

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE
DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DE BOUIRA



FACULTE DES SCIENCES ET SCIENCES
APPLIQUEES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Mémoire pour l'obtention du diplôme de Master EN PHYSIQUE

OPTION :

Physique des Matériaux et Nanomatériaux

Thème

*Propagation d'ondes élastiques dans les
systèmes de basses dimensions*

Présenté par :

Mr : Chabane Chaouche Hamid

Mme : Haddad Randa

Soutenu le 23/09/2017

Devant le jury :

Président : Mr ZERIRGUI DJAMEL MCB Université de Bouira

Rapporteur : Mme BOUCHERRAB MALIKA MCB Université de Bouira

Examineurs : Mr. ZITOUNE HACHEMI MAA Université de Bouira

Mr. KHEFFACHE SEDIK MAA Université de Bouira

ANNEE UNIVERSITAIRE 2016/2017

REMERCIEMENTS ET DÉDICACES

SI ELLE EXISTE UNE PERSONNE À LA QUELLE NOUS POUVONS EXPRIMER TOUTE NOTRE GRATITUDE LA PLUS PROFONDE, C'EST BIEN QUE : NOTRE PROMOTRICE DR BOUCHERRAB MALIKA, POUR TOUTE SA DISPONIBILITÉ ET SA PATIENCE.

NOUS REMERCIONS ÉGALEMENT DR ZERRIRGUI DJAMEL [UNIVERSITÉ DE BOUIRA] D'AVOIR ACCEPTER DE PRÉSIDER LE JURY.

NOUS TENONS À EXPRIMER AU DR H. ZITOUNE ET DR S. KHEFACHE TOUTE NOTRE RECONNAISSANCE POUR L'HONNEUR QU'ILS NOUS ONT FAIT D'ACCEPTÉ DE FAIRE PARTIE DU JURY.

JE DÉDIE CE MODESTE TRAVAIL À MES ENFANTS HAKIM, IDRIS ET SOUDJOURD, [H, CHABANE CHAOUHE].

JE DÉDIE CE MODESTE TRAVAIL À TOUTE MA FAMILLE SURTOUT MES CHERS PARENTS, SANS OUBLIÉE MA PETITE FAMILLE [MON MARI ET MON PETIT CHOUCHOU : HANI] [MME [HADDAD RANDA].

TABLE DE MATIERE

Introduction générale.....	3
Chapitre I : Dynamique des réseaux	
I.1 Introduction à la dynamique des réseaux	6
I-2 Dynamique vibrationnelle des solides ordonnés.....	6
I-3 Méthodes théoriques employées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle.....	8
I.3.1. La méthode de diagonalisation directe (ou slab method).....	8
I.3.2. Méthode des fonctions de Green.....	9
I.3.3 La méthode de raccordement	10
I.4. Principe de la méthode	10
I.5. Formulation du problème.....	11
I.6. Etude de la diffusion.....	12
I.7. Calcul de la conductance phononique.....	13
Chapitre II : Dynamique vibrationnelle des systèmes parfaits de types C.S	
II.1 Introduction.....	14
II.2 Dynamique vibrationnelle de guide d'ondes parfait.....	14
II.2.1 Description de système modèle.....	14
II.3. Les équations du mouvement	15
II.4.Courbe de dispersion.....	17
II.4.1.Discussion de la courbe de dispersion.....	17
II.5. La vitesse de groupe.....	18
Chapitre III : Diffusion via une interface séparatrice de deux systèmes CS	
III.1. Introduction.....	22
III.2. Matrice dynamique du système Matrice de raccordement.....	22
III.3. Courbes des spectres de vibration	24
III.4.Diffusion d'ondes élastiques par une interface	25
III.4.1.Interface de type A/couche B/A	25

III.4.1.1.Courbes des spectres de vibration	26
III-4.1.2.Discussion des résultats.....	32
III-4.2.Interface de type A/couche 2B/A.....	34
III-4-2. 1. Courbes des spectres de vibration.....	35
III-4.2.2 .Discussion des résultats.....	41
III-4.3.Interface de type A/couche 3B/A.....	42
III-4-3.1. Courbes des spectres de vibration.....	43
III-4.3.2 .Discussion des résultats.....	49
Conclusion générale.....	51

I.1 Introduction a la dynamique des réseaux

Les atomes, dans un solide cristallin, sont placés d'une manière très ordonnée, ce sont les forces interatomiques qui leurs confèrent leur arrangement spécifique. Ces forces jouent les mêmes rôles que les ressorts dans un système "masse- ressort". Par conséquent, si on déplace légèrement un atome de sa position initiale et qu'on le relâche, il se mettra à osciller, comme un pendule. Etant donné que cet atome est relié aux autres par les forces électrostatiques qui agissent entre eux, les autres atomes du cristal se mettront eux aussi à vibrer, d'où le nom de vibration cristalline ; il y aura alors propagation d'une onde de déformation dans un solide appelée onde vibrationnelle.

L'étude des différents modes de propagation de ces ondes est un sujet complexe qui fait partie de la "physique de l'état solide". Certains de ces modes sont directement reliés à la propagation du son dans un solide.

Les atomes d'un cristal ne sont pas fixes. Sous l'effet de la température ou d'une excitation électromagnétique, ils oscillent par rapport à une position d'équilibre (stable). Si un noyau se déplace, il en résulte une modification du nuage électronique qui est due à un effet d'écran (force de rappel de la part des atomes voisins pour le ramener à cette position).

Si les amplitudes d'oscillations sont faibles, on dit qu'elles sont harmoniques c'est-à-dire que les forces sont proportionnelles aux déplacements (loi de Hooke), [4].

I. 2. Dynamique vibrationnelle des solides ordonnés

Dans cette partie, nous allons présenter quelques notions de base de la dynamique de vibration dans les solides cristallins ordonnés.

Considérons une cellule de N atomes appartenant à un solide infini à laquelle nous appliquons les conditions aux limites périodiques de Born et Von Karman [5]. Le solide peut alors être considéré comme une succession infinie de cellules contenant N atomes soient \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} trois vecteurs formant une base, la position d'équilibre $\vec{X}(l)$ de la cellule élémentaire s'écrit alors :

$$\vec{X}(l) = l_1 \vec{a} + l_2 \vec{b} + l_3 \vec{c} \quad (1.1)$$

$$\text{Où } l_i = (l_1, l_2, l_3) \text{ et } l_i \in \mathbb{Z}$$

Sous l'action des fluctuations thermiques, les atomes ne restent pas sur une position fixe, nous désignerons par $\vec{u}(l, t)$ les déplacements induits par l'agitation thermique de l'atome par rapport à sa position d'équilibre et t décrivant sa dépendance en temps.

Dans le cadre de l'approximation harmonique [6-7] associée au modèle des forces centrales, l'équation du mouvement d'un atome occupant le site (l) et ayant une fréquence de vibration ω , est donnée par l'expression suivante :

$$m(l)\Omega^2 u_\alpha(l, \omega) = \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} K(l, l') [u_\beta(l', \omega) - u_\beta(l, \omega)] \quad (1.2)$$

Où α, β représentent les différentes directions de l'espace, $m(l)$ la masse de l'atome du site (l), $u_\alpha(l, m, n)$ le déplacement suivant α , r_α est la composante du vecteur position relative entre les sites (l) et (l'), r^2 représente la distance séparant (l) et (l'), tandis que $k(l, l')$ est la constante de force de liaison entre les atome occupant ces sites.

L'équation (1.2) peut être écrite pour les N atomes contenus dans la cellule élémentaire et selon les trois directions cartésiennes. Nous sommes alors en présence d'un système de $3N$ équations de mouvement.

Le modèle du cristal illimité qui peut être construit en répétant périodiquement dans l'espace de Bloch des N atomes du cristal fini de même structure, présente l'avantage de la symétrie de translation qui, avec les conditions aux limites périodiques, permet de réduire le champ des déplacements du système. En effet, grâce à la périodicité spatiale de l'environnement atomique des deux atomes l et l' occupant deux sites équivalent du réseau, doivent effectuer à une phase près les mêmes mouvements vibratoires. Ainsi, leurs amplitudes vibratoires vérifient à tout instant t la relation suivante :

$$\vec{U}(l', \Omega) = \vec{U}(l, \Omega) \exp(i \vec{q} \vec{r}(l, l')) \quad (1.3)$$

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

La relation (1.3) permet de réduire le système d'équations (1.2) à un système de $3N$ équations homogènes à $3N$ inconnues.

Les systèmes établis à partir des équations du type (1.2) peuvent alors s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$(\Omega^2 I - D(\vec{q})) | u \rangle = | 0 \rangle \quad (1.4)$$

$D(q)$ est la matrice dynamique ($3N \times 3N$) pour chaque vecteur d'onde \vec{q} , dont les éléments dépendent généralement des constantes de force entre les différents atomes. I est la matrice identité au même rang que la matrice D , et $| u \rangle$ le vecteur propre du déplacement. Pour que le système (1.4) ait des solutions non triviales en Ω^2 , il faut que :

$$\text{Det} (\Omega^2 I - D(\vec{q})) = 0 \quad (1.5)$$

Ainsi grâce à la résolution de système (1.4) on peut déterminer pour chaque vecteur d'onde \vec{q} de la première zone de Brillouin, les différents modes de vibrations dans le système en question, ces modes sont définis par l'ensemble des solutions, telles que $\Omega_s \geq 0$, avec $s = 1, 2, \dots, 3N$.

I-3. Méthodes théoriques employées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle

L'étude de la dynamique vibrationnelle des solides semi finis date depuis longtemps. Puisque initialement elle était relative à la propagation des ondes sismiques à la surface de la terre. Aujourd'hui, l'étude des vibrations fournit un moyen efficace pour relever les propriétés des surfaces et des interfaces entre les matériaux.

Vue la brisure de symétrie dans les matériaux, l'application de théorème de Born et Von Karman n'est pas valable parce que l'absence de symétrie de translation suivant la direction normale au défaut ne permet pas l'application du théorème de Bloch dans cette direction.

Autrement dit, la brisure de symétrie suivant une direction rend difficile la résolution des systèmes d'équations des mouvements vibratoires d'un solide semi-fini. D'où la nécessité d'utiliser de nouvelles méthodes de calcul qui permettent de limiter dans une approximation valable le nombre d'équations et d'inconnus au niveau du défaut[8].

Nous citons comme exemple la méthode de diagonalisation directe appelée aussi Slab méthode, la méthode des fonctions de Green et la méthode de raccordement. C'est sur cette dernière que s'appuiera notre modélisation pour l'étude de la diffusion d'ondes élastiques par des défauts dans des guides d'ondes cristallographiques de basses dimensions. Notons que les méthodes citées ci-dessus sont souvent associées aux fonctions de Green.

I.3.1. La méthode de diagonalisation directe (Slab method)

Cette méthode a été introduite dans sa formulation générale en 1965 par Clark. Elle a été appliquée ensuite à un système physique par Allen et Alldredge, qui se sont particulièrement intéressés aux modes de surfaces d'un réseau cubique à face centrées et aux effets induits par une couche absorbée [9].

Durant les vingt dernières années, cette méthode est apparue comme pratique et puissante pour l'étude des propriétés vibrationnelles et magnétiques, aussi bien pour des surfaces que pour des surfaces vicinales [10]. Le principe de la méthode consiste à limiter les systèmes de surface étudiés, à un nombre fini de plans atomiques de structure périodique dans une direction donnée (direction Oz par exemple) avec une extension infinie dans les deux autres directions Ox et Oy.

En outre le nombre de plans utilisés pour la modélisation doit être suffisamment grand afin de garantir l'existence d'une région dite de volume au centre du système. Il reste alors à écrire les équations de mouvements des atomes appartenant à une cellule unitaire pour en déduire la matrice dynamique.

L'inconvénient de cette méthode réside dans la taille de la matrice dynamique qui nécessite un travail ardu pour sa résolution et augmente le temps de calcul lors des simulations numériques.

I.3.2. Méthode des fonctions de Green

On appelle fonction de Green en physique la solution élémentaire d'une équation aux dérivés partielles linéaires à coefficients constants. Elle a été introduite par George Green [11] en 1850. Elle est l'outil mathématique qui a permis à la physique de faire un grand pas dans l'étude dynamique des systèmes réels, avec quelques variantes dans le formalisme mathématique. Elle a été appliquée pour la première fois à la physique de l'état de solide par Slater [12]. Cette méthode consiste à créer un réseau semi infini à partir d'un réseau illimité en annulant les interactions entre les atomes situés de part et d'autre d'un plan bissecteur de deux plans atomiques consécutifs.

L'effet de cette modification sur la dynamique vibrationnelle du système est considéré comme une perturbation qui transforme la matrice dynamique D du système illimité en une matrice D_p qui s'écrit sous la forme :

$$D_p = D + P \quad (1.6)$$

Où P représente la matrice de perturbation.

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

$$G(\omega^2) = [\omega^2 I - D]^{-1} \quad (1.7)$$

Où I est la matrice identité. Son équivalent $G_p(\omega^2)$ pour le système perturbé s'écrit :

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

D'où la relation matricielle :

$$G_p(\omega^2) = [I - G(\omega^2) P]^{-1} G(\omega^2) \quad (1.8)$$

L'ensemble des états vibrationnels du système perturbé est alors donné par les pôles de la fonction $G_p(\omega^2)$. Ils permettent, en général, d'interpréter les changements causés par le défaut sur les spectres de vibration.

I.3.3 la méthode de raccordement

Cette méthode a été introduite pour la première fois par Feuchlwang en 1967, lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi infini à trois dimensions [10]. Elle a été reprise en 1987 par Khater et Szeftel dans deux articles, le premier étant un développement du formalisme mathématique utilisé et le second une application aux surfaces Ni(100) [13]. Depuis, la méthode de raccordement est appliquée dans plusieurs études, citons par exemple, l'étude de la dynamique des phonons et des magnons d'un certain nombre de systèmes physiques [14]. Le formalisme général décrivant le principe de la méthode est donné dans le paragraphe suivant :

I.4. Principe de la méthode

La méthode de raccordement est une méthode analytique dont le but est de déterminer les grandeurs physiques caractérisant les systèmes désordonnés. L'application de cette méthode permet d'enchaîner des relations analytiques entre les mouvements atomiques d'un système semi fini par un nombre fini d'équations en partageant le système considéré en trois régions, comme illustré sur la figure 1.1.

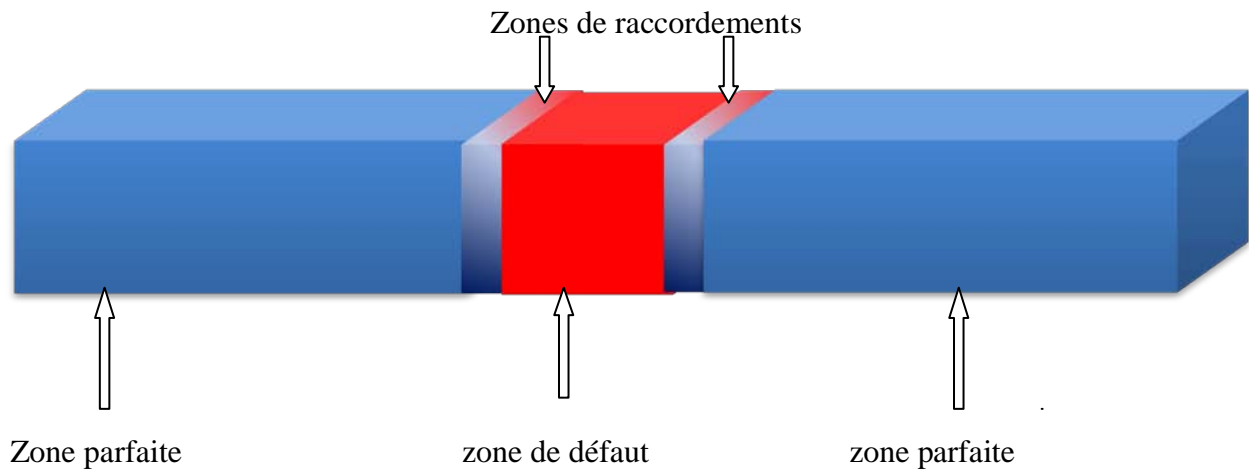


Fig.1.1 : Représentation schématique d'un solide en présence d'un défaut.

Selon le concept de la méthode, les différents compartiments à étudier sont :

- **La région parfaite** : ce sont les régions à droite et à gauche, chacune est caractérisée par sa périodicité, elle se trouve hors de tous les effets de défauts et nous permet de tracer les courbes de dispersion en volume, caractérisées par : $L > L_V$ où L_V représente la troisième coordonnée de l'atome associé au premier plan définissant la région de volume.
- **La région du défaut (perturbée)** : c'est la région qui renferme tous les types de nanostructures, de défauts. Dans cette région on peut considérer la relaxation et la

reconstruction des plans atomiques ; ce qui lui confère des paramètres structuraux spécifiques. Par conséquent, la périodicité est perturbée.

- **La région de raccordement** : elle est composée des atomes situés entre les régions parfaites et les atomes de la zone perturbée. Elle permet dans la modélisation théorique de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut aux états de vibration évanescents de la zone parfaite

I.5. Formulation du problème

La brisure de la symétrie de translation induite par la présence d'une surface entraîne dans certains cas l'apparition de nouvelles solutions dans la direction perpendiculaire à cette surface. La relation pour les amplitudes de vibration des atomes dans la direction cartésienne α , entre d'une part un atome l appartenant à un plan p et d'autre part, un atome l' appartenant à un plan p' tous deux parallèles au plan de la surface mais se trouvant dans la région de volume, vérifient la relation suivante :

$$u_{\alpha}(l', p', \omega) = u_{\alpha}(l, p, \omega) z^{(p'-p)} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}}(l', l) \quad (1.9)$$

Ici le z est un facteur de phase, évalué dans la direction normale à la surface tel que $|z|=1$, $q \rightarrow$ un vecteur d'onde dans la première zone de Brillouin, α caractérise une des trois directions Ox, Oy, Oz.

En insérant l'équation (1.9) dans l'équation du mouvement (1.2) on obtient l'équation suivante :

$$\omega^2 m(l) u_{\alpha}(l, \omega) + \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} k(l, l') u_{\beta}(l, \omega) [z^{(p'-p)} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}}(l', l) - 1] = 0 \quad (1.10)$$

Ou bien sous la forme matricielle suivante : $(\omega^2 I - D(\vec{q}, z))|u\rangle$.

La condition de compatibilité de ce système donne accès pour chaque donnée (\vec{q}, ω) à une équation séculaire en z dont les solutions caractérisent les différents modes en volume suivant la direction normale au défaut.

Les solutions telles que $|z|=1$ sont des modes propageantes et celles vérifiant $|z| < 1$ correspondent à des modes évanescents depuis le défaut vers le volume.

Afin de déterminer les des états localisés d'une surface plane sans défaut d'un réseau semi-infini, on commence dans un premier temps par le calcul de ces modes évanescents dans tout le domaine (\vec{q}, ω) , puis ; nous déterminons les équations de mouvement (1.2) pour les sites représentatifs des trois régions. Ceci nous conduit naturellement à un système matriciel E rectangulaire où le nombre d'équations est plus petit que le nombre de déplacements inconnus.

