



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET  
DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE DE BOUIRA



FACULTE DES SCIENCES ET SCIENCES APPLIQUEES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE PREPARER POUR L'OBTENTION DU DIPLOME  
DE MASTER EN PHYSIQUE

OPTION

*Physique des Matériaux et Nanomatériaux*

**THEME**

**Etude de la dynamique vibrationnelle d'un réseau  
bi-dimensionnel en présence des défauts**

**Présenté par :**

**M<sup>f</sup>**: BELACEL Abderrazak.

**M<sup>f</sup>**: MADI Hamza.

**Date de soutenance : 26 Septembre 2017**

**Devant le jury :**

**Présidente :** M<sup>me</sup>.BOUCHERRAB Malika **M.C.B** **Université de Bouira**

**Rapporteur:** M<sup>f</sup>.ZERIRGUI Djamel **M.C.B** **Université de Bouira**

**Examineur 1:** M<sup>f</sup>. KHELFANE Hocine **M.C.B** **Université de Bouira**

**Examineur 2:** M<sup>f</sup>. KHEFFACHE Sedik **M.A.A** **Université de Bouira**

# *Dédicace*

*Je dédie mon modeste travail à ma très chère maman Mebarka pour tous les sacrifices, les efforts et le soutien qu'elle a consenti pour moi et à qui je souhaite la bonne santé et qu'ALLAH la garde pour moi.*

*A mon très cher papa Massoud pour tous ces efforts, les conseils et le soutien qu'il m'a apporté durant toutes mes années d'études.*

*A mes deux chères sœurs Selma et Samia.*

*A mon cher frère Soheyb.*

*A toute la famille sans exception.*

*A tous mes camarades et mes amies : Hossem, Moussab, Mounir, Nacer, Bachir, Khaled, Abdelhakim, Saadi et Walid .*

*Je ne peux achever cette dédicace sans citer mon binôme Hamza.*

*Abdo*

# *Dédicace*

*Je dédie ce travail à mes chères parent qui m'ont donné le courage pendant toute ma vie. Pour leur sacrifice sans limite.*

*A mes frères*

*A mes sœurs*

*A toute ma famille*

*A mes collègues de travail*

*A tous mes camarades et mes amies : Hassan, Ismail, Nacim, Morad, Hamid, Omar et Walid .*

*Je ne peux achever cette dédicace sans citer mon binôme **Abdo**.*

**Hamza**

# Remerciements

Avant tout nos remerciements Allah pour nous avoir donné la santé, la force et la patience pour accomplir ce modeste travail, sans lui rien ne se fait ou ne se crée.

Nous voudrions remercier nos parents, pour leur soutien moral et leurs encouragements.

Nous tenons à remercier chaleureusement notre promoteur Dr. ZERIRGUI Djamel pour ses orientations et ses conseils.

Nous exprimons nos respects et nos remerciements aux membres de jury qui ont accepté de juger notre travail.

Un remerciement très particulier tend vers tous les enseignants de département de physique de l'université de BOUIRA.

