervalle de propagation du continuum et ceci pour les deux sites atomiques *A* et *B*.

Les positions où les pics ont des hauteurs importantes (telles que 0.82 et 0,36, ...) correspondent aux fréquences où il y a une interaction entre un mode propageant et mode localisés, ou des interférences entre les ondes incidentes et les ondes réfléchies qui n'ont pas pu franchir le défaut.

Les densités spectrales et les densités d'états se décalent légèrement vers les basses fréquences avec le durcissement des constantes de force dans la zone défaut.

Conclusion générale

Actuellement, on a enregistré de multiples applications dans divers domaines en relation directe avec notre quotidien ; nous citons entre autre, les télécommunications, la santé, l'aéronautique, etc. Ces matériaux avec leur fiabilité ont contribué à l'amélioration et l'augmentation des performances des appareils. Il est primordial de connaître leurs propriétés vibrationnelles pour avoir une idée précise sur les conditions et les limites d'utilisation. Les matériaux composites sont de plus en plus utilisés dans l'industrie moderne. Leurs propriétés exceptionnelles ont contribué à les rendre comme l'une des branches les plus prometteuses de la recherche scientifique. Avant de passer à la phase expérimentale, plusieurs approches analytiques se sont développées. Elles sont basées sur des simulations numériques permettant le traitement des phénomènes de localisation des ondes vibrationnelles dans ce type de matériaux.

Dans ce mémoire, notre contribution est menée en utilisant la méthode dite de raccordement appliquée par plusieurs auteurs ces dernières années.

En se basant sur la dynamique du réseau, nous avons décrit le mouvement de vibration des atomes d'un système donné par un nombre fini d'équations, et nous avons déduit sa matrice dynamique rectangulaire. La technique de raccordement a permis de transformer le système matriciel rectangulaire vers une matrice carrée. Cette dernière donne accès aux modes vibrationnels localisés, à partir des outils mathématiques simples (valeurs et des vecteurs propres, espace vectoriel, ...). Elle permet aussi de calculer et représenter les densités spectrales et les densités d'états phononiques locales associées. Notre étude a montré que la présence du défaut d'empilement dans la structure composite 2D influe considérablement sur les propriétés vibrationnelles des systèmes. En effet, le défaut atomique crée toujours de nouveaux états localisés (supplémentaires) dans son voisinage. Ces derniers ne sont pas présents dans les spectres du système parfait. Notons aussi que le nombre de branches qui apparaissent et les spectres des densités spectrales et d'états vibrationnelles dépendent fortement des masses des atomes composant le composé et des constants élastiques qui relient les différents sites.

La maîtrise parfaite des propriétés des systèmes en présence d'un défaut va contribuer à la fabrication et la production de matériaux composites de caractéristiques contrôlées (propriétés améliorées), ils peuvent être : multifonctionnels, avec leur cycle de vie augmenté, moins coûteux, plus légers et plus fiables par la réalisation de revêtements atomiques par exemple.