Afin de pouvoir résoudre ce système, on doit réduire le nombre de variables pour en déduire un système d'équations homogènes. Ainsi, on décrit pour chaque donnée (\vec{q}, ω) les déplacements atomiques par des ondes évanescentes exprimées comme une combinaison linéaire sur les n modes vibrationnels de volume suivant la direction normale à la surface. Ces n modes correspondent aux n racines \mathbf{z} satisfaisant la condition $|z| < 1$. La relation suivante fait état de raccordement

$$u_\alpha(l, \omega) = \sum_{i=1}^n A(\alpha, Z_i) Z_i^{p-p_s} R_i \quad (1.11)$$

- p représente la troisième coordonnée de l'atome l considéré. p_s représente la troisième coordonnée de l'atome de surface. α parcourt les trois directions cartésiennes x, y, z .

Le n est le nombre de modes évanescents. R_i est un vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent i dans la base $\{R\}$. Le Z_i est le facteur de phase du mode évanescent i de la matrice dynamique dans le volume. $A(\alpha, z_i)$ représente le poids pondéré associé à la contribution de l' i ème mode évanescent dans la direction cartésienne α .

La connaissance simultanée des facteurs de phase Z_i caractérisant les modes évanescents, ainsi que les poids pondérés $A(\alpha, Z_i)$, tous deux issus de l'étude en volume nous permettent alors de définir la matrice de raccordement R à l'aide des développements de la relation (1.11).

Le produit des matrices D et R ainsi défini nous conduit alors à une matrice carrée S caractérisant le système d'équations homogènes pour le quel les solutions non triviales nous conduisent à :

$$\text{Det}(S(\vec{q}, Z)) = 0 \quad (1.12)$$

On aboutit donc à la détermination des modes vibrationnels au voisinage de la surface. Ainsi, il est alors possible de calculer les courbes de dispersion des états localisés.

I.6. Etude de la diffusion.

Considérons le cas d'un mode propageant i ($|z_i|=1$) Z_i provenant du guide d'ondes parfait gauche (G) et allant vers le guide d'ondes parfait droit (D). L'onde résultante diffusée par le défaut se décompose en deux parties, l'une est transmise au côté droit, l'autre est réfléchiée sur le côté gauche, ce qui donne naissance à un champ vibrationnel de déplacement dans les deux demi espaces. La composante cartésienne α du champ de déplacements d'un atome situé en dehors de la région de défaut (milieu) peut être exprimée en utilisant la méthode de raccordement [15]. Les déplacements atomiques dans les trois directions cartésiennes d'un site atomique appartenant au système du côté gauche (G) peuvent s'exprimer comme la superposition de l'onde incidente avec les modes propres de vibration du guide d'ondes parfait à la même fréquence :

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = A(\alpha, i)[Z(i)]^{n_x} + \sum_{i=1}^3 [Z(i)]^{-n_x} R_{ii}' A(\alpha, i'), \text{ avec } n_x < 0 \quad (1.13)$$

De la même manière, pour un site atomique du côté droit (D), les déplacements atomiques peuvent s'exprimer ainsi :

$$\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y, \mathbf{n}_z) = \sum_{j=1}^3 [\mathbf{Z}'(\mathbf{j})]^{+\mathbf{n}_x} T_{ij} \mathbf{A}'(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{j}), \quad \text{avec } \mathbf{n}_x > 0 \quad (1.14)$$

La quantité $R_{ii'}$ est à relier avec les coefficients de réflexion d'un mode incident i selon les modes propageants i' du système (G) pour une fréquence donnée. De même, la quantité T_{ij} est associée avec les coefficients de transmissions du mode incident i selon les modes propres j du système (D).

I.7. Calcul de la conductance phononique.

Afin de décrire la transmission globale des ondes vibrationnelles par un défaut, il est aussi utile de définir la conductance phononique d'un défaut pour une fréquence Ω donnée [16].

Cette conductance notée $\sigma(\Omega)$ est notamment définie pour une propagation depuis le système G (à gauche) vers le système D (à droite) :

$$\sigma(\Omega) = \sum_{ij} t_{ij} \quad (1.15)$$

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

Pour un guide d'ondes parfait ; sans défaut σ est un entier qui donne le nombre de modes propageants à la fréquence Ω considérée. Loin du défaut, nous sommes en présence de deux guides d'ondes identiques, ce qui entraîne l'existence d'une même conductance associée à ces deux systèmes parfaits.

La présence du défaut crée donc un écart entre le σ idéal et sa valeur provenant des processus de diffusion élastique sur les défauts, cet écart donne une mesure de la réflexion.

La conductance σ permet de regrouper les contributions de tous les modes en une seule courbe, mais elle présente l'inconvénient de perdre toute information sur l'origine détaillé par modes. En ce sens, il y a perte d'information par rapport aux coefficients de transmission individuels.

Néanmoins, la conductance est accessible expérimentalement puisque on est capable d'exciter et de détecter des vibrations à une fréquence donnée [17].

Introduction générale

La thématique d'ondes élastiques est un sujet très vaste et très riche sur le double plan théorique et expérimental. Plusieurs problèmes ont été abordés dans le domaine acoustique, électromagnétique, électrodynamique et même vibratoire pour lesquels l'équation des ondes est un problème type.

Aujourd'hui, l'un des défis de la technologie moderne est l'élaboration des systèmes atomiques ou moléculaires capable de transférer des informations à l'échelle nanométrique. Dans ce contexte, la science des interfaces joue un rôle prépondérant, puisque elle permet la conception de plusieurs matériaux de fonctionnels avec une géométrie parfaitement contrôlée.

Par conséquent, la miniaturisation des dispositifs dans le domaine de la microélectronique et de la nanoélectronique constitue un véritable saut technologique et un enjeu stratégique pour les applications industrielles futures dans différents secteurs, comme l'électronique de la téléphonie mobile, l'armement, la médecine, les télécommunications, l'optique.

Ces applications permettront, sans aucun doute, d'accroître considérablement la densité de stockage et le transfert de l'information et l'efficacité des composants.

Cette diminution de taille s'accompagne d'une réduction du volume des matériaux mis en jeu. Ainsi, des effets qui étaient considérés comme négligeables deviennent prépondérants, et la connaissance de plus en plus précise des propriétés surfaciques des matériaux devient un enjeu majeur [1].

Les interfaces cristallines présentent des applications intéressantes en physique des solides, on peut citer le cas des hétérojonctions, de l'interface métal-semi conducteur, des systèmes lamellaires métalliques formés par juxtaposition de films cristallins alternés des phases absorbées.

Actuellement, un intérêt de plus en plus croissant a été accordé aux propriétés des phonons en présence de ces interfaces, car les vibrations des interfaces constituent une signature distinctive de leurs compositions chimiques ainsi que leurs structures et organisations. Les vibrations nous renseignent en effet, sur la nature des terminaisons chimiques de l'interface

ou des adsorbats présents. Car les modes normaux des vibrations constituent une empreinte caractéristique de chaque liaison ou groupement chimique particulier.

D'autre part, la croissance d'un substrat à des fins scientifiques ou technologiques, laisse presque toujours des défauts de surface. Même lorsqu'elles sont bien préparées, les surfaces cristallines présentent des défauts structuraux à l'échelle nanométrique. L'état morphologique de la surface se présente donc généralement sous forme d'une distribution de marches et de terrasses atomiques, de hauteurs variées, ainsi que de différents types de défauts ponctuels tels que des adatoms, adlacunes et des puits atomiques. La présence de ces défauts et nanostructure est confirmée par des techniques expérimentales comme les microscopes à effet tunnels (STM) et à force atomique (AFM). Ces techniques offrent une vision directe de la morphologie de système [2].

Les inhomogénéités atomiques et structurelles modifient les propriétés mécaniques et thermiques de la structure, considérée par la physique du solide comme un réseau cristallin parfait et par la mécanique ondulatoire comme un guide d'ondes [3].

L'approche des phénomènes de diffusion et de dynamique vibrationnelle dans des systèmes cristallographiques contenant des défauts reste à nos jours un exercice difficile. Contrairement aux cas électroniques utilisant des méthodes quantiques en résolvant l'équation de Schrödinger, dans ce travail on utilise une approche basée sur l'équation dynamique de Newton ; et cela dans le cadre de l'approximation harmonique des forces centrales et des interactions limitées aux premiers et seconds voisins [4]. Nous devons noter de passage que la diffusion des ondes vibratoires est plus compliquée car les modes propres de vibration du réseau sont des ondes vectorielles, contrairement au cas électronique où les fonctions d'ondes de l'équation de Schrödinger sont des scalaires.

Notre objectif, dans ce mémoire, est d'apporter notre contribution à une meilleure compréhension des phénomènes vibratoires liés à la diffusion des ondes élastiques. Particulièrement, nous étudions la diffusion d'ondes élastiques dans des systèmes de basse dimension en présence d'interfaces atomiques séparant deux systèmes semi-infinis de structure cubique simple (CS), ainsi que l'impact de la géométrie et la topologie de ces interfaces sur la propagation des ondes élastiques.

Le premier chapitre est un rappel des notions de base portant sur la dynamique vibrationnelle des systèmes ordonnés de basse dimensionnalité. Nous donnons aussi le formalisme de la méthode de raccordement, qui sera appliquée pour la détermination des états vibrationnels localisés au voisinage de défaut brisant la symétrie de translation dans le cas des systèmes désordonnés.

Le deuxième chapitre est une application portant sur la dynamique vibrationnelle d'un guide d'ondes parfait, tout en illustrant la matrice dynamique du système, ensuite, nous traçons les courbes de dispersion des phonons, en définissant, au préalable, les vitesses de groupe.

Dans le troisième chapitre, nous traitons la diffusion d'une onde élastique à travers une interface reliant deux structures CS semi-infinie. Nous introduisons la méthode de raccordement pour étudier la diffusion d'ondes élastiques. Nous déterminons, également, les coefficients de transmission et de réflexion ainsi que la conductance phononique.

Nous terminons le mémoire par une conclusion générale qui retracera les principaux résultats obtenus ainsi que les perspectives offertes dans ce domaine de recherche qui ouvrent de nombreuses voies au transport de l'information à l'échelle nanométrique.

II.1 Introduction

Les systèmes de dimensions réduites est un domaine de recherche en plein essor sur le double plan théorique et empirique, les physiciens de solides l'accordent un intérêt majeur. Il ya principalement deux motivations essentielles pour l'intérêt accordé a ces systèmes de basses dimensions non parfaits, sont : primo l'application de ces composants dans plusieurs domaines de la technologie de pointe a l'égard de la micro électronique, optoélectronique et ,secundo le développement des formalismes analytiques appropriés.

Le problème à résoudre dans ce travail consiste a l'étude de la diffusion de l'ondes vibratoires dans des cristaux de structure cubique simple en présence des défauts cette étude intervient dans le cas de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premier et second voisin (model masse- ressort).

II.2 Dynamique vibrationnelle de guide d'ondes parfait

II.2.1 Description de système modèle.

Le système modèle est un cristal monoatomique infini de structure cubique simple, repéré par les axes x , y , z de paramètre de maille a , pour des mesure de simplification en considère a égal a l'unité. Les atomes de masse m sont situés aux nœuds de réseau et relier a leur voisins par des liaisons représentant les interactions entre les atomes assimilés a des ressort dont les constantes de raideur K_1 , K_2 premiers et second voisins respectivement.

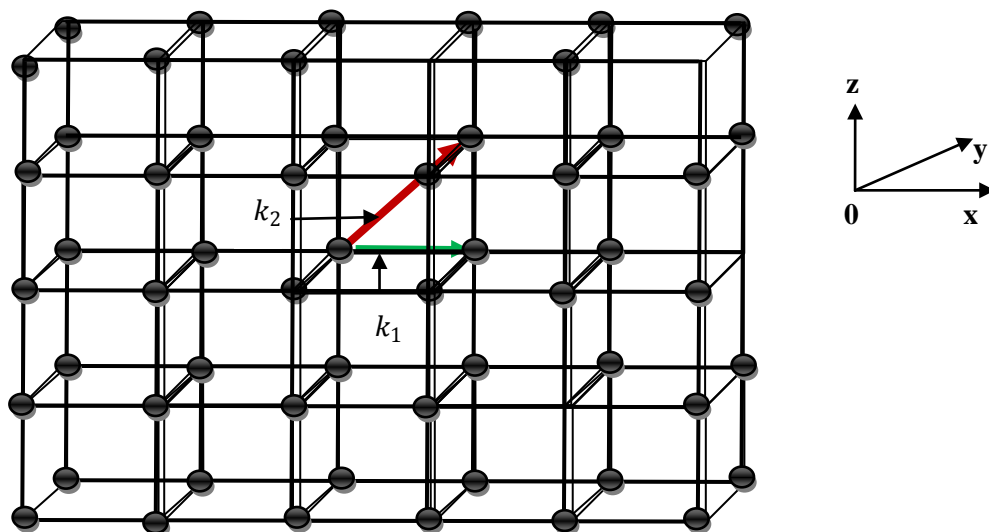


Fig. 2.1 : Représentation d'une structure cubique simple parfaite.

II.3. Les équations du mouvement :

Dans le cadre de l'approximation harmonique associée au modèle des forces centrales, l'équation du mouvement d'un atome dans un volume en tenant compte des premiers et seconde voisins s'écrit comme suit :

$$m(l)\omega^2 \mathbf{u}_\alpha(l, \omega) = -\sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \frac{r_{\alpha\beta}}{r^2} K(l, l') [\mathbf{u}_\beta(l', \omega) - \mathbf{u}_\beta(l, \omega)] \quad (2.1)$$

α et β représentent des directions cartésiennes possible de l'espace , $m(l)$ indique la masse de l'atome du site (l) , $u_\alpha(l, \omega)$ le déplacement suivant la direction α , r_α représente la composante cartisienne du vecteur position joignant les sites (l) et (l') , r le module de vecteur position , $k(l, l')$ la constante de force entre les atomes (l) et (l') et ω est la fréquence de vibration de l'atome considéré .

Les projections de l'équation suivant chacune des directions cartésiennes considérés permettent de trouver les équations ci-dessous .nous rappelons que la sommation sur l' porte sur tous les premiers et deuxièmes voisins du site (l).

La projection suivant $\alpha = x$ donne l'expression suivante :

$$m\omega^2 u_x(l, \omega^2) = \sum_{l' \neq l} k(l, l') \frac{r_x^2}{d^2} [u_x(l, \omega^2) - u_x(l', \omega^2)] - \sum_{l' \neq l} k(l, l') \frac{r_x r_y}{d^2} [u_y(l, \omega^2) - u_y(l', \omega^2)] - \sum_{l' \neq l} k(l, l') \frac{r_x r_z}{d^2} [u_z(l, \omega^2) - u_z(l', \omega^2)] \quad (2.2)$$

Notons que:

$$\mathbf{u}_\alpha(l-1, m, n) = z_1^{-1} \mathbf{u}_\alpha(l, m, n), \mathbf{u}_\alpha(l, m-1, n) = z_2^{-1} \mathbf{u}_\alpha(l, m, n), \mathbf{u}_\alpha(l, m, n-1) = z_3^{-1} \mathbf{u}_\alpha(l, m, n). \text{ avec : } e^{+i\varphi_x} = z_1^{-1}, e^{+i\varphi_y} = z_2^{-1}, e^{+i\varphi_z} = z_3^{-1}$$

L'expression (2.2) devient comme suit :

$$\begin{aligned} & \left[m\omega^2 + k_1(-2 + (z_1 + z_1^{-1}) - 4k_2 + \frac{k_2}{2}(z_1 + z_1^{-1})[(z_2 + z_2^{-1}) + (z_3 + z_3^{-1})]) \right] u_x(0, 0, 0) \\ & + \frac{k_2}{2}(z_1 - z_1^{-1})(z_2 - z_2^{-1}) u_y(0, 0, 0) + \frac{k_2}{2}(z_1 - z_1^{-1})(z_3 - z_3^{-1}) u_z(0, 0, 0) \end{aligned} \quad (2.3)$$

On divise l'expression sur k_1 ensuite on pose : $\frac{k_1}{k_2} = r$ $\Omega^2 = \frac{m\omega^2}{k_1} = \frac{\omega^2}{\omega_0^2}$ avec : $\omega_0 = \sqrt{\frac{k_1}{m}}$

Ω Est la fréquence normalisée (réduite), elle est sans dimension.

φ_α est le facteur de phase suivant la direction α .

La projection suivant $(\alpha = x)$ s'écrit finalement comme suit :

$$\begin{aligned} & \left[\Omega^2 - 2 + (z_1 + z_1^{-1}) - 4r + \frac{k_2}{2} (z_1 + z_1^{-1}) [(z_2 + z_2^{-1}) + (z_3 + z_3^{-1})] \right] u_x(0, 0, 0) + \frac{r}{2} (z_1 - z_1^{-1}) (z_2 - z_2^{-1}) \\ & u_y(0, 0, 0) + \frac{r}{2} (z_1 - z_1^{-1}) (z_3 - z_3^{-1}) u_z(0, 0, 0) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Idem pour les deux autre directions cartésiennes y, z.

La projection suivant $\alpha=y$ donne l'expression suivante :

$$\begin{aligned} & \left[\Omega^2 - 2 + (z_2 + z_2^{-1}) - 4r + \frac{k_2}{2} (z_2 + z_2^{-1}) [(z_2 + z_2^{-1}) + (z_3 + z_3^{-1})] \right] u_y(0, 0, 0) \\ & + \frac{r}{2} (z_1 - z_1^{-1}) (z_2 - z_2^{-1}) u_y(0, 0, 0) \\ & + \frac{r}{2} (z_2 - z_2^{-1}) (z_3 - z_3^{-1}) u_z(0, 0, 0) \end{aligned} \quad (2.5)$$

La projection selon $\alpha=z$ donne l'expression suivante :

$$\begin{aligned} & \left[\Omega^2 - 2 + (z_3 + z_3^{-1}) - 4r + \frac{k_2}{2} (z_3 + z_3^{-1}) [(z_2 + z_2^{-1}) + (z_1 + z_1^{-1})] \right] u_z(0, 0, 0) \\ & + \frac{r}{2} (z_1 - z_1^{-1}) (z_3 - z_3^{-1}) u_x(0, 0, 0) \\ & + \frac{r}{2} (z_2 - z_2^{-1}) (z_3 - z_3^{-1}) u_y(0, 0, 0) \end{aligned} \quad (2.6)$$

La matrice dynamique

Les équations (2.4), (2.5) et (2.6) précédentes peuvent être résumées sous la forme matricielle suivante : $[\Omega^2 I - D(z_1, z_2, z_3, r)|u\rangle = |0\rangle$.

Avec :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} u_x(l, m, n) \\ u_y(l, m, n) \\ u_z(l, m, n) \end{bmatrix}$$

Et :

$$D(z_1, z_2, z_3, r) = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix}$$

$D(z_1, z_2, z_3, r)$: Est appelée matrice dynamique de système cubique simple .ses éléments sont :

$$D_{xx} = [2 + (z_1 + z_1^{-1}) - 4r + \frac{k_2}{2} (z_1 + z_1^{-1}) [(z_2 + z_2^{-1}) + (z_3 + z_3^{-1})]]$$

$$D_{yy} = [2 + (z_2 + z_2^{-1}) - 4r + \frac{k_2}{2} (z_2 + z_2^{-1}) [(z_2 + z_2^{-1}) + (z_3 + z_3^{-1})]]$$

$$\mathbf{D}_{zz} = 2 + (z_3 + z_3^{-1}) - 4r + \frac{k_2}{2} (z_3 + z_3^{-1}) [(z_2 + z_2^{-1}) + (z_1 + z_1^{-1})]$$

$$\mathbf{D}_{xy} = \mathbf{D}_{yx} = \frac{r}{2} (z_1 - z_1^{-1}) (z_2 - z_2^{-1})$$

$$\mathbf{D}_{xz} = \mathbf{D}_{zx} = \frac{r}{2} (z_1 - z_1^{-1}) (z_3 - z_3^{-1})$$

II.4. Courbe de dispersion

Le système d'équations précédent admet de solution non trivial si :

$$\text{Det} [\Omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{D}(z_1, z_2, z_3)] = 0$$

Sa résolution permet d'obtenir les trois fréquences normalisée de vibrations Ω et les trois vecteurs propres.