## Liste des figures

---

<b>Figure I.1 :</b> La structure cristalline est formée de l'addition de la base (b) a chaque nœud du réseau (a). En regardant (c) on peut reconnaître la base.....	05
<b>Figure I.2 :</b> (a) Nœud d'un réseau à deux dimensions, (b) Maille élémentaire d'un réseau à trois dimensions.....	06
<b>Figure I.3 :</b> Illustration de défauts ponctuels, (a) lacune, (b) auto-interstitiel, (c) hétéro-interstitiel , (d) atome de substitution.....	09
<b>Figure I.4 :</b> Illustration de défauts linéaires,(a) dislocation coin , (b) dislocation vis.....	09
<b>Figure I.5 :</b> Illustration de défauts plans, (a)Jointde grain, (b) Macles.....	10
<b>Figure I.6 :</b> Illustration de défauts à trois dimensions, (a) Pores, (b) Précipités.....	10
<b>Figure I.7 :</b> Les réseaux de Bravais à 2 D.....	11
<b>Figure I.8 :</b> Variation de la chaleur spécifique en fonction de la température.....	20
<b>Figure I.9 :</b> Représentation schématique d'un solide cristallin semi-infini qui cite les trois régions : de défaut, de raccordement, et de volume.....	21
<b>Figure II .1 :</b> Représentation du guide d'onde parfait.....	27
<b>Figure II .2 :</b> Dispersion des modes propageant du guide d'onde parfait pour différentes valeurs de $\varphi_y$ , mode 1 ; en couleur vert, mode 2 ; en couleur violet.	30
<b>Figure II .3 :</b> courbes de dispersion du guide d'ondes parfait dans la première zone de Brillouin qui représente les deux modes pour les différentes valeurs de $\mathbf{r}$ .....	33
<b>Figure II.4 :</b> Bandes passantes de volume en (a) et (b) pour différentes valeurs de $\mathbf{r}$ .....	35
<b>Figure II.5 :</b> Bande propageante des modes transversal en (a) et longitudinal en (b) pour la valeur de $r$ fixe ( $r = 0.5$ ).....	36
<b>Figure II.6 :</b> densité d'état d'un réseau parfait pour différentes valeur de $\mathbf{r}$ .....	40
<b>Figure III.1 :</b> Schéma d'un modèle d'un système interface.....	44
<b>Figure III.2 :</b> Schéma d'un modèle par un défaut étendu.....	45
<b>Figure III.3 :</b> Schéma d'un modèle par un défaut des doubles plans.....	46
<b>Figure III.4 :</b> Densités d'états dans le cas de diffusion d'ondes élastique pour un système interface.....	53
<b>Figure III. 5:</b> Densités d'états dans le diffusion d'ondes élastique pour un défaut étendu .	54
<b>Figure III.6:</b> Densités d'états dans le cas diffusion d'ondes élastique pour un défaut à deux plans .....	55
<b>Figure III.7:</b> Etats localisés de phonons dans le cas de diffusion d'ondes élastique pour un système interface .....	56
<b>Figure III.8:</b> Etats localisés de phonons dans la diffusion d'ondes élastique pour un défaut étendu.....	57
<b>Figure III.9:</b> Etats localisés de phonons dans le cas diffusion d'ondes élastique pour un défaut à deux plans .....	58

<i>Sommaire</i>	<i>Pages</i>
Dédicace.....	i
Remerciement.....	iii
Liste de figures.....	iv
Introduction générale.....	01

### *Chapitre I : Concepts et notions de la dynamique vibrationnelle*

Introduction.....	03
I. Rappel cristallographiques.....	04
I.1. Structure cristalline.....	04
I.1.1. Vecteurs de translation et réseau.....	04
I.1.2. La base et la structure cristalline .....	05
I.1.3. Maille élémentaire du réseau .....	06
I.2. Réseau cristalline .....	07
I.2.1. Réseau direct .....	07
I.2.2. Réseau réciproque .....	07
I.2.3. Zone de Brillouin .....	08
I.3. Les défauts cristallins .....	08
I.3.1. Défauts ponctuels.....	08
I.3.2. Défauts linéaires .....	09
I.3.3. Défauts plans .....	09
I.3.4. Défauts à trois dimensions .....	10
I.4. Concept de cellule élémentaire de surface .....	10
I.4.1. Le concept de cellule élémentaire de surface .....	10
I.4.2. Réseau à deux dimensions .....	11
II. Dynamique des réseaux .....	12
II.1. Les phonons .....	12
II.2. Construction de l'Hamiltonien et approximations .....	13
II.2.1. Approximation de Born Oppenheimer .....	14
II.2.2. Approximation harmonique .....	14
III. Mode normaux de vibration des réseaux cristallins .....	15
IV. Effet des impuretés sur les vibrations du réseau .....	16

IV.1. modes localisés .....	17
IV.2. Modes normaux de vibration de surface .....	17
IV.3. Modes localisés de vibration de surface .....	18
V. Contribution des phonons à la chaleur spécifique .....	18
VI. La méthode de raccordement .....	20
VI.1. Formulation générale de la méthode de raccordement pour le calcul des modes localisés de surface .....	21
VI.2. Formulation du problème .....	22
Conclusion.....	25

## ***Chapitre II: Dynamique vibrationnelle d'un réseau parfait à deux démentions***

Introduction.....	26
I. Description du modèle .....	26
II. Dynamique vibrationnelle dans les régions loin du défaut .....	27
III. courbe de dispersion .....	29
III.1 Courbes de dispersion pour des différentes valeurs de $\varphi_y$ .....	31
III.2. Courbes de dispersions pour différentes valeurs de $r$ .....	32
III.3. Les bandes passantes et interdites .....	33
IV. Densité d'état et chaleur spécifique .....	36
IV.1. La méthode des fonctions de Green.....	36
IV.2. Calcul des densités d'état vibrationnelles .....	38
IV.3. Résultats et discussion.....	39
IV.3.1. La densité d'état .....	39
IV.3.2. chaleur spécifique.....	41
Conclusion.....	42