Références

- [1] L. Cornet, Généralité sur les matériaux composites. Engineering School. (2008).
Site <https://cel.archives-ouvertes.fr/cel-00470296v1>
- [2] R. Heid and K. P. Bohnen, Phys. Rep. 387, 151 (2003).
- [3] G. Belkacemi, Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2015).
- [4] M. Born and T. von Karman, Z. Physik 13, 297 (1912).
- [5] G. Belkacemi and B. Bourahla, Inter. J. Modern Physics B 31, 1750155 (2017).
- [6] N. Agait, A. L. Yeyati and J. M. Van Ruitenbeek, Phys. Rep 377, 81 (2003).
- [7] M. H. Mohamed, L. L. Kesmodel and B. M. Hall, Phys. Rev. B 38, 5856 (1988).
- [8] G. Weiming, P. Yong, Z. Kunhua and G. Junme, Rare Metal Mat. Engin. 39, 45 (2010).
- [9] R. Chadli. Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2012).
- [10] B. Bourahla, Thèse de doctorat, université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2007).
- [11] J. Behari and B. B. Tripathi. J. Phys C. 3, 659 (1969).
- [12] G. Belkacemi and B. Bourahla, Superlat. Microstruct. 85, 226 (2015).
- [13] V. Pelosin, J. Hillairet and B. Rodmac, J. Phys: Condensed Matter 6, 1099 (1994).
- [14] F. Lekadir. Thèse de doctorat, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou (2017).
- [15] G. I. Stegemann and F. Nizolli, *Surface Excitation*, edited by V. M. Agronovich and R. London, Amsterdam: North Holland (1984).
- [16] R. E. Allen, G. P. Allderdge and F. W. de Wette, Phys. Rev 4, 1682 (1971).
- [17] I. M. Lifshitz and L. N. Rosenzweig, Zh. Ekperim. I. Thoer. Fiz, 18, 1012 (1948).
- [18] M. Lifshitz, Nuovo Cimento Suppl. 3, 732 (1956).
- [19] A. A Maradudin and J. Melangallis, Phys. Rev. A 133, 1118 (1967).
- [20] L. Dobrzynski, Surf. Sci Reports 6, 119 (1986).
- [21] G. Armand, Phys. Rev. B 14, 2218 (1976).
- [22] R. A. Allen, Surf. Sci 76, 91 (1978).
- [23] P. Knipp, Phys. Rev. 40, 7993 (1989).
- [24] T. E. Fewuchtwang, Pyhs. Rev. 155, 715 (1967).
- [25] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater and R. Tigrine, Technische Mechanik, 32, 113 (2012).
- [26] F. Gagel and Maschke, Phys. Rev. B 52, 2013 (1995).
- [27] R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil and M. Belhadi, Mod. Phys. Lett. B 19, 625 (2005).
- [28] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlouvvet and A. Khater, Phys. Rev. B 55, 1707 (1997)
- [29] M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy and K. Maschke, Eur. Phys. J. B 15, 435 (2000).
- [30] M. Belhadi, A. Khater and K. Maschke, Surf. Rev. Lett. 11, 87 (2004).
- [31] Y. Pennec and A. Khater, Surf. Sci. Lett 348, 82 (1995).
- [32] R. Xu, H. Hong, P. Zschack and T. C. Chiang, Phys. Rev. Lett. 101, 085504 (2008).
- [33] E. J. Garboczi and M. F. Thorpe, Phy. Rev. B. 32, 4513 (1985).

Résumé

Un matériau composite est constitué d'assemblage de deux matériaux ou plus de nature différente. L'un de ces matériaux est dit matrice, les autres sont appelés renforts. La combinaison entre ces derniers permet d'avoir un matériau hétérogène avec des performances supérieures à celles des composants pris séparément. Leurs propriétés exceptionnelles ont contribué à les rendre comme l'une des branches les plus prometteuses de la recherche scientifique. Ils apportent de nombreux avantages fonctionnels : légèreté, grande résistance à la fatigue, liberté des formes, ...

La connaissance de leurs propriétés vibrationnelles est très importante avant toute utilisation industrielle. De plus, la présence du défaut d'empilement dans les structures composites 2D influe considérablement sur les propriétés vibrationnelles des systèmes. En effet, le défaut atomique crée toujours de nouveaux états localisés (supplémentaires) dans son voisinage. Ces derniers ne sont pas présents dans les spectres du système parfait. Notons aussi que le nombre de branches qui apparaissent et les spectres des densités spectrales et d'états vibrationnelles dépendent fortement des masses des atomes composant le composé et des constants élastiques qui relient les différents sites.

Mots clés: vibration, défaut d'empilement, matériaux composites, densités spectrales, densités d'états vibrationnelles

Abstract

A composite material consists of assembling two or more materials of different nature. One of these materials is named matrix, the others are reinforcements. The combination of these allows obtaining a heterogeneous material with higher performance than the components taken separately. They bring many functional advantages: lightness, great resistance to fatigue, freedom of shapes, ...

The knowledge of the vibrational properties of these materials is very important before all using the manufactory domain. In addition, the presence of the stacking defect in the 2D composite structure has a considerable influence on the vibrational properties of the systems. Indeed, the atomic defect always creates new (additional) localized states in its neighborhood. These are not present in the spectra of the perfect system. It should also be noted that the number of branches that appear and the spectra of spectral densities a vibrational state strongly depend on the masses of the atoms that make up the compound and the elastic constants that connect the different sites.

Keywords: Vibrational, stacking defect, composite material, spectral densities, vibrational state