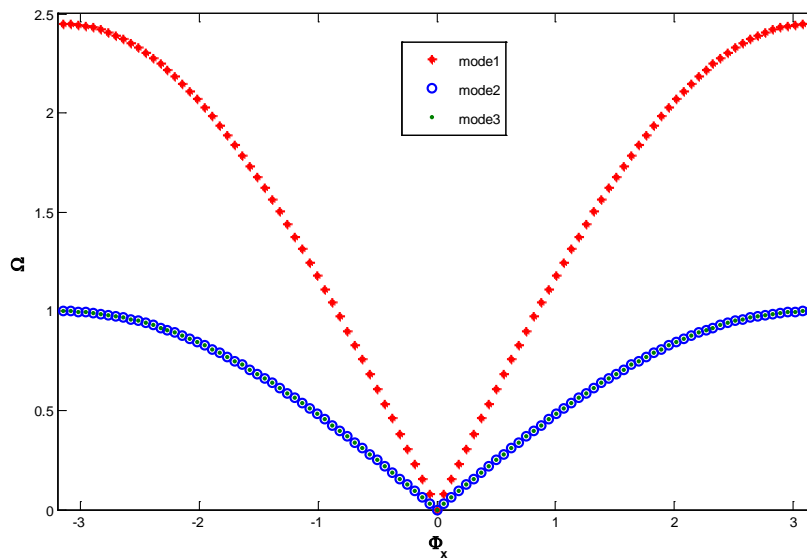


Fig.2.2 : Courbe de dispersion d'un guide d'onde parfait d'une structure cubique simple.

II.4.1. Discussion de la courbe de dispersion.

La courbe de dispersion correspond aux solutions $|Z|=1$ est donnée en fonction de

$$\varphi_Z = q_Z a = q_Z, \text{ lorsque } q_Z \text{ parcourt la première zone de Brillouin, soit } [-\pi, \pi].$$

La symétrie de problème étudié par rapport à l'inverse du temps impose la parité des courbes de dispersion par rapport à $\varphi_Z = 0$. On note que ces courbes sont symétriques par rapport à l'origine et que leurs dépendances en fonction de φ_Z n'est pas linéaires (Fig. 2.2). Ce qui signifie que le système est dispersif.

Pour une description plus complète des relations de dispersion, comprenant aussi bien les modes atténués que les modes propageant, il est intéressant de représenter sur un graphique à 3D les trajectoires parcourues dans le plan complexe par les facteurs de phase (d'atténuation) Z en fonction de la fréquence normalisée Ω . L'évolution des modes propres de vibrations dans l'espace $\Omega(\text{Im}(Z), \text{Re}(Z))$ pour $\varphi_y = 0$ donnée par la figure (2.3).

La projection des courbes sur le plan complexe montre que les solutions propageantes sont disposées suivant des cercles de rayon unité tel que : $|\text{Re}(Z)|^2 + |\text{Im}(Z)|^2 = 1$, alors que pour les modes évanescents la fréquence quitte le cercle de rayon unité et les facteurs de phase deviennent réels, tendant vers zéro quand Ω tend vers l'infini.

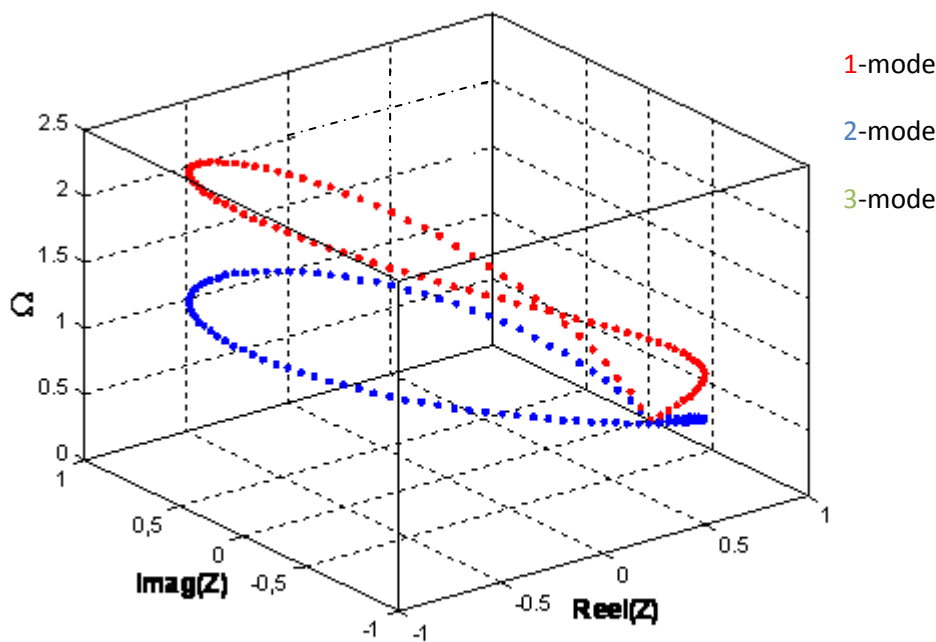


Fig.2.3: courbe de dispersion à 3D.

En résolvant les équations de propagation de ces ondes, nous pouvons exprimer la pulsation ω des phonons en fonction de leur vecteur d'onde q , c'est-à-dire obtenir des courbes de dispersion. Un paramètre intéressant qui peut être extrait des courbes de dispersion est la vitesse de groupe v_g des phonons.

II.5. La vitesse de groupe.

La vitesse de groupe d'une onde de vibration est par définition, la vitesse de propagation du paquet d'ondes : elle correspond à la vitesse du transport de l'énergie ou de l'information dans les milieux dispersifs. Elle est définie pour des valeurs d'ondes \bar{q} réelles par l'expression :

$$v_g = \frac{\delta\Omega}{\delta q} \quad \text{Soit } \vec{v}_g = \text{grad}[\Omega(\vec{q})] \quad (2.7)$$

Dans le cas où q complexe, nous imposons $v_g = 0$.

Pour déterminer cette vitesse, deux méthodes différentes peuvent être utilisées: la méthode des différences finies ou la méthode de perturbation [18].

Les deux méthodes exigent la résolution du problème du guide d'ondes parfait :

$$D(\vec{q}) \vec{u}_v = -\Omega^2(\vec{q}) \vec{u}_v \quad (2.8)$$

A \vec{q} fixé, nous trouvons trois valeurs propres de la fréquence $\Omega_v(\vec{q})$ avec les vecteurs propres correspondants $u_v(\vec{q})$. Dans ce travail, nous avons opté pour la deuxième méthode qui consiste à utiliser la similitude formelle entre l'équation (2.8) et l'équation de Schrödinger stationnaire

$H\psi = E\psi$ portant sur les perturbations indépendante du temps en mécanique quantique.

- **la méthode des différences finies**

La première méthode profite du fichier contenant les relations de dispersion calculées pour plusieurs valeurs de \vec{q} comprises entre 0 et π . Ce fichier est indispensable puisqu'il permet de relier les couples $(\Omega(q), z)$ à la bonne courbe de dispersion. La vitesse de groupe est simplement définie comme étant la pente des courbes de dispersion.

$$\mathbf{v}_g = \frac{\Omega_{i+1} - \Omega_i}{q_{i+1} - q_i} = \frac{\Delta\Omega}{\Delta q} \quad (2.9)$$

Le résultat obtenu semble tout à fait correct mais s'avère souvent être moins précis que celui donné par une résolution basée sur une interprétation physique de la vitesse de groupe.

- **La méthode des perturbations**

On part du problème du guide d'ondes parfait,

$$D(q)\vec{u} = -\omega^2\vec{u} \quad (3.0)$$

La similitude formelle entre l'équation (3.13) et l'équation de Schrödinger stationnaire

$$H\Psi = E\Psi \quad (3.1)$$

Nous poussons à tenter une approche que nous appellerons perturbatrice [17], puisqu'elle est calquée sur le traitement des perturbations indépendantes du temps en mécanique quantique.

Supposons connus tous les éléments de l'équation

$$D(q_0)\vec{u}(q_0) = -\omega^2(q_0)\vec{u}(q_0) \quad (3.2)$$

Le rôle de perturbation est joué par accroissement infinitésimal Δq tel que :

$$q + q_0 + \Delta q \quad (3.3)$$

Si l'on se limite au premier ordre, on considère que le vecteur propre est constant

$$\vec{u}(q) = \vec{u}(q_0) \quad (3.4)$$

Par contre ;

$$D(q) = D(q_0) + \Delta q \frac{\partial D}{\partial q} \quad (3.5)$$

$$\text{Et } \omega^2(q_0) + \Delta q \frac{\partial \omega^2}{\partial q} \quad (3.6)$$

On écrit l'équation (3.0) en tenant compte de ces approximations, ce qui nous donne successivement :

$$[D(q_0) + \omega^2(q_0) + \Delta q \frac{\partial D}{\partial q} + \Delta q \frac{\partial \omega^2}{\partial q}] \vec{u}(q_0) = 0 \quad (3.7)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} = -\frac{\partial \omega^2}{\partial q} \vec{u} \quad (3.8)$$

$$\Rightarrow \vec{u} \frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} = -\frac{\partial \omega^2}{\partial q} \vec{u} \vec{u} = -\frac{\partial \omega^2}{\partial q} \quad (3.9)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \omega}{\partial q} = -\frac{1}{2\omega} \vec{u} \frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} \quad (4.0)$$

La matrice D étant connue, il est possible d'en faire la dérivée analytique, donc (4.0) nous permet de calculer la vitesse de groupe.

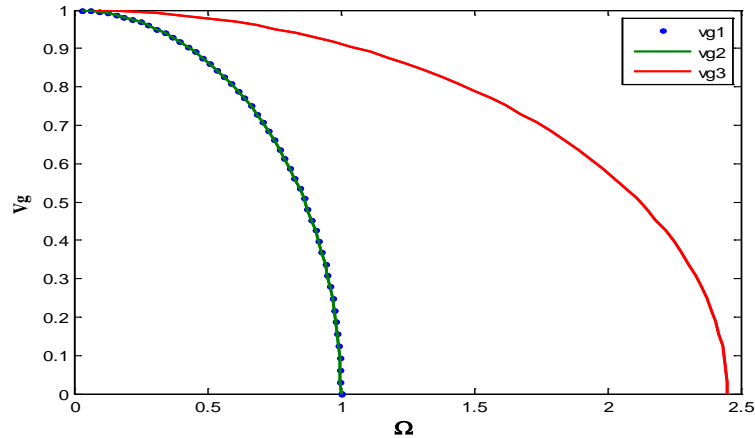


Fig.2.4 : Courbes des vitesses de groupes d'un guide d'ondes parfait d'une structure cubique simple.

Sur la figure (2.4), nous avons représenté l'allure de la vitesse de groupe v_g en fonction de la fréquence de diffusion Ω . Nous constatons que les courbes évoluent globalement avec la même allure pour les trois modes conformément aux courbes de dispersion. Notons aussi que l'étendue de chacune des plages où la vitesse $v_g \neq 0$ se rapporte bien à celle des modes propageant.

En résumé, les propriétés dynamiques d'un guide d'onde parfait du système cubique infini, sont étudiées en utilisant les équations de la mécanique Newtonienne dans le cadre de l'approximation harmonique, des forces centrales et d'une interaction entre premier et second proche voisins. Les courbes de dispersion des modes vibrationnels propageant dans les directions de haute symétrie de la première zone de Brillouin irréductible sont obtenues.

III.1. Introduction

Les matériaux qui se composent de quelques couches insérées entre des cristaux semi-infinis sont considérés comme des nano jonctions. Ils sont d'une grande importance dans beaucoup d'applications techniques et dans la réalisation des nouvelles structures. Leurs propriétés font l'objet d'une attention particulière ces dernières années [22-23], vue leurs nombreux avantages tels que :

- Bonne adaptation sur les conceptions des formes.
- Possibilité d'obtenir de nouvelles performances (tenue mécanique particulière, résistance chimique, résistance électrique, résistance aux érosions, résistance aux hautes températures, ...).
- Concevoir des pièces multifonctionnelles.
- Applications industrielles potentielles en tant que support de stockage magnétique à la magnéto-optique.

Le but de ce chapitre est d'étudier la diffusion des ondes de vibrations d'un réseau CS à basses dimensions, perturbé par la présence d'un site atomique dans différentes configurations. Comme décrit précédemment, l'étude sera menée dans le model des forces centrales, dans l'approximation des vibrations harmoniques s'étendant aux premiers et seconds voisins. Dans un premier temps. Nous étudions les propriétés dynamiques et les équations régissant la diffusion en présence des défauts.

III.2. Matrice dynamique du système

La matrice dynamique du système perturbé, trouve son origine dans l'écriture des équations de mouvement des atomes situés dans la zone du défaut, ainsi que les atomes de raccordement. C'est une matrice rectangulaire de taille $(m \times n)$, ou m représente le nombre d'atomes de la zone de défaut plus le nombre d'atomes de raccordement, multiplié par 3, (il y a 3 degrés de liberté par site), et n est égal au nombre m plus le nombre d'atomes de raccordement, multiplié par 3 (il y a 3 degrés de liberté par site).

- **Matrice de raccordement**

L'objectif de cette partie, dans le cadre de notre modèle, est d'établir les relations de raccordement entre les déplacements vibrationnels des atomes appartenant au domaine de défaut et les champs vibrationnels des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits situés de part et d'autre de la zone contenant le défaut. Pour cela nous allons représenter les

déplacements atomiques des sites appartenant à la région de raccordement par une combinaison linéaire de vecteurs $\{RT\}$ définissant un espace fini.

Dans le cas présent, il y a, en effet, deux régions de raccordement, c'est pourquoi nous devons définir deux bases distinctes $\{R\}$ et $\{T\}$, la première est pour la région de raccordement du CS côté gauche du défaut et la seconde pour le CS côté droit. Les dimensions des vecteurs unitaires $\{R\}$ et $\{T\}$ sont liés au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude de la dynamique de localisation de la région de volume. Ainsi $\{R\}$ et $\{T\}$ sont de dimension 6.

Pour un atome appartenant à la région de raccordement du CS côté droit, on peut décrire ses déplacements vibrationnels de la manière suivante [24- 25] :

$$\mathbf{u}'_{\alpha}(\mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y, \mathbf{n}_z) = \sum_{j=1}^3 z_j^{+n_x} A'(\alpha, j) T_j \quad (3.1)$$

Et pour un atome du CS côté gauche :

$$\mathbf{u}_{\alpha}(\mathbf{n}_x, \mathbf{n}_y, \mathbf{n}_z) = \sum_{i=1}^3 z_i^{-n_x} A(\alpha, i) R_i \quad (3.2)$$

R_i : est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents i dans la base $\{R\}$ de l'espace des phases.

T_j : est le vecteur unitaire qui caractérise les modes évanescents j dans la base $\{T\}$ de l'espace des phases.

α : est l'une des deux directions (ox) ou (oy) . A et A' sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres issus de l'étude de la matrice de la zone parfaite.

Le vecteur des déplacements atomiques de la zone du défaut est noté $|u\rangle$, se décompose en

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

- La partie $|irr\rangle$ est constituée des déplacements des sites irréductibles formants la Zone défaut. Sa dimension correspond au nombre d'atomes de cette zone multiplié par trois degrés de liberté par atome.
- La partie $|rac\rangle$ est composée des déplacements des deux zones de raccordements G et D . Sa dimension est donnée pas le nombre d'atome de raccordement multiplié par deux degrés de liberté.

Le raccordement des atomes se met sous la forme matricielle suivante :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [R] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

Ou : I_d est une matrice identité. Sa taille dépend du nombre d'atomes dans le site irréductible multiplié par trois (3 degrés de libertés par site).

R_1 , R_2 , R_3 et R_4 : sont des sous matrices carrées, elle dépendent du nombre de modes propageant du système parfait, leurs dimension (3×3). Ces dernières sont exprimées en fonctions des ($Z_1(Z_2, Z_3)$) et des poids pondérés associés aux modes (cofacteurs).

R : est appelée matrice de raccordement, ses dimensions sont ($n \times m$) .

Le produit de la matrice dynamique du système perturbé (D) par la matrice de raccordement (R) donne une matrice carrée $S(m \times m)$.

$$[D(m \times n)] \cdot [R(n \times m)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = [S(m \times m)] \cdot \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = 0 \quad (3.4)$$

La relation $\det([S(m \times m)]) = 0$ donne les états vibrationnels en présence du défaut.

III.3. Courbes des spectres de vibration

Un calcul numérique nous permet de déterminer les coefficients de transmission (T), de réflexion (R), et la conductance phononique (σ) en fonction de la fréquence normalisée Ω dans différents cas.

Ces grandeurs physique sont représentées dans le cas de l'adoucissement, de l'homogénéité puis de durcissement des constantes de force au niveau du défaut, et ce pour une masse des atomes de défaut légère, homogène, et enfin lourde. Les résultats numériques sont obtenus pour les différentes valeurs des paramètres k_1 , k_2 et k_{1d} , k_{2d} en prenant les paires de valeurs suivantes :

$(k_{1d}, k_{2d}) = (0.9, 0.4)$ dans le cas d'un adoucissement des contraintes,

$(k_{1d}, k_{2d}) = (1.0, 0.5)$ dans le cas des contraintes homogènes,

$(k_{1d}, k_{2d}) = (1.1, 0.6)$ pour un durcissement des constantes de force au niveau du défaut.

III.4. Diffusion d'ondes élastiques par une interface

III.4.1. Interface de type A/couche B/A

➤ Description du modèle

Dans cette partie nous avons étudié la diffusion d'onde élastique suivant la direction [001] à travers une interface qui se compose de deux guides d'ondes parfaits (G1 et G2) d'un matériau **A** à cristallisation CS, reliées par un plan d'un autre matériau **B** de structure CS (voir Fig.III.1). Ce système est divisé en trois zones :

- Les zones G1 et G2 représentant les deux systèmes parfaits A (de paramètre de maille a , d'atomes de masse m_1 et de constante k_1 et k_2 entre les premiers et les seconds voisins) et un autre B (de paramètre de maille a , d'atomes de masse m_2 et de constante k_3 et k_4 entre les premiers et les seconds proche voisins).
- la zone M correspondant au domaine perturbé qui est le joint atomique entre les deux systèmes semi infinis. k_{1d} et k_{2d} , est les constantes de force, respectivement, pour les premiers et seconds voisins.