## ***Chapitre III: Dynamique vibrationnelles en présence des défauts***

Introduction.....	43
I. Description du modèle .....	43
I. 1. Premier cas : un système interface .....	43
I.2. Deuxième cas : un défaut étendu .....	44
I.3. Troisième cas : un défaut à deux plans.....	45
II. Matrice dynamique du système .....	47
III. Matrice de raccordement .....	50
IV. densité d'état .....	53

IV.1 Premier cas : un système interface .....	53
IV.2. Deuxième cas : un défaut étendu .....	54
IV.3. Troisième cas : un défaut à deux plans.....	55
V. Etat localisée .....	56
V.1 Premier cas : un système interface .....	56
V.2. Deuxième cas : un défaut étendu .....	57
V.3. Troisième cas : un défaut à deux plans.....	58
VI. Discussion et analyse des résultats obtenus .....	59
VI.1 .Les densités d'états phononiques .....	59
VI.2. Les états localisés.....	60
Conclusion.....	62
Conclusion générale.....	
Références bibliographiques.....	
Résumé.....	

## Introduction Générale

La présence de défauts réticulaires dans les structures cristallines affecte substantiellement leurs propriétés dynamiques, thermodynamiques et cinétiques. Les phénomènes de résonance induits dans l'étude de telles structures désordonnées par la diffusion d'ondes élastiques présente un intérêt considérable du fait que les effets produits peuvent être observés expérimentalement. Plusieurs chercheurs [1] s'y sont investis, depuis les années 80, pour comprendre principalement le rôle joué par le désordre sur les phénomènes de diffusion et de localisation.

L'objectif de notre travail est une étude théorique des états vibrationnelles et de la propagation d'ondes élastiques dans des systèmes bi-dimensionnels en présence de défauts atomique, à partir d'une structure modèle. Ce travail porte sur le développement et l'application des méthodes analytiques et de simulation numérique.

Cette étude permet en utilisant des programmes de simulation adaptés « **MATLAB** », de réaliser des simulations numériques basées sur des algorithmes d'analyse numérique, pour déterminer les différentes courbes de phénomènes étudiés.

Le but est de relever l'impact de défauts atomiques sur la dynamique des systèmes tubulaires. Nous nous intéressons particulièrement, à trois types de défauts atomiques : le premier est constitué de deux structures d'un réseau parfait qui sont reliées l'un à l'autre, ces structures sont constituées des atomes différents, c'est-à-dire,  $m_1$  pour une structure, et  $m_2$  pour l'autre, ensuite nous examinerons le cas d'un réseau parfait séparés par un défaut sous la forme d'un plan, le troisième cas est un réseau parfait séparés par deux plans identiques.

Dans le premier chapitre de ce mémoire, nous avons rappelé quelques généralités et concepts de base conçues pour l'étude des surfaces, et de cristallographie. Ainsi, nous avons cité les différentes définitions et notions sur l'étude de surface, les notations utilisées pour décrire les structures des systèmes surface.

Le second chapitre traite la dynamique vibrationnelle d'un guide d'onde parfait. On définit les courbes de dispersion des phonons, et leurs modes propagateurs et évanescent, ainsi que les bandes passantes et interdites.

Le troisième chapitre est consacré à la détermination des états localisés ainsi que les densités d'états des ondes vibrationnelles. La première partie présente les différents modèles

pour les trois défauts, où nous avons appliqué la méthode de raccordement pour déterminer la matrice dynamique de système ainsi que la matrice de raccordement.

Dans la deuxième partie nous étudions l'état de propagation d'ondes élastiques et l'évolution des courbes des états localisés de phonons et densités d'états en fonction des constantes de forces.

Nous déterminons ce travail par une conclusion générale dans laquelle, nous résumons l'essentiel de nos résultats.

## Introduction

Les atomes dans un solides cristallin, sont placés de manière très ordonnées, 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** » [2].