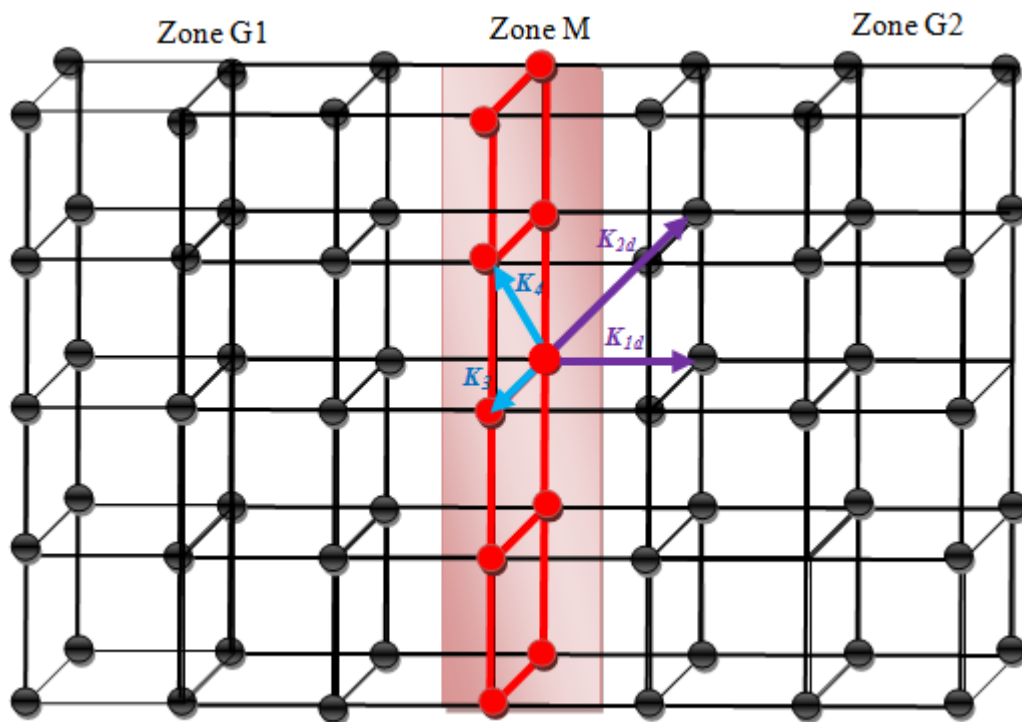


Figure (3.1) : Représentation schématique d'une structure CS avec une interface de type A/couche B/A.

III.4.1. 1. Courbes des spectres de vibration

1/Masse légère $e = 0.5$

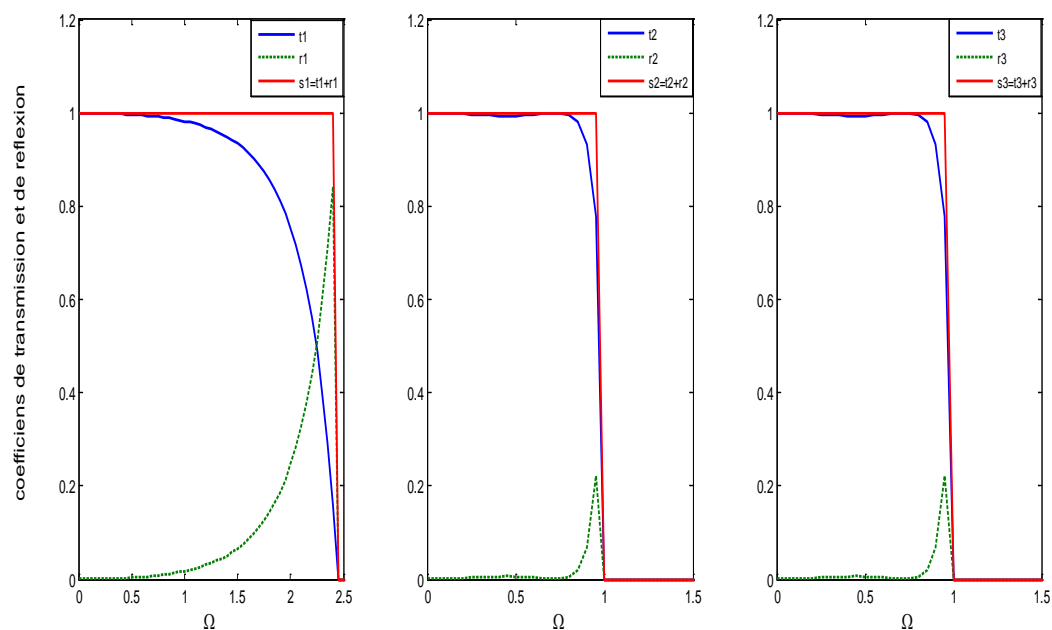


Figure (3.A.1.a) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

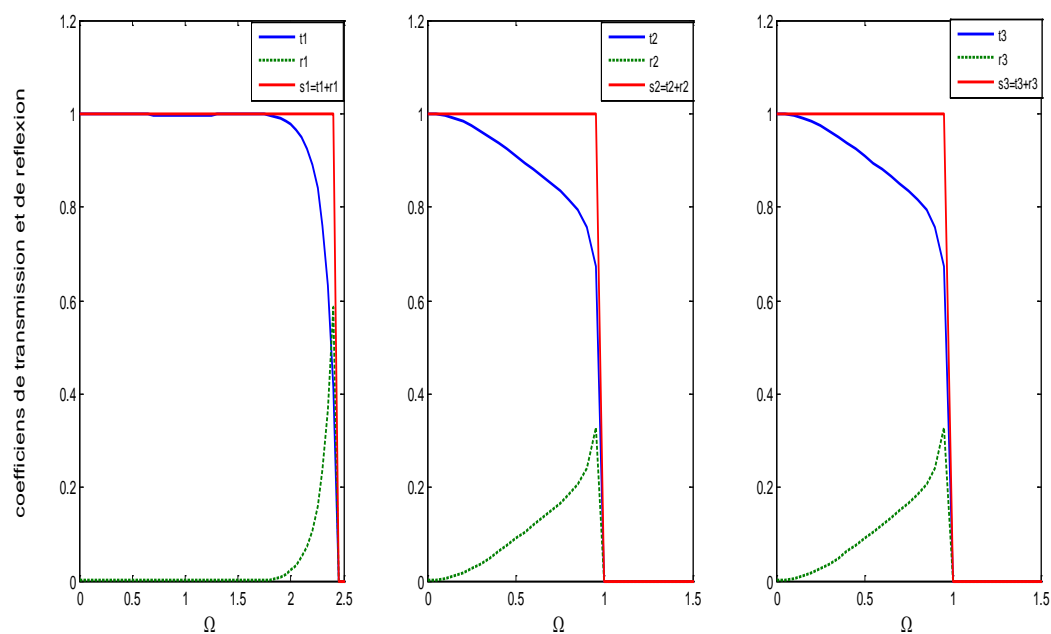


Figure (3.A.1.b) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

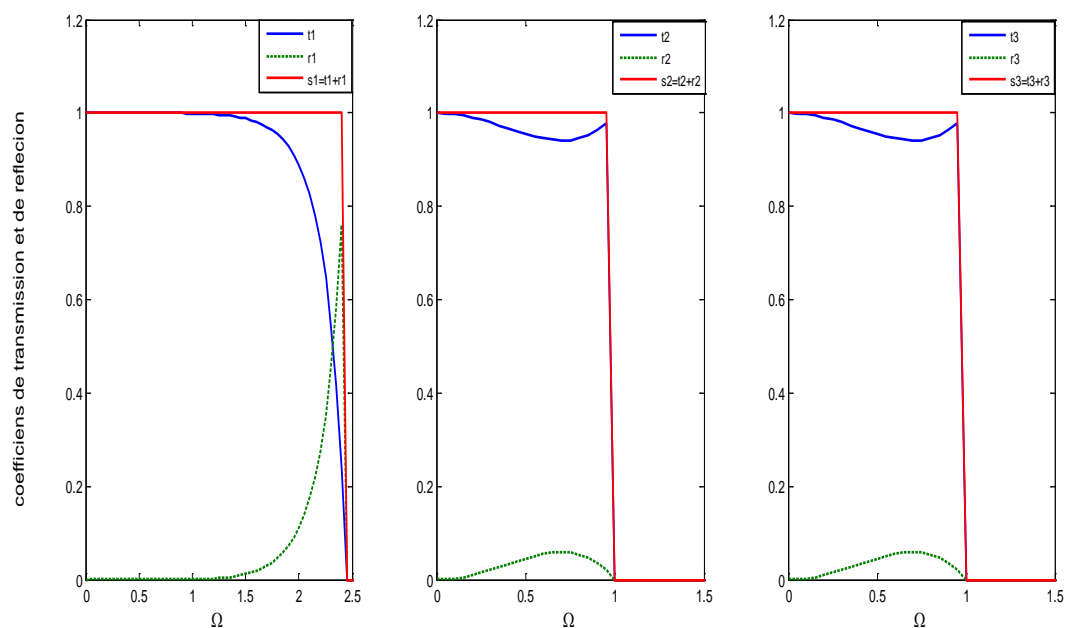


Figure (3.A.1.c) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas du durcissement des contraintes.

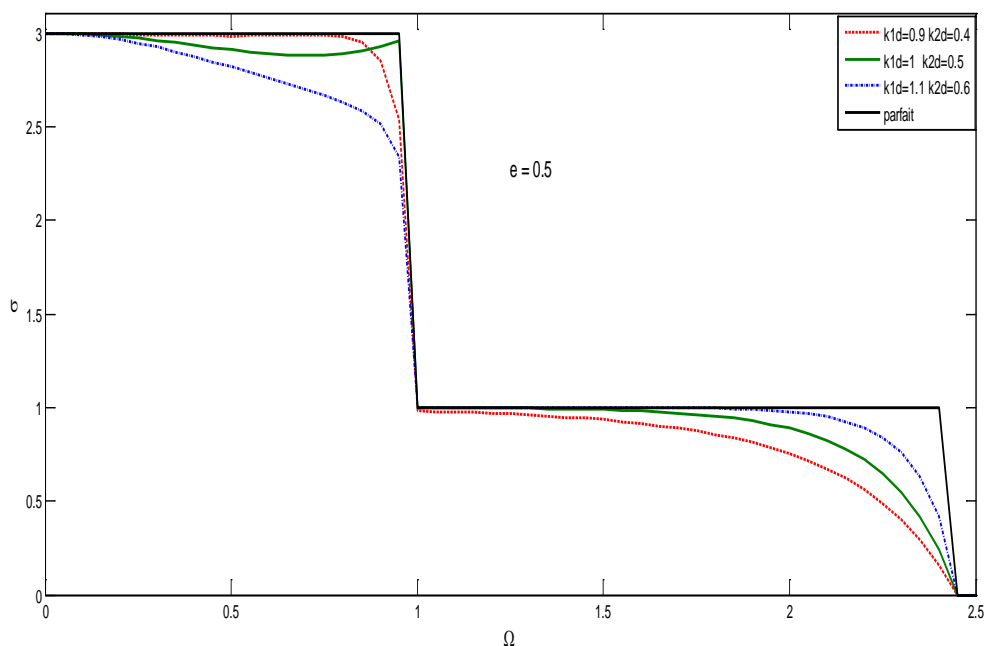


Figure (3.A.1.d) : Conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée Ω .

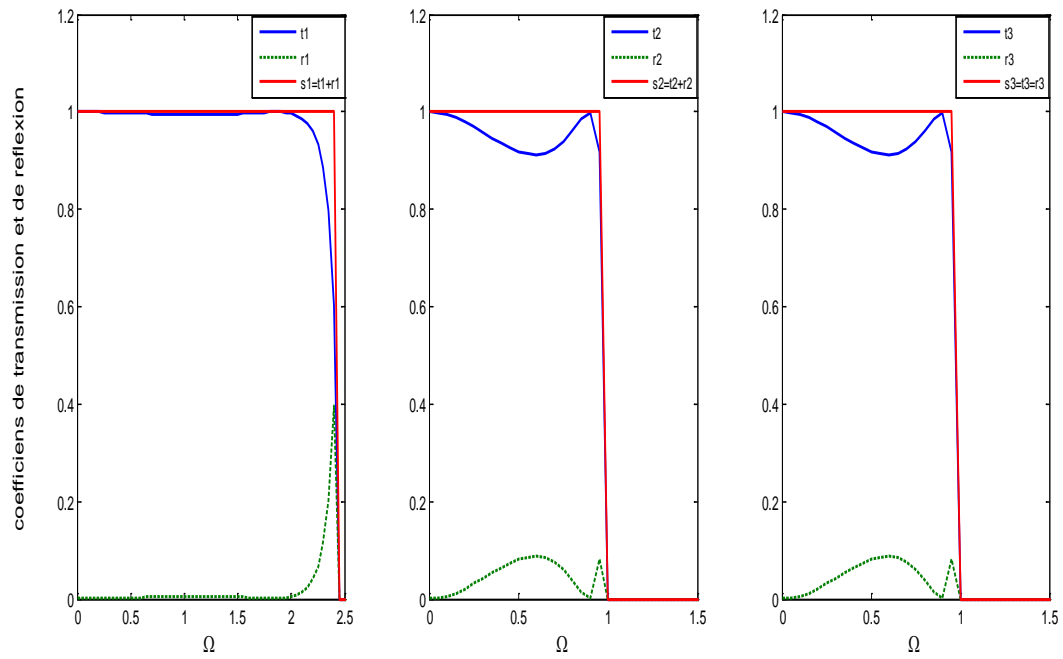
A.2/masse identique $e = 1$ 

Figure (3.A.2.a) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

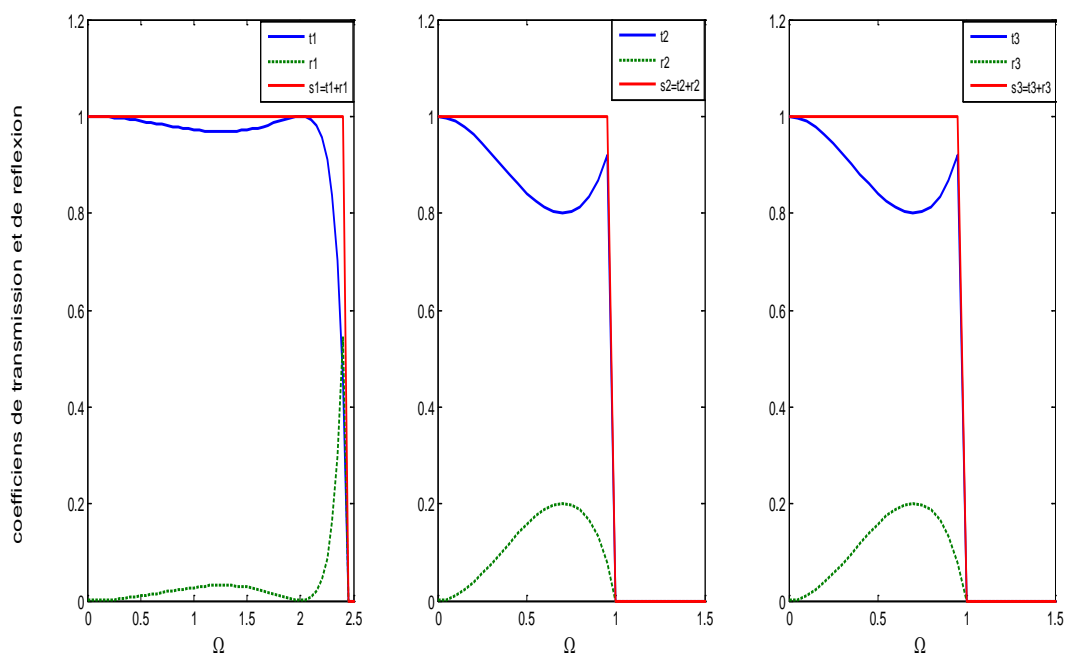


Figure (3.A.2.b) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

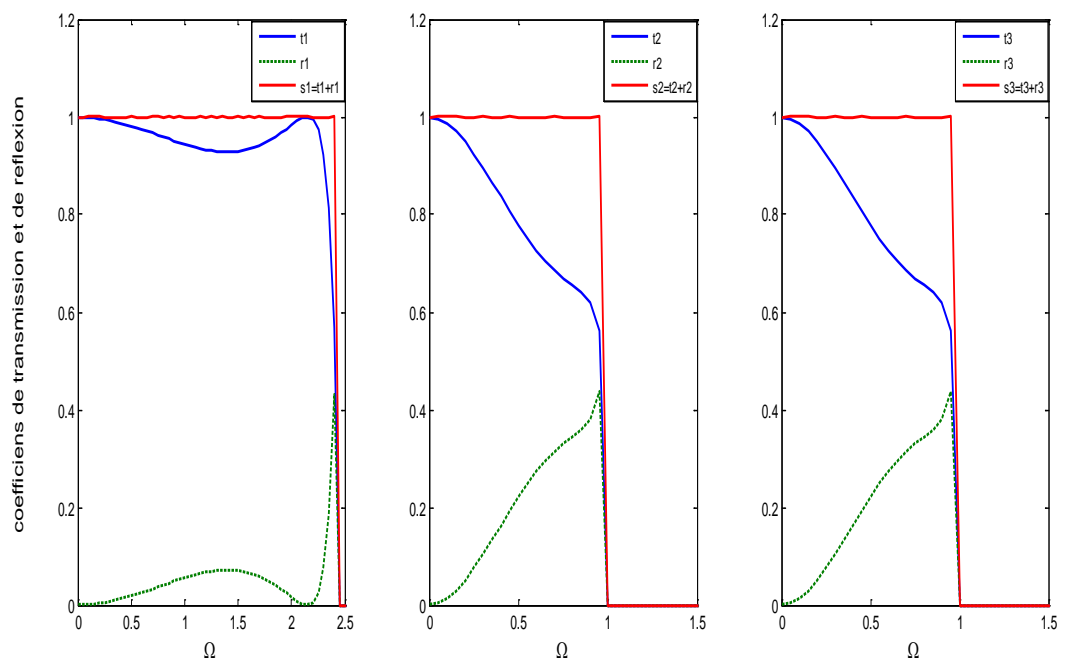


Figure (3.A.2.c) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas du durcissement des contraintes.

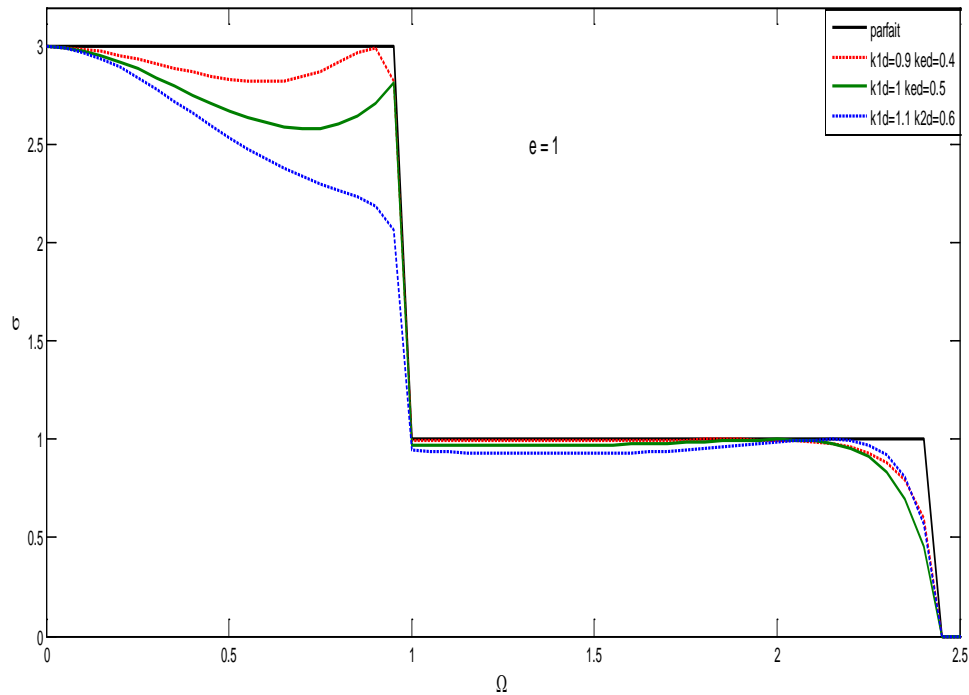


Figure (3.A.2.d) : Conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée Ω .

A. /masse lourde $e = 1.5$

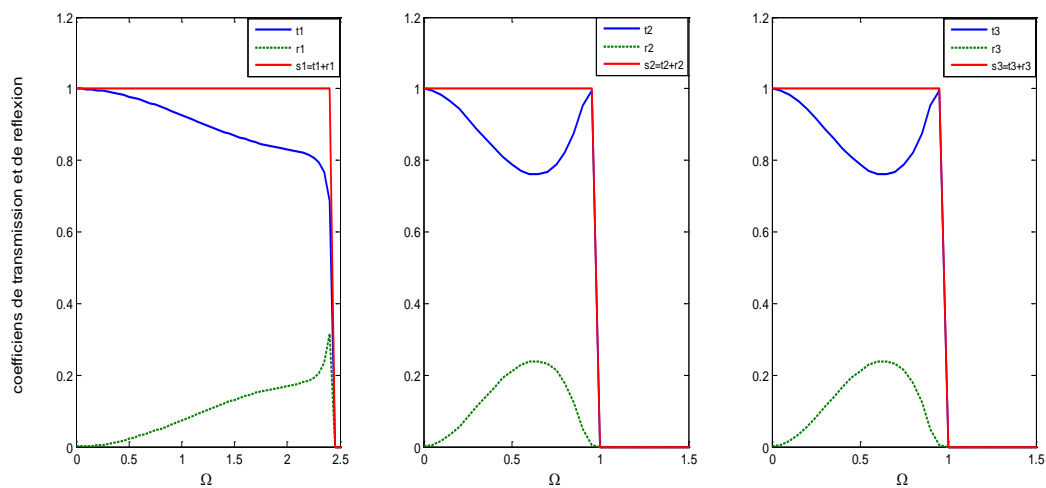


Figure (3.A.3.a) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

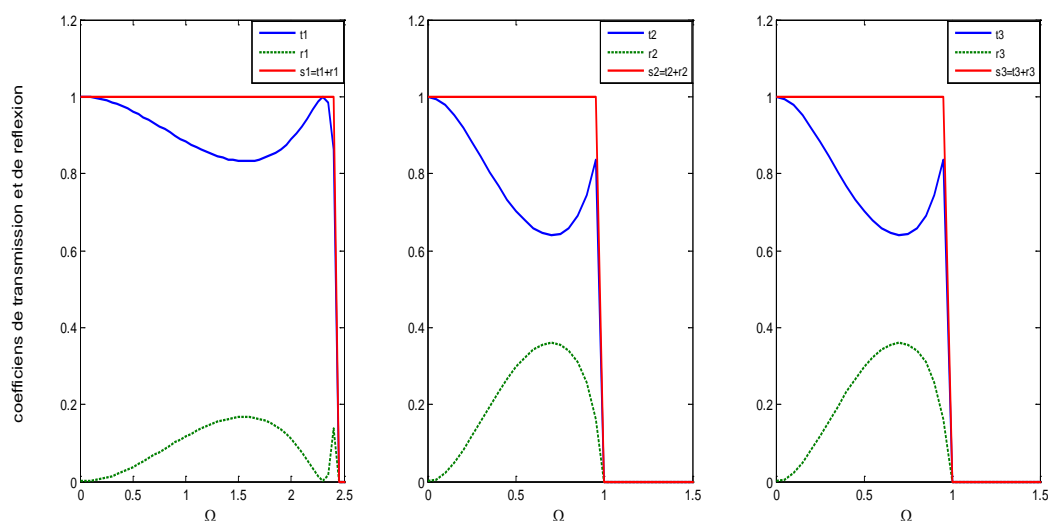


Figure (3.A.3.b) : Coefficients de transmission et réflexion d’ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l’homogénéité des contraintes.

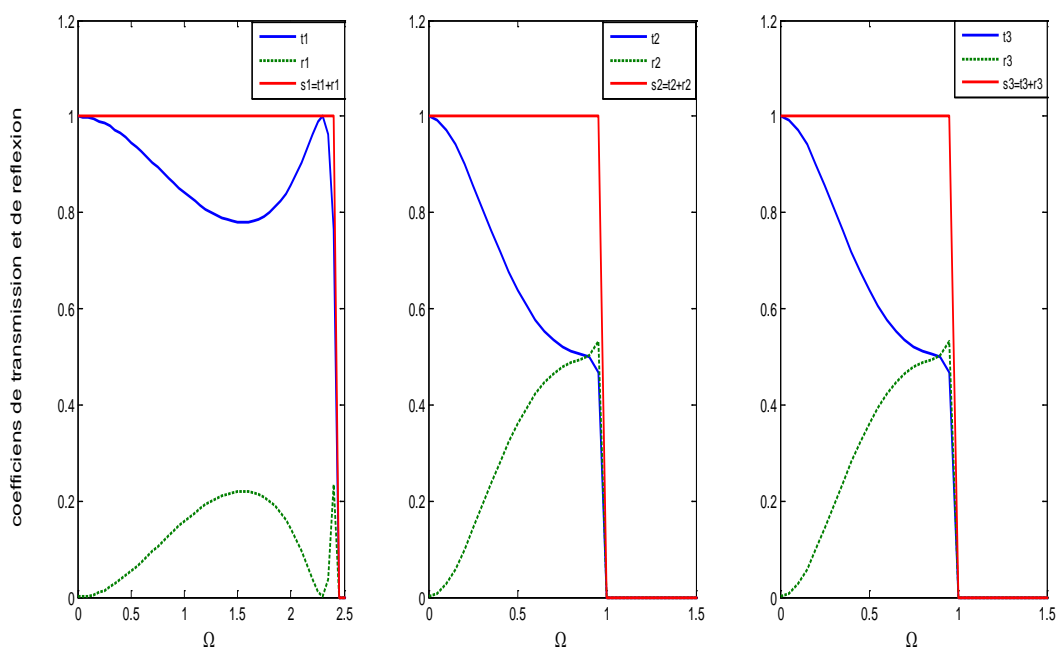


Figure (3.A.3.c) : Coefficients de transmission et réflexion d’ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas du durcissement des contraintes.

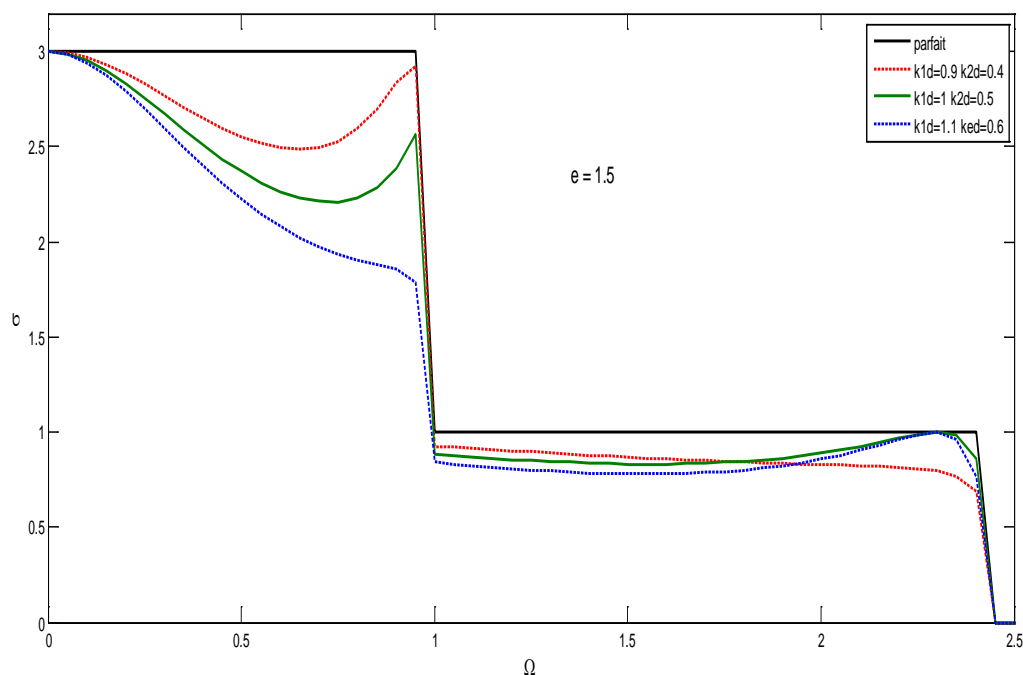


Figure (3.A.3.d) : Conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée Ω .

III-4.1.2. Discussion des résultats

Les figures (3.A.1, 2,3) représentent l'évolution des coefficients de transmission et réflexion en fonction des fréquences normalisées Ω ainsi que les conductances phononiques dans les trois probabilités de l'environnement élastique et pour les trois types de masse cités précédemment.

Notons que ces courbes existent sur la totalité de domaine de propagation là où les vitesses de groupe non nulles. A savoir : $[\Omega_{1min} = 0, \Omega_{1max} = 2,5]$ pour le premier mode et $[\Omega_{2min} = 0, \Omega_{2max} = 1]$ pour le mode 2 et mode 3.

Pour le monde 1, on constate bien que pour des fréquences de vibration nulles, la valeur de coefficient de transmission est maximale. En effet, l'énergie de propagation est insuffisante pour exciter les atomes perturbateurs, tout se passe comme dans le cas de l'inexistence de défaut, par contre, vers les hautes fréquences où l'énergie de propagation est élevée, les atomes de défaut sont excités et la probabilité de transmission est fortement affectée, elle diminue de façon notable pour devenir nulle à la limite de la zone.

Dans le cas des masses lourdes et identiques, la transmission présente un pic de résonance de type Fano juste à la limite des hautes fréquences contrairement aux masses légères ; ceci est dû probablement aux fortes interactions entre les états localisés au niveau de la zone de défaut et les modes propageant.

Pour les modes 2 et 3 : on constate que la transmission débute par une valeur égale à l'unité pour tout l'environnement élastique et les trois masses différentes.

L'allure de la transmission dans le cas de l'adoucissement des contraintes diminue jusqu'à une valeur minimale, puis augmente en revenant à la valeur unitaire, cette valeur minimale varie en fonction de la masse. En effet, elle diminue quand la masse augmente, et se décale vers les hautes fréquences quand la masse diminue.

Par contre dans le cas de l'homogénéité des contraintes, la valeur minimale obtenue par le coefficient de transmission varie d'une manière proportionnelle avec les masses des atomes et décale vers les hautes fréquences en fonction de leur légèreté.

Il découle des courbes du durcissement des contraintes pour les trois types de masses : le coefficient de transmission se décroît vers la haute fréquence en fonction de la croissance des masses. Ce qui nous permet de conclure : la transmission diminue en fonction de durcissement des contraintes et la croissance des masses.

Pour les figures qui représentent l'évolution de la conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée pour les trois cas de contraintes élastiques selon chaque type de masses ; on constate que toutes les courbes commencent par une même valeur qui est égale à trois, puis s'annule à la limite de la plage de propagation permise.

Dans l'intervalle de $\Omega \in [0,1]$, la conductance est plus importante dans les cas des contraintes douces par rapport aux contraintes homogènes et dures, respectivement.

Par contre sur l'intervalle $\Omega \in [1, 2,5]$, l'évolution de la conductance phononique varie de la même manière au long de la fréquence permise pour tous l'environnement élastique.

En d'autre terme, on peut dire que la conductance sera plus importante avec l'adoucissement des contraintes.

L'allure obtenue pour la conductance en fonction des fréquences pour les trois types de masses est presque identique, ce qui signifie que la masse n'a pas d'influence sur la conductance phononique.

III-4.2. Interface de type A/couche 2B/A

III-4-2.1. Description du modèle

Nous considérons le même système précédent, mais en augmentant le nombre de plan insérées, pour avoir un système qui contient deux plan d'un matériau B a cristallisation CS séparent deux structures semi infini d'un autre matériau A de structure CS voir figure Fig.III.2.

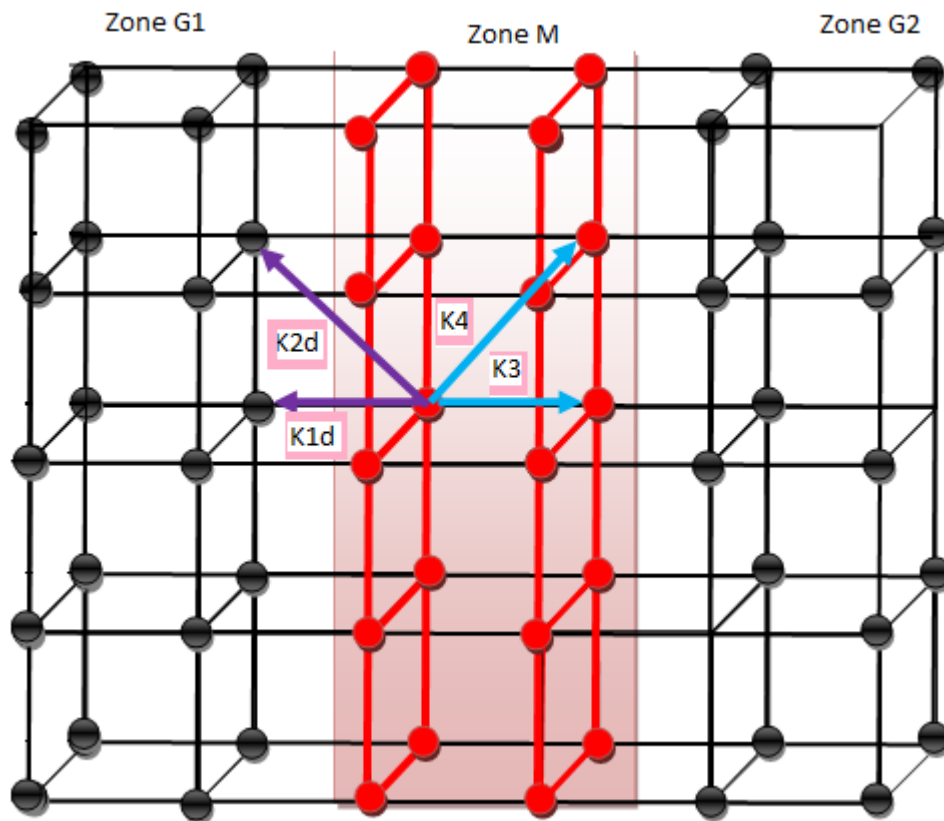


Figure (III.2) : Représentation schématique du deuxième système sandwich de type A/couche 2B/A

A fin de savoir l'influence de l'augmentation de nombre de plan sur l'onde incidente suivant la direction $[001]$ de ce système nous avons tracé les courbes qui donnent les coefficients de transmission et de réflexion, pour différent cas vue dans le premier système.

III-4-2. 2. Courbes des spectres de vibration

B.1/Masse légère $e = 0.5$

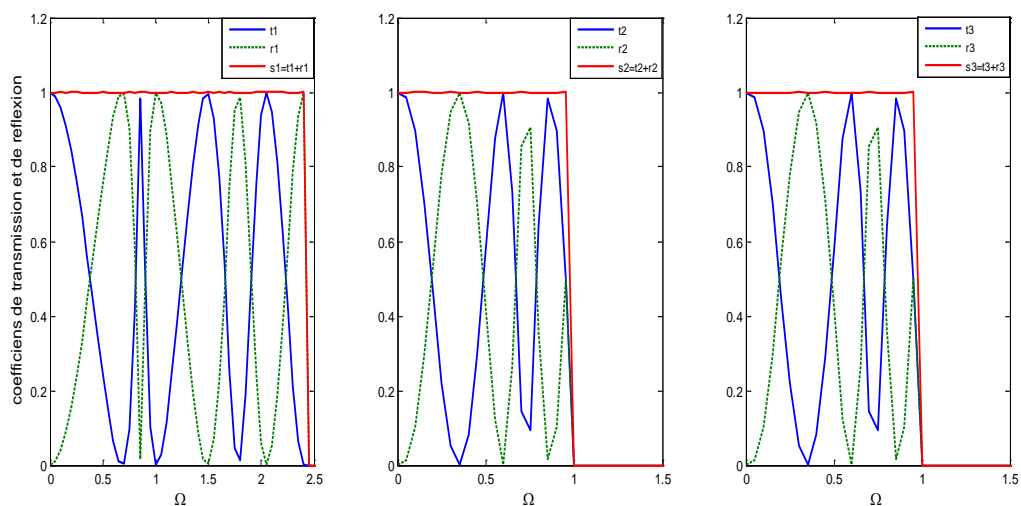


Figure (3.B.1.a) : Coefficients de transmission et réflexion d’ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l’adoucissement des contraintes.

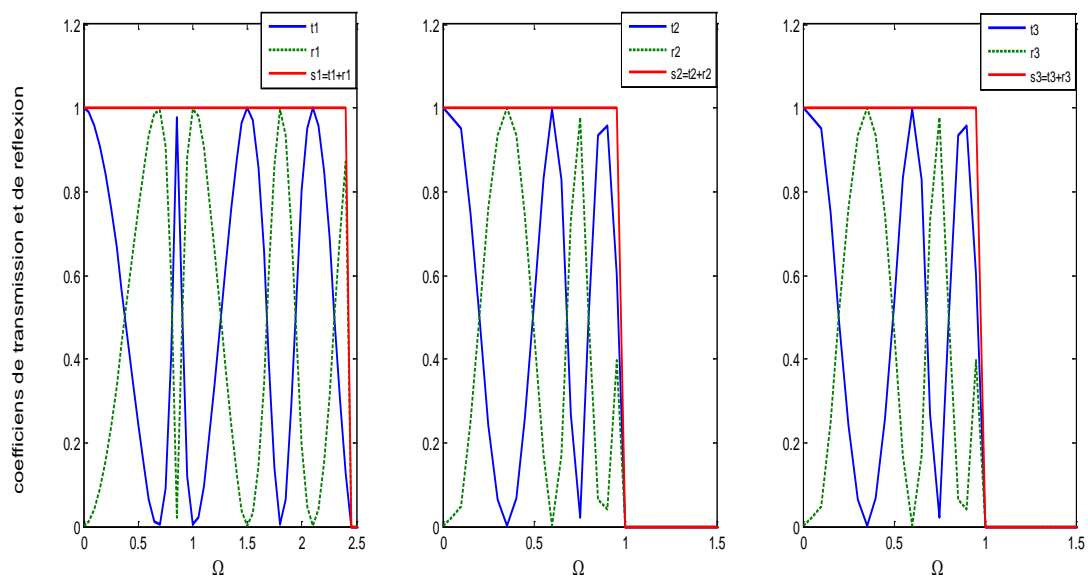


Figure (3.B.1.b) : Coefficients de transmission et réflexion d’ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l’homogénéité des contraintes.