Ces atomes dans les cristaux s'organisaient pour former des structures cristallines bien définies. Si on se place à 0 K, les atomes sont fixes dans leur position d'équilibre. Étant 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. Ces vibrations ont des conséquences directes sur les propriétés des solides (chaleur spécifique, fusion, conductivité thermique)[3].

A ces vibrations atomiques sont associer des quasi-particules appelés « phonons ». La phase solide, et plus particulièrement la phase cristalline est un milieu propice à la propagation de phonons.

Dans ce chapitre, nous traiterons de la dynamique de réseau dit « **Lattice Dynamic** » utilisé pour calculer la dynamique vibrationnelle des atomes dans la structure d'un cristal. La caractérisation des modes de vibration de ces atomes permet de faire un lien entre ces vibrations et la structure du réseau étudié [3].

Nous terminons ce chapitre par un rappel de principe de la méthode de raccordement utilisé dans ce travail.

## I. Rappels cristallographiques

### I.1. Structure cristalline

Un cristal idéal peut être construit par une répétition régulière de la maille élémentaire dans tout l'espace. Dans les cristaux les plus simples connue ; le cuivre, l'argent, le fer, l'aluminium et les alcalins, l'unité structurale contient un seul atome. Mais la plus petite unité structurale d'un cristal peut également être constituée d'un grand nombre d'atomes ou de molécules.

On décrit la structure de tous les cristaux par un réseau périodique ; à chaque nœud de réseau est attaché un groupe d'atomes. Ce groupe est appelé la base ; elle est répétée dans l'espace pour former le cristal.

#### I.1.1. Vecteurs de translation et réseau

Le réseau est défini par trois vecteurs de translation fondamentaux  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  de telle manière que l'arrangement atomique soit identique autour d'un point  $\vec{r}$  ou autour de tout point :

$$\vec{r}' = \vec{r} + u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3 \quad (\text{I.1})$$

Où  $u_1, u_2, u_3$  sont des entiers arbitraires.

L'ensemble des points  $\vec{r}'$  définis par (I.1) pour toutes les valeurs des entiers  $u_1, u_2, u_3$  définit **un réseau**. Un réseau est un arrangement périodique régulier de points dans l'espace. Un réseau est une abstraction mathématique : la structure cristalline n'est formée que lorsque l'on attache la même base d'atomes à chaque nœud du réseau. La relation logique est la suivante :

**réseau + base = structure cristalline.**

Le réseau et les vecteurs de translation  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  sont dits primitifs si un couple quelconque de points  $\vec{r}, \vec{r}'$  autour desquels l'arrangement atomique est identique satisfait la relation (I.1) pour un choix convenable des entiers  $u_1, u_2, u_3$ . Cette définition des vecteurs de translation primitifs garantit qu'il n'y a pas de maille de plus petit volume pouvant servir à construire la structure. Nous utilisons souvent les vecteurs de translation primitifs pour définir les axes cristallins, bien que des vecteurs non primitifs puissent cependant être utilisés lorsqu'ils sont plus simples. Les axes cristallins  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  forment les trois arêtes adjacentes d'un parallélépipède. Si les nœuds du réseau sont situés uniquement aux sommets du parallélépipède, ce dernier est un parallélépipède primitif, on dit que l'on effectue une

translation du réseau lorsque l'on déplace le cristal parallèlement à lui-même par un vecteur de translation du cristal :

$$\vec{T} = u_1 \vec{a}_1 + u_2 \vec{a}_2 + u_3 \vec{a}_3 \quad (\text{I.2})$$

Deux points quelconques du réseau sont reliés par un vecteur de ce type.

Dans la description d'une structure cristalline, on doit toujours répondre à trois questions importantes : Quel est le réseau ? Quels axes cristallins  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  voulons-nous utiliser pour décrire le réseau ? Quelle est la base ?

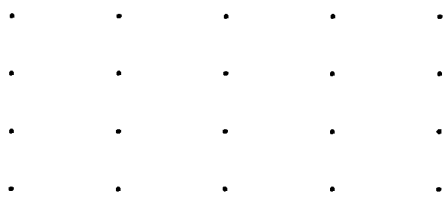
Il y a toujours plus d'un réseau possible pour une structure donnée et plus d'un système d'axes cristallins possible pour un réseau donné. Nous ne pouvons pas déterminer la base avant d'avoir choisi le réseau et les axes que nous désirons utiliser. Quel que soit le choix des axes cristallins, si la base a été correctement déterminée en fonction de ces axes on obtient les mêmes résultats (ainsi pour les diagrammes de diffraction de rayons X).

### I.1.2. La base et la structure cristalline

À tous les nœuds du réseau, on attache une base d'atomes ; chacune d'elles doit être identique en composition, orientation et position des atomes. Une structure cristalline est formée de l'addition d'une base à chaque nœud du réseau, voir la figure I.1.

$$\vec{r}_j = x_j \vec{a}_1 + y_j \vec{a}_2 + z_j \vec{a}_3 \quad (\text{I.3})$$

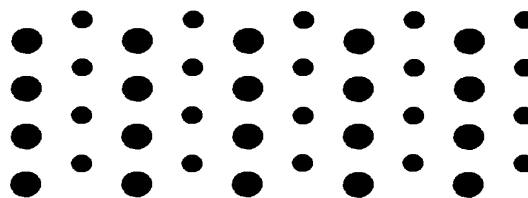
par rapport à un point du réseau. Nous pouvons nous arranger pour que  $0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1$ .



(a) Réseau spatial



(b) Base contenant deux ions différents



(c) Structure cristalline

**Figure I.1** : La structure cristalline en (c) est formée de l'addition de la base en (b) à chaque nœud du réseau en (a).

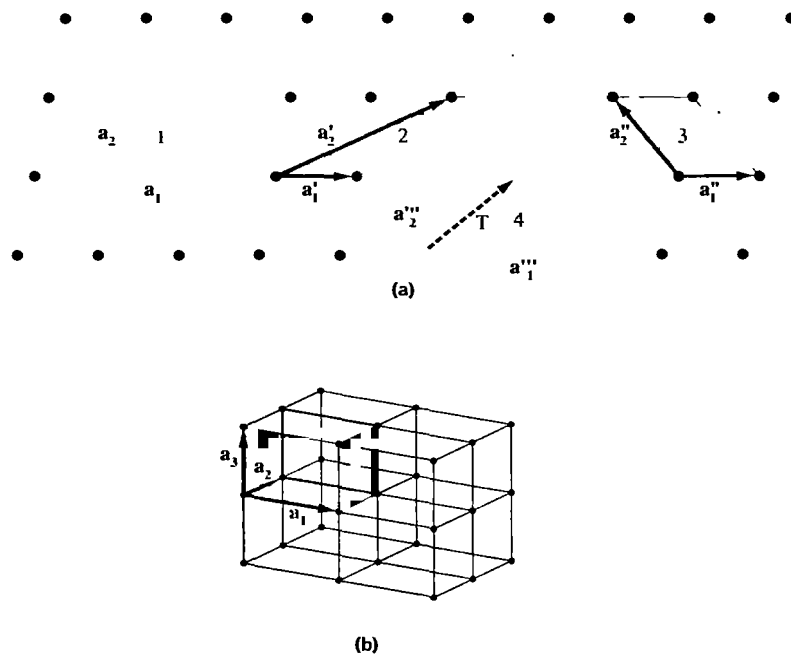
### I.1.3. Maille élémentaire du réseau

Le parallélépipède (figure I.2) défini par les axes primitifs  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  est appelé maille primitive. Une maille primitive est un cas particulier de maille, ou maille élémentaire. Une maille permet de remplir tout l'espace si on lui applique les opérations de translation cristallines convenables ; une maille primitive est une maille de volume minimal. Il y a diverses façons de choisir les axes primitifs et la maille primitive d'un réseau donné. Pour chacun de ces choix, le nombre d'atomes contenus dans la base primitive est le même. Une maille primitive ne contient qu'un seul nœud.

Le volume d'une maille définie par les axes est :

$$V_c = | \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 | \quad (\text{I.4})$$

La base associée au nœud d'une maille primitive peut être appelée base primitive. La maille ainsi formée est connue des physiciens sous le nom **de maille primitive de Wigner-Seitz**. La cellule de **Wigner Seitz** s'obtient aisément en choisissant un point du réseau et en traçant les plans bissecteurs des lignes reliant les différents voisins du point central [4].



**Figure I.2 :** (a) Nœud d'un réseau à deux dimensions.

(b) Maille élémentaire d'un réseau à trois dimensions.

## I.2. Réseau cristalline

### I.2.1. Réseau direct

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

L'état cristallin résulte de la répétition périodique dans les trois dimensions de l'espace de motifs atomiques ou moléculaires élémentaires appelés mailles.