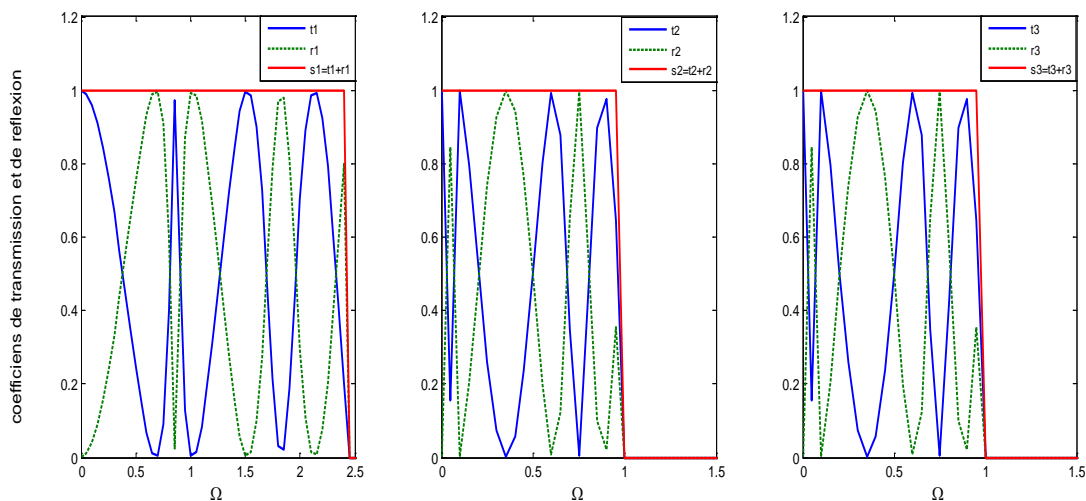


Figure (3.B.1.c) : Coefficients de transmission et réflexion d’ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas du durcissement des contraintes.

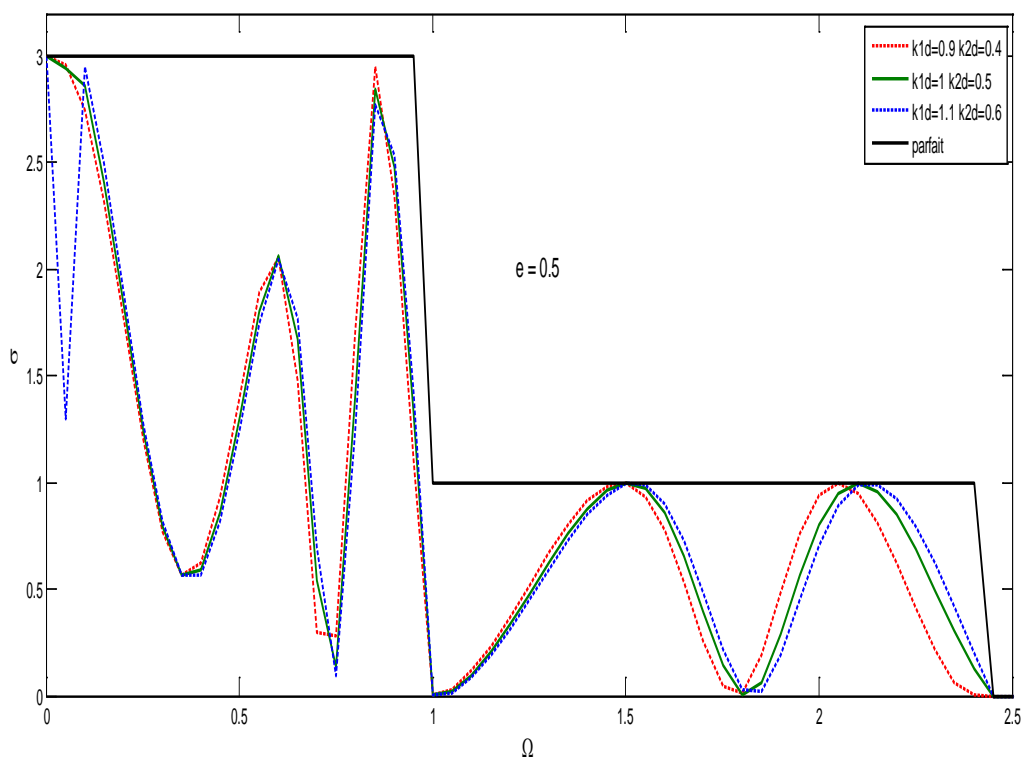


Figure (3.B.1.d) : Conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée.

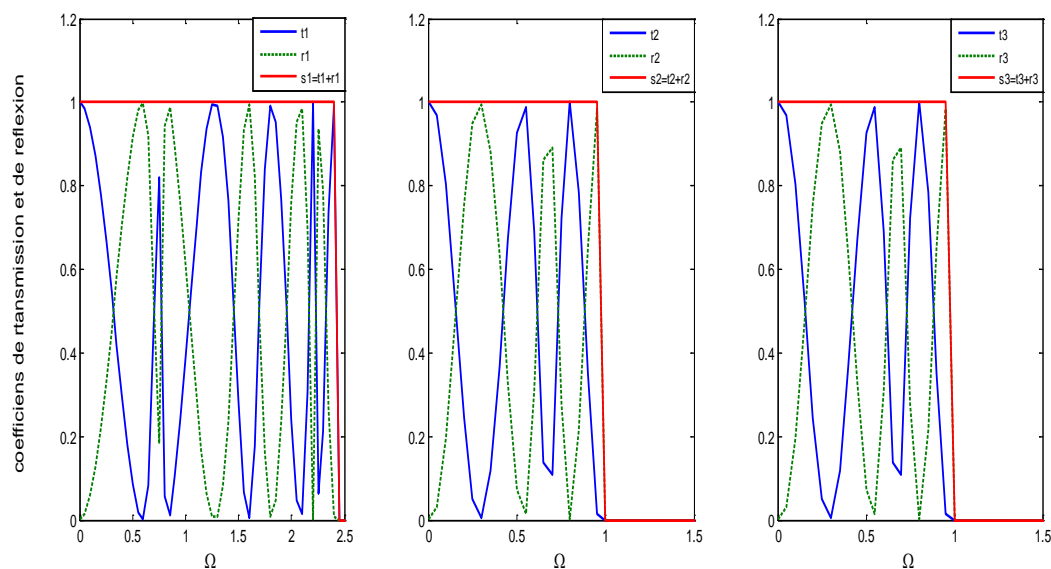
B.2/masse identique $e = 1$ 

Figure (3.B.2.a) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

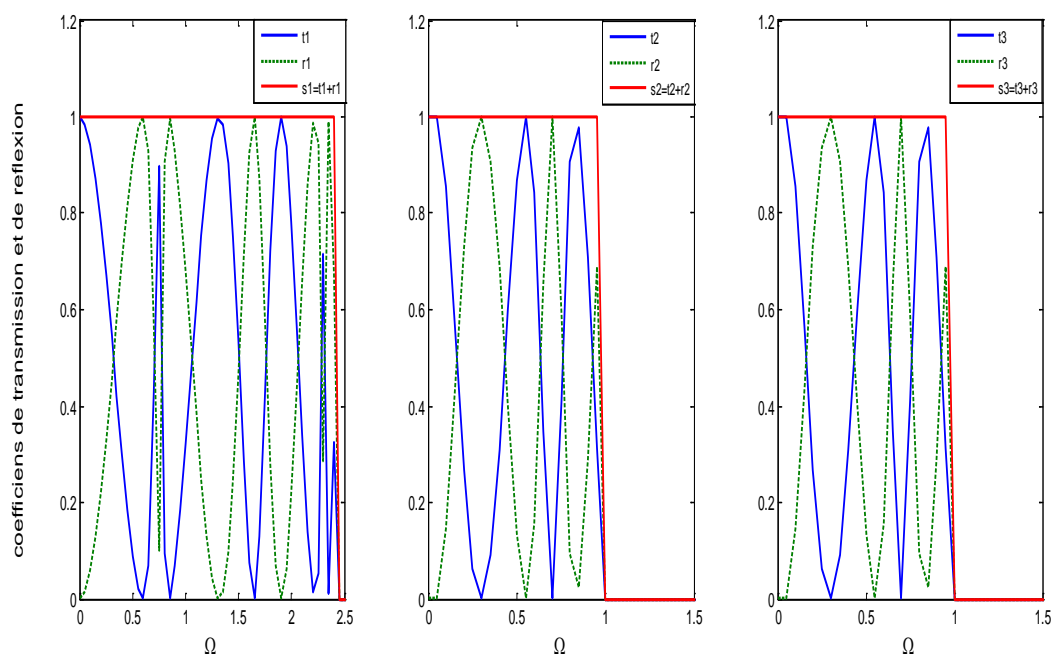


Figure (3.B.2.b) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

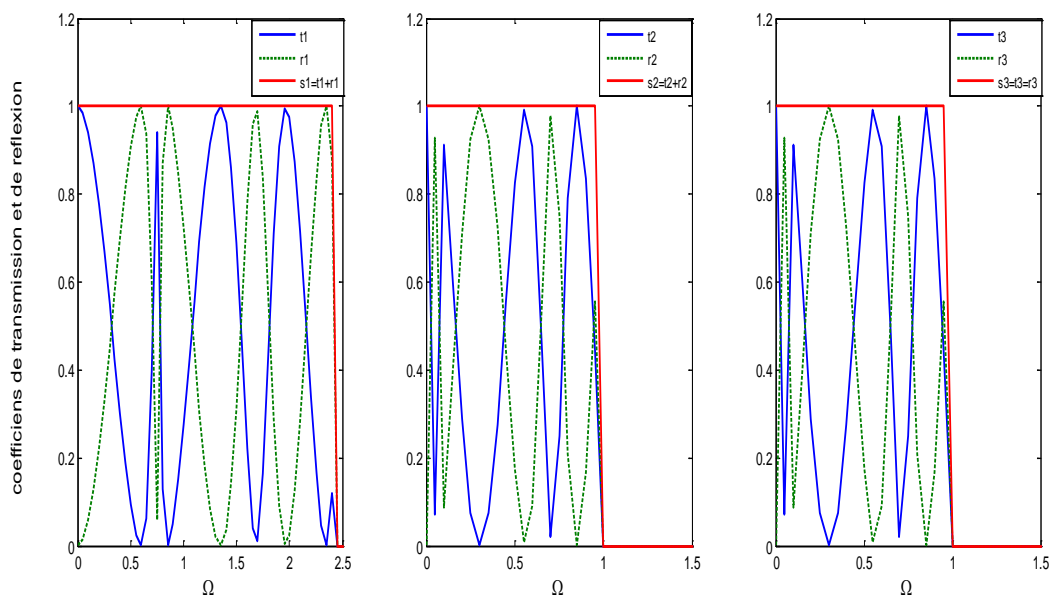


Figure (3.B.2.c) : Coefficients de transmission et réflexion d’ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas du durcissement des contraintes.

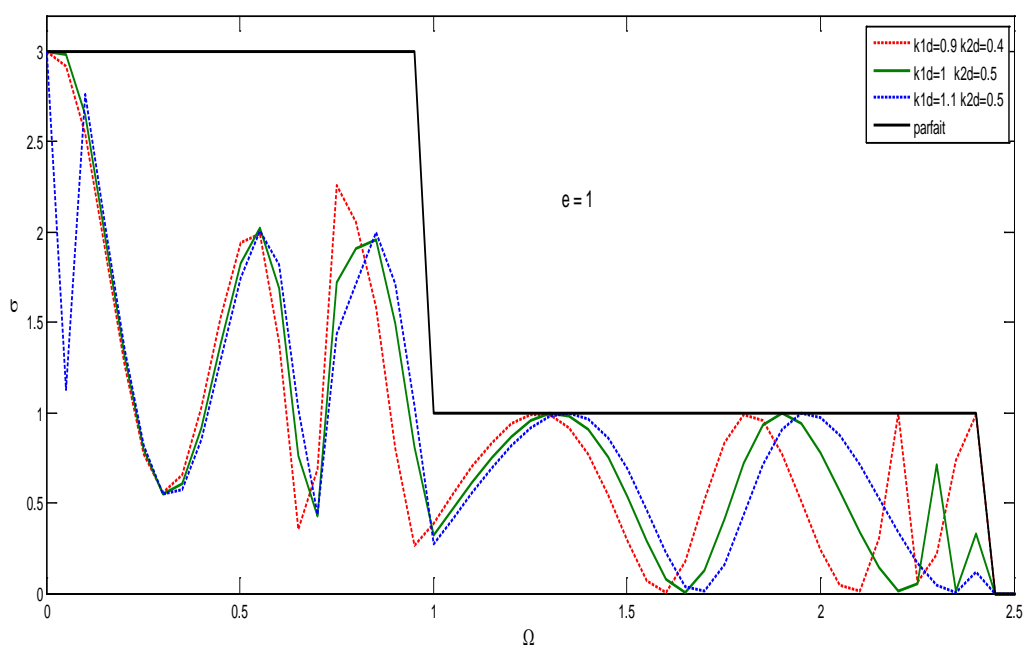


Figure (3.B.2.d) : Conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée.

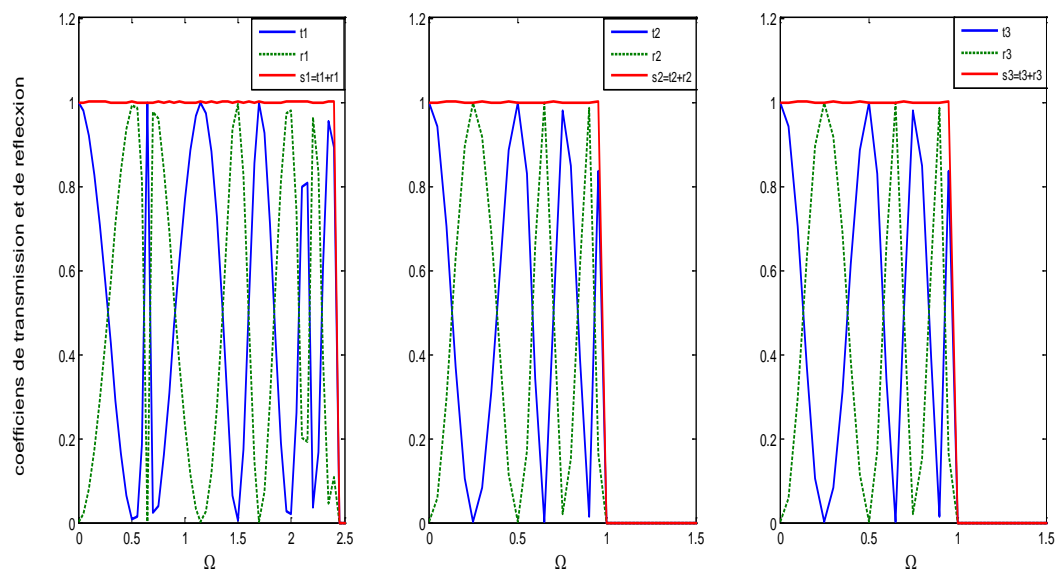
B.2/ Masses lourdes $e = 1.5$ 

Figure (3.B.3.a) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

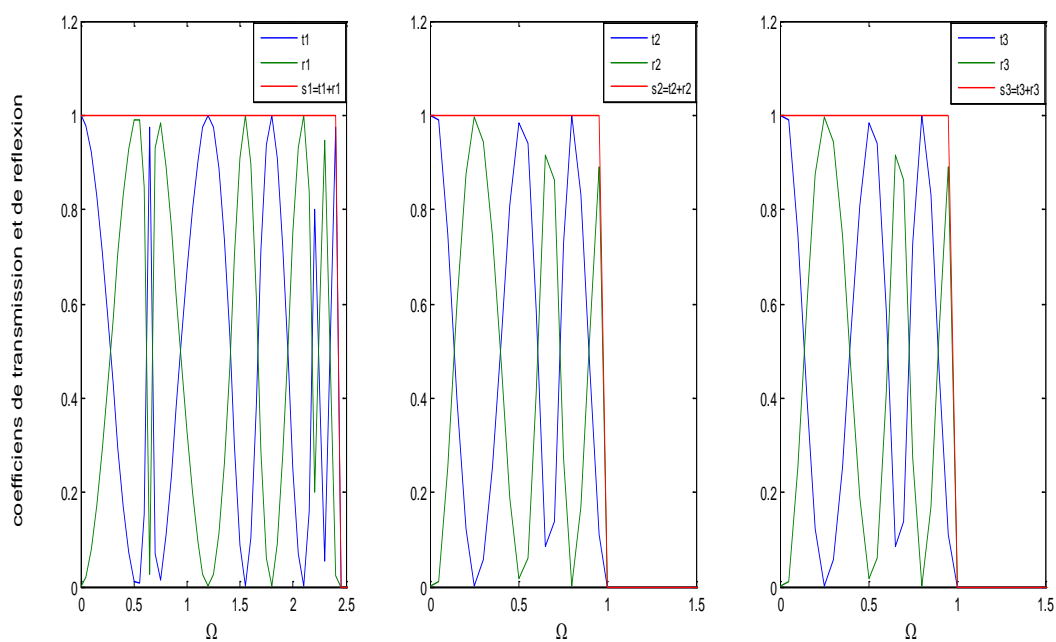


Figure (3.B.3.b) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

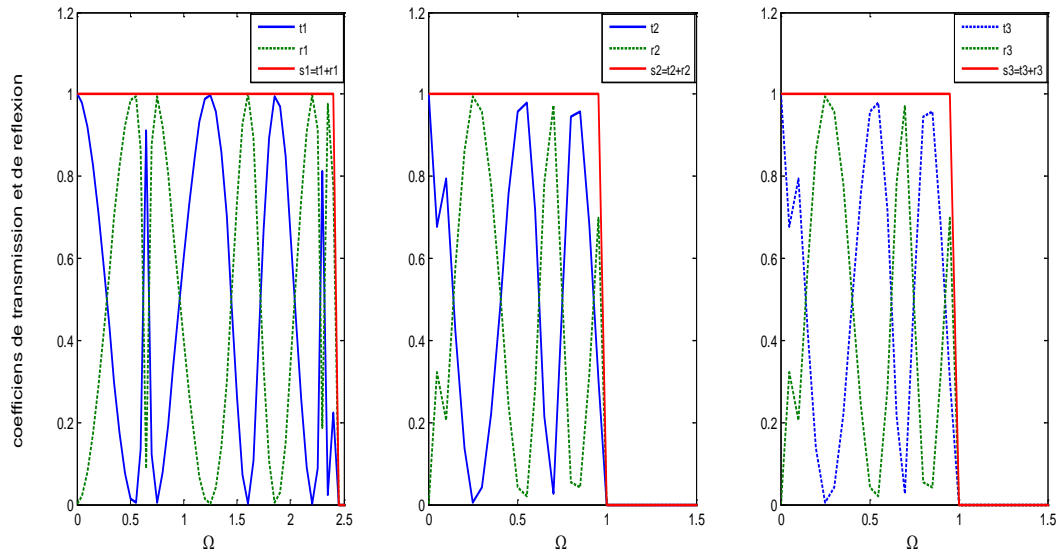


Figure (3.B.3.c) : Coefficients de transmission et réflexion d’ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas du durcissement des contraintes.

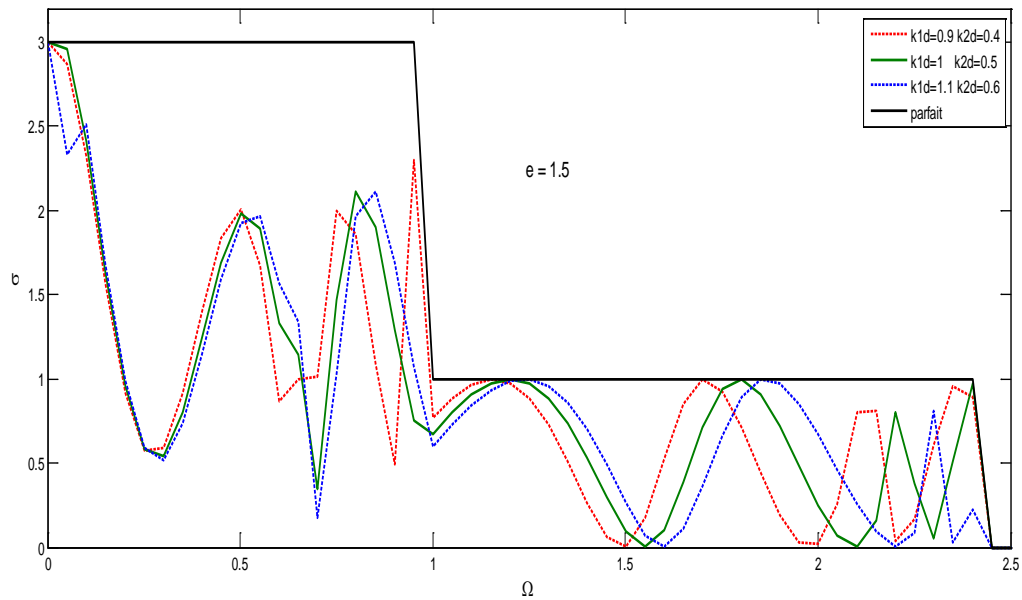


Figure (3.B.3.d) : Conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée.

III-4-2.3. Discussion des résultats

Nous avons représenté sur les figures (3.B.1.2.3), l'évolution des coefficients de transmission et de réflexion en fonction de la fréquence normalisée pour la deuxième interface, la première remarque importante est la présence de plusieurs pics de résonance dans toutes les figures pour les trois modes choisis, inexistante dans le premier cas. Ces résonances sont dues aux intercalations entre le continuum et les états résonants autour des interfaces insérées.

Dans le mode 1, on constate que : la transmission est maximale pour une fréquence nulle puis elle présente une série d'oscillations irrégulières et asymétriques qui peuvent s'annuler pour certaines fréquences. Une légère similitude des courbes sur tout l'environnement élastique. Par contre, le nombre de pics est important dans le cas des masses lourdes contrairement aux masses identiques et légères,

Pour les modes 2 et 3, le nombre de pic est légèrement important dans le cas du durcissement des contraintes pour tous les types de masses, en outre dans d'autres cas les courbes sont similaires à celles du premier mode.

Il résulte de la figure (3.B.1.2.3, d) correspondant à la variation de la conductance en fonction des fréquences que toutes les conductances commencent par une valeur égale à 3 et s'annule à la limite de la fréquence permise. On constate aussi que l'allure est de même pour tout type de contraintes à l'exception de cas dur pour des basses fréquences où on trouve une diminution, puis une augmentation dans une plage bien réduite de la fréquence.

La même observation pour les deux autres types de masses, sauf qu'à partir de Ω (dont les valeurs sont supérieures) à 0,5, on trouve qu'un léger décalage de la courbe de cas douce puis homogène et enfin dure vers les hautes fréquences, donc on peut aussi dire que dans ce deuxième cas l'effet de la masse sur la conductance est visible que dans les moyens et hautes fréquences.

III-4.3. Interface de type A/couche 3B/A

III-4-3.1. Description du modèle

Dans cette partie, nous avons encore augmenté de deux le nombre de plan du matériau B insérée dans le matériau A pour avoir un système qui contient trois plans d'un matériau B de structure CS entre deux structure semi infini d'un matériau A, qui est aussi de structure CS (fig.3.3).

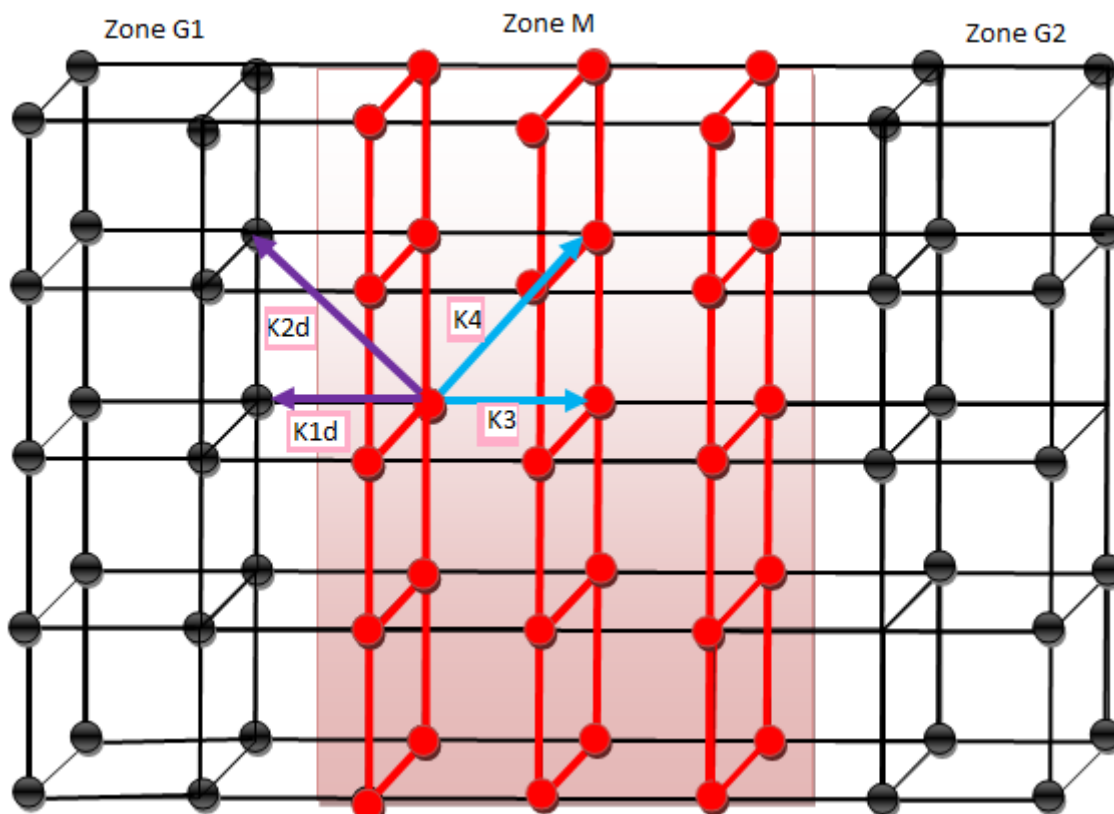


Figure (3.3) : Représentation schématique du troisième système sandwich de type A/couche 3B/A

Toujours dans le but de comprendre l'influence de nombre de plans insérer dans un matériau sur la diffusion d'une onde incidente suivant la direction $[001]$, nous avons suivit la même procédure faites pour l'étude des deux systèmes précédents et nous avons tracé sur les figures si dessous les spectres de transmission et de réflexion ainsi que ceux des conductances obtenus, pour différent cas de masses et différent cas de constantes de force.

III-4-3.2. Courbes des spectres de vibration

C.1/Masse légère $e = 0.5$

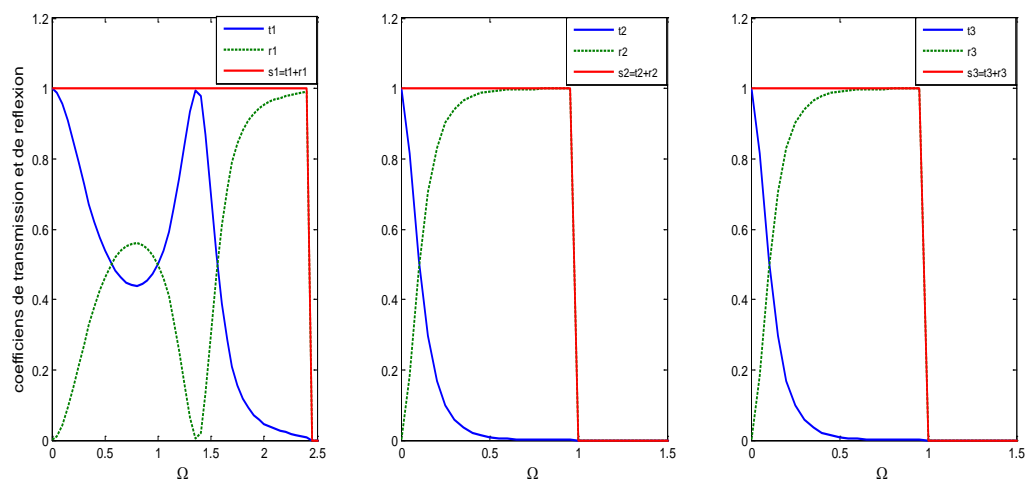


Figure (3.C.1.a) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

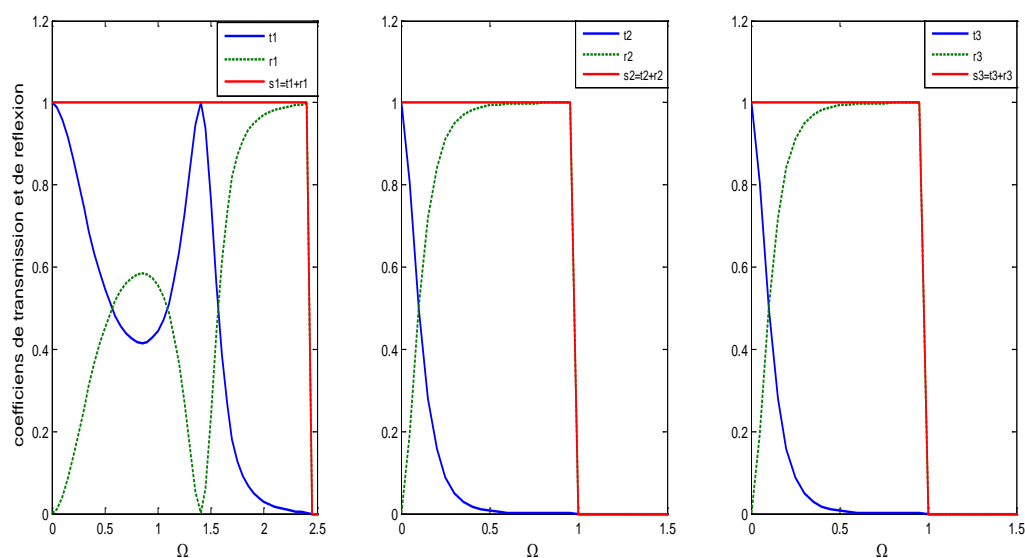


Figure (3.C.1.b) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

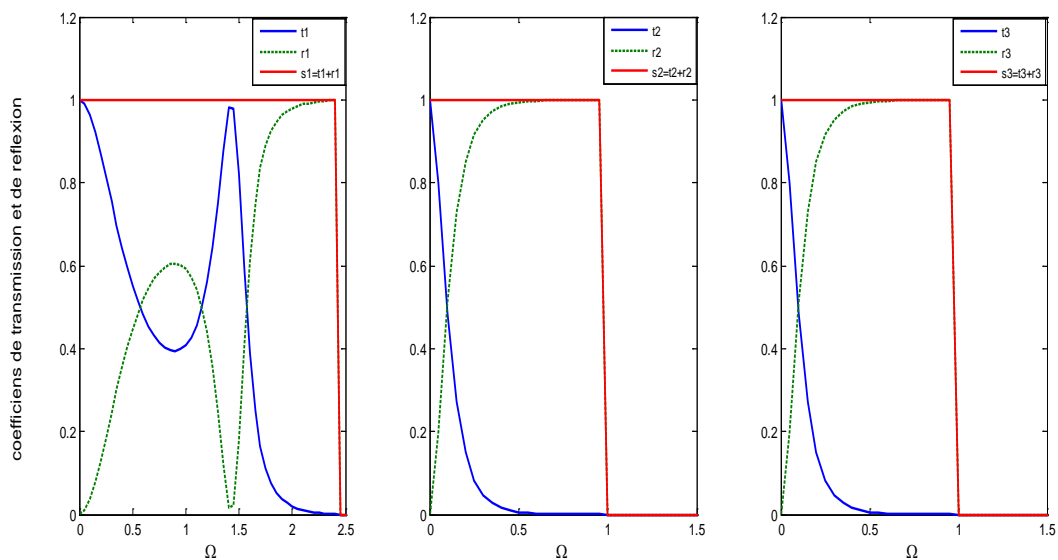


Figure (3.C.1.c) : Coefficients de transmission et réflexion d’ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas du durcissement des contraintes.

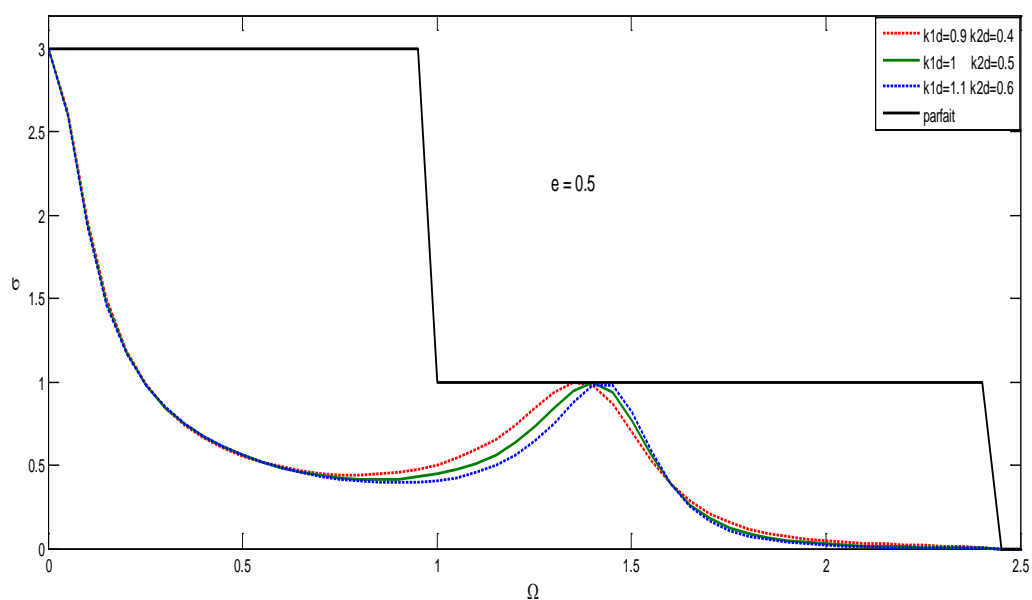


Figure (3.C.1.d) : Conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée.

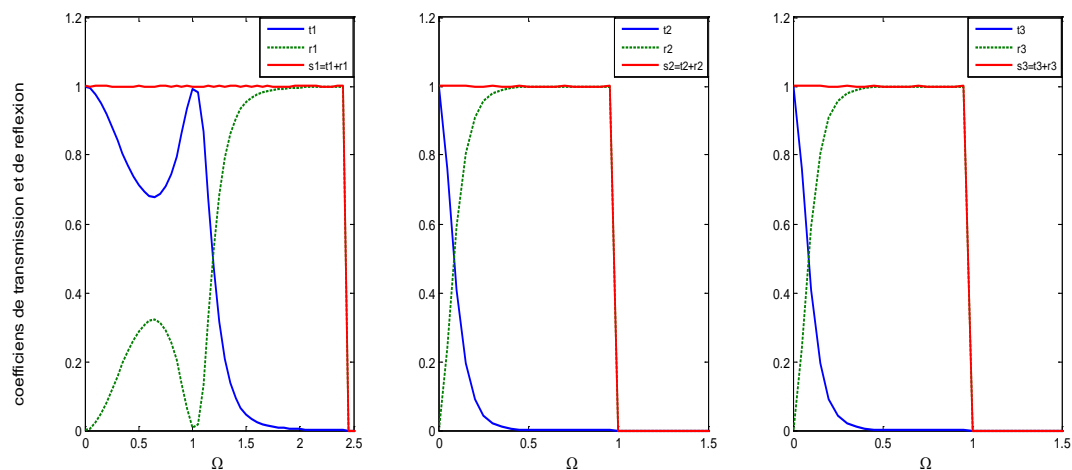
C.2/ Masse homogène $e = 1$ 

Figure (3.C.2.a) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

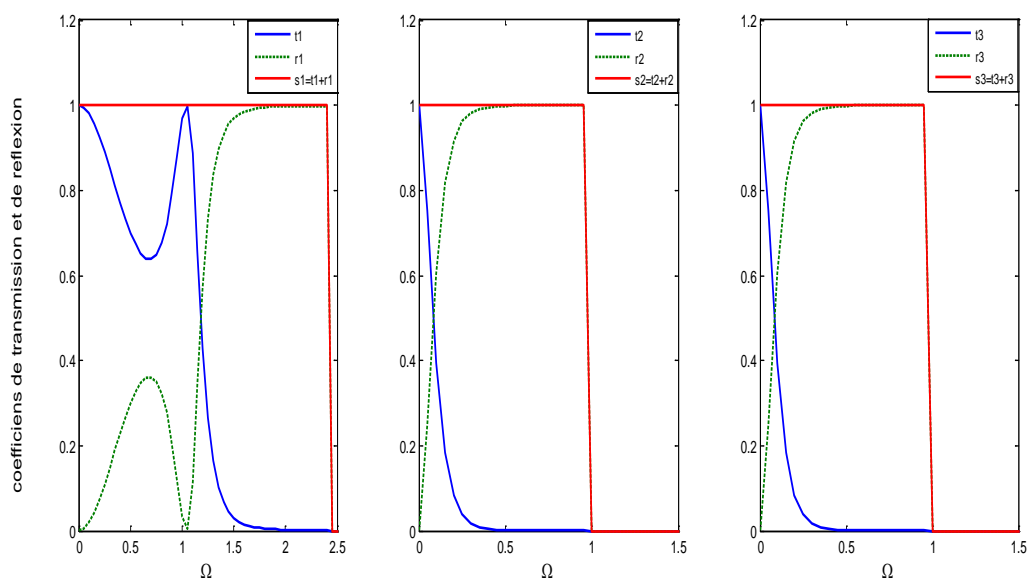


Figure (3.C.2.b) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

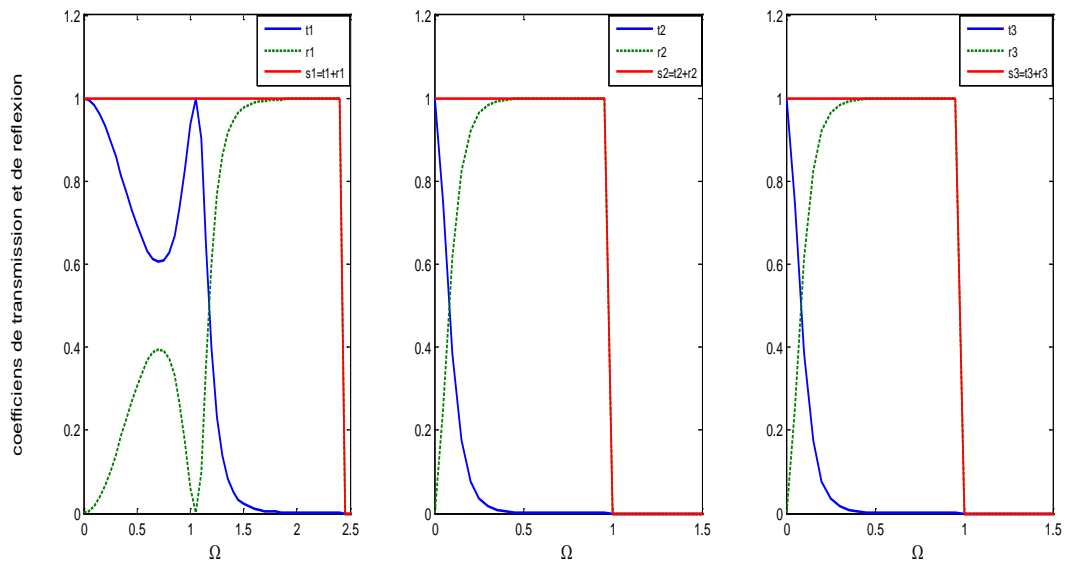


Figure (3.C.2.c) : Coefficients de transmission et réflexion d’ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas du durcissement des contraintes.

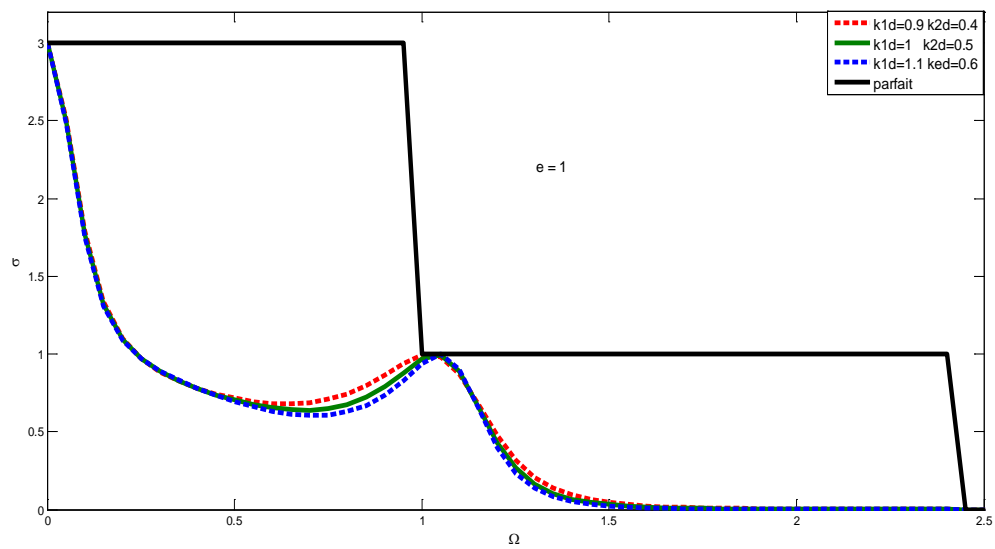


Figure (3.C.2.d) : Conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée.

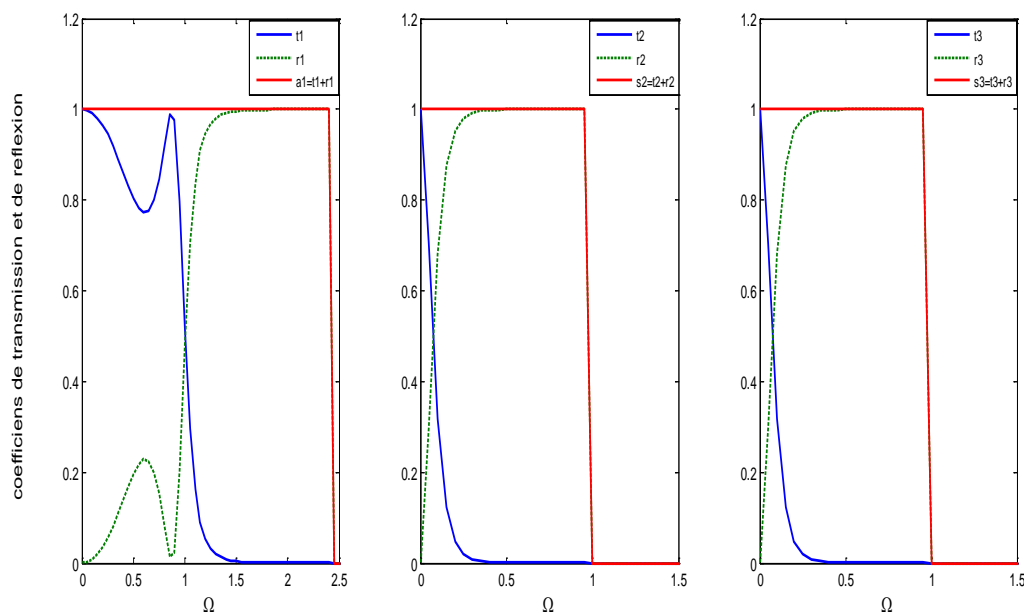
C. / Masse lourde $e = 1.5$ 

Figure (3.C.3.a) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'adoucissement des contraintes.

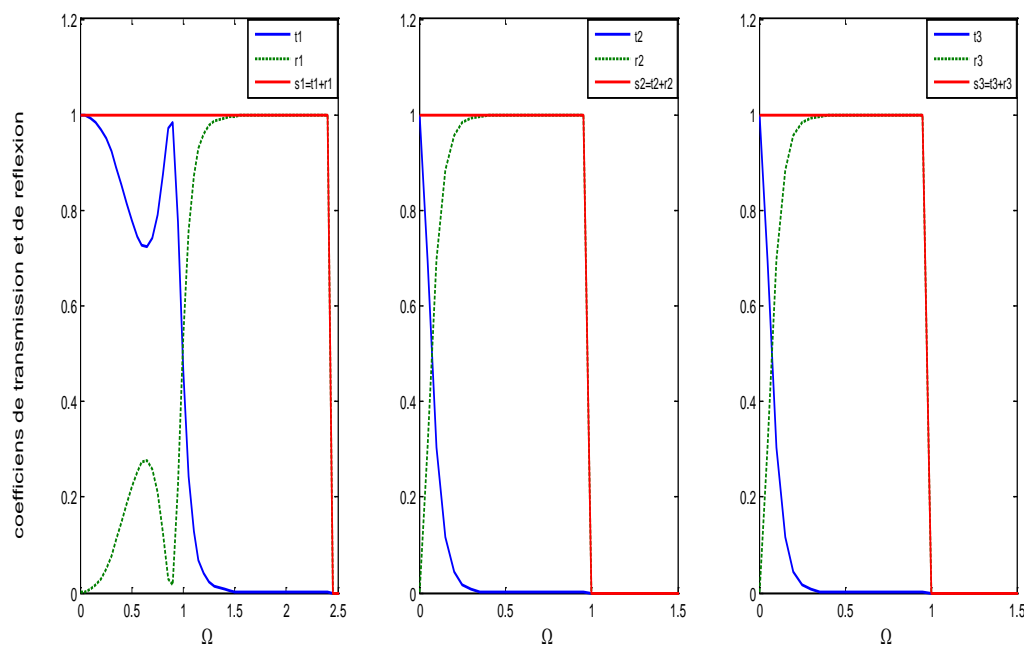


Figure (3.C.3.b) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas de l'homogénéité des contraintes.

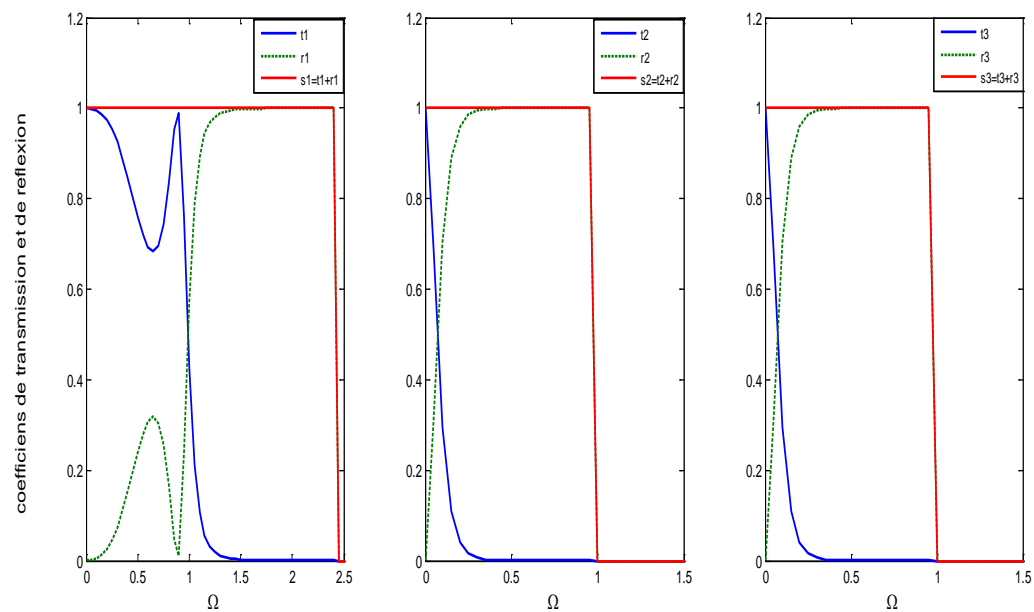


Figure (3.C.3.c) : Coefficients de transmission et réflexion d'ondes élastique en fonction de Ω , dans le cas du durcissement des contraintes.

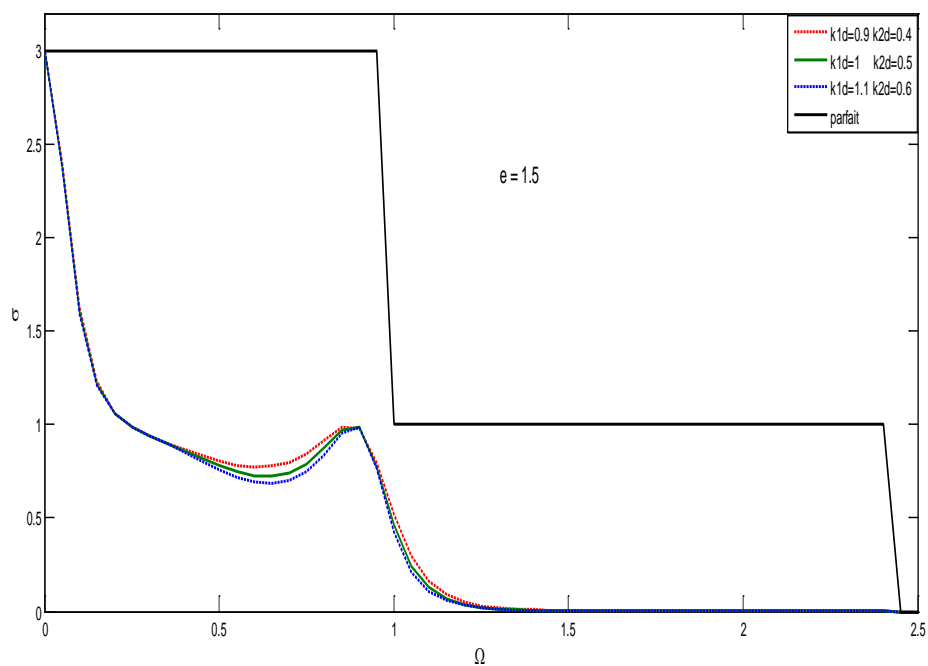


Figure (3.C.3.d) : Conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée.

III-4-3.3. Discussion des résultats

La probabilité de la transmission et la réflexion dans le troisième cas de défaut se limite comme les deux cas précédents aux domaines de propagation permis pour les trois modes. Pour le mode 1, on constate que l'allure de la courbe d'évolution de la transmission en fonction de la fréquence de propagation est presque la même pour les trois masses différentes et sur tout l'environnement élastique.

Les courbes sont composées de deux intervalles, un intervalle où $\Omega \in [0,1,5]$ et $\Omega \in [1,5,2,5]$ pour les masses légères et $\Omega \in [0,1]$ et $\Omega \in [1,2,5]$ pour les autres cas.

La différence se résume dans la valeur minimale de la transmission obtenue et la fréquence qui correspond aux pics enregistrés pour chaque cas.

La valeur minimale de la transmission est plus importante dans le cas des masses légères, contrairement aux masses homogènes et lourdes, ainsi que la fréquence correspondante aux pics de transmission se décale vers les petites fréquences en fonction de la densité massique des atomes.

La deuxième étape, la transmission se décroît jusqu'à son annulation à la limite des hautes fréquences avec une allure similaire pour tous les cas de masse et l'environnement élastiques. Pour les modes 2 et 3, le comportement de la transmission est particulier ; en effet on remarque que la transmission est égale à l'unité pour une fréquence nulle puis commence à s'accroître jusqu'à son annulation à partir de Ω égale à 0,5. On dira que le défaut joue le rôle d'un miroir dans cette étape.

L'évolution de la conductance phononique dans ce cas est très particulière, en effet, elle est similaire sur tout l'environnement élastique, par contre, la différence réside sur l'impact de la densité massique des atomes sur la fréquence correspondante à l'annulation de la conduction phononique, c'est-à-dire : tant que la masse des atomes est légères la fréquence qui correspond à l'annulation de la conduction phononique est grande.

Conclusion générale

Dans ce mémoire, nous avons présenté une étude théorique à l'échelle atomique des phénomènes de diffusion d'ondes élastiques dans les systèmes de structures cubiques simple (CS) présentant des interfaces, dans le cadre de l'approximation des forces centrales.

Pour étudier l'influence de ces interfaces sur les phénomènes de transport des phonons, nous avons employé la méthode de raccordement, en injectant dans les simulations numériques les différents paramètres des jonctions (constantes de forces et masses des atomes).

Les résultats obtenus montrent que la brisure de symétrie causée par l'existence des défauts laisse une empreinte caractéristique sur les courbes des coefficients de transmission et de réflexions. La conductance phononique étant la somme des contributions des modes individuels de transmission en une seule courbe, on constate qu'elle est fortement dépendante de ces paramètres.

Nous avons montré que les interfaces entre deux structures à cristallisation CS laissent des empreintes sur les courbes de transmission et de réflexion, ainsi que les courbes des conductances phononique.

Les résultats numériques concernant la dynamique des matériaux de forme A/nB/A révèle que la diffusion des ondes dans ces derniers est très sensible au nombre de plans B insérées dans ces matériaux, ainsi qu'à la masse des atomes qui les constituent et la constante de force entre ces atomes. Ce qui montre que les vibrations des interfaces constituent une signature distinctive de leur composition chimique ainsi que de leur structure et organisation.

Sur les courbes de transmission et de réflexion, on note la présence de pics de résonances de type Fano, ces derniers sont dus aux interactions entre les états propageant du système et les nouveaux états localisés créés au voisinage de l'interface. L'amplitude de ces résonances est fortement dépendante des fréquences excitatrices, des constantes de forces de liaison interatomique du système et de la masse des atomes qui constituent l'interface.

La présence d'interfaces dans une structure peut jouer le rôle d'un filtre sélectif pour certaines ondes. Ils permettent ainsi d'apporter une réponse complète sur la morphologie de l'interface sur les propriétés vibrationnelles des atomes dans les systèmes.

La maîtrise parfaite des systèmes en présence d'interfaces va contribuer à la fabrication et la production de matériaux améliorés, moins coûteux, plus légers et de caractéristiques plus fiables.

Comme perspectives nous citons :

- Augmenter le nombre de paramètres décrivant les interactions entre atomes, et tenir compte des interactions à plus longues portées.
- Il serait intéressant de faire varier la température des systèmes afin d'étudier la diffusion en fonction de la température (étudier le transport thermique).

Références

- [1] M. BOUCHERRAB, Thèse de doctorat, Université de M. Mammeri (2015)
- [2] R. CHADLI, Thèse de doctorat, Université de M. Mammeri (2012).
- [3] O. NAFFA, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri (2010)
- [4] R. Landauer, Philos B .68, 217 (1970).
- [5] R. Landauer, Z. Phys B. 68, 217 (1987).
- [6] Buttiker. Phys. Rev. Lett, 57. 1761 (1986)
- [7] K. L. Shepard, M. L. Roukes, et B. P. Van dergaag, Phys. Rev. B46, 9648 (1992).
- [8] Tekman et P. F. Bagwel, Phys. Rev. B48, 4 (1999).
- [9] C. Berthod, F. Gagel, et K. Maschke, Phys. Rev., B50, 18299 (1994).
- [10] A. Khater et W. Czaja, Physica. B 167, 33 (1990).
- [11] A. Khater, N. Auby et D. Kechrakos, J. Phys. condens. Matter 4.3743 (1992).
- [12] B. Djafari-Rouhani, P. Masri, L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 15, 5690 (1977).
- [13] Akjouj. A, Doberzenski L, Djafari-Rouhani B, Vasseur J. O. and Kushwaha M. S Euro. Phys. Lett, 41 321 (1998).
- [14] A. A. Maradudin, R. E. Wallis et L. Dobrzynski, Hand Book of surfaces and interfaces, Garland, New York Vol 3 (1980).
- [15] R. E. Allen, G. P. Alldrege, et FW DE Wette, Phys. Rev, Vol. 4, 1648 (1971).
- [16] J. E. Black et P. Bopp, surf. Sci. 140, 275 (1984).
- [17] A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G.H. Weiss et Ipatova, Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Press, New York and London P 950 (1971).
- [18] L. Dobrzynski et Mills, J.Phys. chem. Solids 30, 1043 (1969).
- [19] P. Masri, G. Allan et L. Dobrzynski, J. de Phys. 33, 85 (1972).
- [20] G. Treglia et M. C. Desjonqueres, J. Physique 46, 987 (1985).
- [21] A. Virlouvet, A. Khater, H. Aouchiche, O. Rafil et K. Mascke Phys. Rev. B 59, 4933 (1999).
- [22] M. Belhadi, O. Rafil , R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, K.Mascke, Europeen Phys. Journal B15, 435-443 (2000)
- [23] A. Kather. O.Rafil.Y. Labaye et Y. Pennec. Solid State Communication. Vol. 87. N1, 53 (1993).
- [24] R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil, M. Belhadi et J. Hardy Phys. Stat. Soli. (b) 239, N1, 144-151 (2003).
- [25] A. Khater, H. Grimech, J. Lapujoulade et F. Fabre, Surf. Sci. 251/ 252, 381 (1991).

Résumé :

Dans ce travail, nous avons fait une étude théorique à l'échelle atomique des phénomènes de diffusion d'ondes élastiques dans les systèmes de structure cubique simple en présence d'interfaces, dans le cadre de l'approximation harmonique en utilisant un modèle des forces centrales. Pour étudier l'influence des interfaces sur les phénomènes de transport des phonons dans ces systèmes nous avons utilisé la méthode de raccordement pour différents paramètres des jonctions (constantes de force et masses des atomes). Des programmes de calcul ont été élaborés, permettant la détermination du comportement de la diffusion dans ces matériaux. Nous avons montré que les interfaces entre deux structures à cristallisation cubique simple laissent des empreintes sur les courbes de transmission et de réflexion, ainsi que les courbes des conductances phononiques. L'analyse des spectres obtenus par les expériences de diffusion d'ondes élastiques contient des informations sur la structure. Les résultats obtenus montrent que les coefficients de transmission et de réflexion dépendent des interférences entre les ondes diffusées élastiquement par l'interface. De plus l'interaction entre les états de diffusion et les états localisés font apparaître des résonances de type Fano comme observé dans le transport électronique.

Mots clé : phonon, Interface, Diffusion d'onde élastique.

Abstract:

In this work, we did a theoretical study on the atomic scale of phenomena of diffusion of elastic waves in system cubic simple structure in the presence of interfaces, as part of the harmonic approximation using a model of the central forces. To study the influence of interfaces on the phenomena of the transport in these systems we used the method of connection for different parameters of junctions (constant force and masse of atoms). Calculation programs have been developed allowing the determination of the behavior of the diffusion in the materials. We have shown that interfaces between two structures with crystallization CS leaves footprints of the transmission and reflection, as well the curves of medium-sized phonon conductance. The analysis of spectra obtained by the experiences of elastic waves diffusion contains information about the structure. The results obtained show that the transmission and reflection coefficients depend of interfaces between the elastically diffused waves by the interface. Furthermore, interaction between the states of the diffusion and the localized states show resonance of Fano type as observed in the electronic transport.

Keywords: phonon, interface, Elastic waves diffusion.