Un cristal se caractérise, d'une part par son réseau périodique (appelé réseau de Bravais) et d'autre part par le motif attaché à chaque nœud de ce réseau. Le réseau peut être décrit par une base formée de trois vecteurs  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ .  $\alpha, \beta, \gamma$  sont les angles entre ces vecteurs pris deux, chaque nœud du réseau est alors repéré par 3 entiers relatifs  $n_1, n_2, n_3$  ( $\in \mathbb{Z}$ ):

$$\vec{L}(n) = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c} \quad (\text{I.5})$$

Les modes de répétition peuvent s'inscrire dans une classification en sept systèmes cristallins et 14 modes de réseaux, appelés réseaux de Bravais [5], en particulier 3 systèmes cubiques: cubique simple (cs), cubique centré(cc) et cubique à faces centrées (cfc).

### I.2.2. Réseau réciproque

La description des phénomènes de propagation se produisant dans une structure périodique nécessite l'introduction d'un nouveau réseau, à partir du réseau cristallin, qui en conserve les symétries. Ce réseau n'a pas de signification physique réelle, mais il est commode pour simplifier certains calculs, et indispensable pour l'interprétation des phénomènes de diffraction [6].

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

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

$$\vec{a}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{b} \wedge \vec{c} \quad \vec{b}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{c} \wedge \vec{a} \quad \vec{c}^* = \frac{2\pi}{V_c} \vec{a} \wedge \vec{b} \quad (\text{I.6})$$

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

$$\begin{aligned}
\vec{a}^* \cdot \vec{a} &= 2\pi & \vec{a}^* \cdot \vec{b} &= 0 & \vec{a}^* \cdot \vec{c} &= 0 \\
\vec{b}^* \cdot \vec{a} &= 0 & \vec{b}^* \cdot \vec{b} &= 2\pi & \vec{b}^* \cdot \vec{c} &= 0 \\
\vec{c}^* \cdot \vec{a} &= 0 & \vec{c}^* \cdot \vec{b} &= 0 & \vec{c}^* \cdot \vec{c} &= 2\pi
\end{aligned} \tag{I.7}$$

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

### I.2.3. Zone de Brillouin

La première zone de Brillouin est au réseau réciproque ce qu'est la maille primitive de Wigner-Seitz au réseau cristallin. Il est construit de la même façon que la maille primitive de Wigner-Seitz qui est la région d'espace la plus proche d'un atome que de tout autre atome du réseau cristallin.

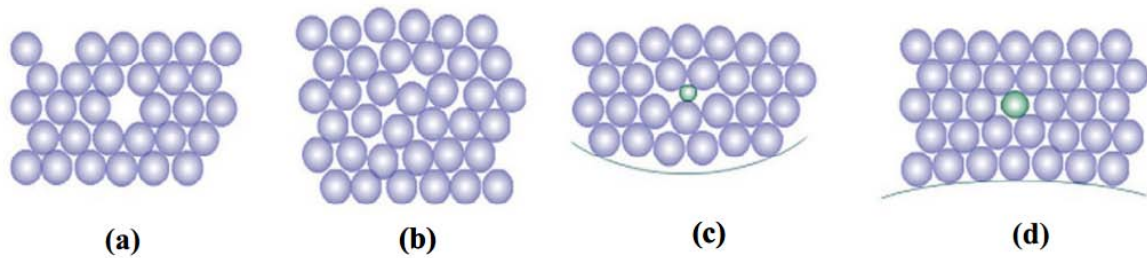
La maille primitive de Wigner-Seitz contient toutes les informations nécessaires à la périodicité du réseau cristallin [7].

## I.3. Les défauts cristallins

Dans la réalité, le cristal parfait n'existe pas. Tous les milieux cristallins présentent des défauts qui régissent une grande partie des propriétés des matériaux. Ces défauts ne doivent pas à priori être considérés comme indésirables. Au contraire, des cristaux parfaits seraient le plus souvent dénués de toutes propriétés intéressantes. On ne peut pas fabriquer par exemple des transistors avec du silicium parfait, ou bien obtenir des aimants permanents à partir de fer parfait, etc. Les matériaux vont varier selon la nature du matériau et le type de défaut. Il existe quatre sortes de défauts cristallins que nous allons décrire sommairement.

### I.3.1. Défauts ponctuels

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

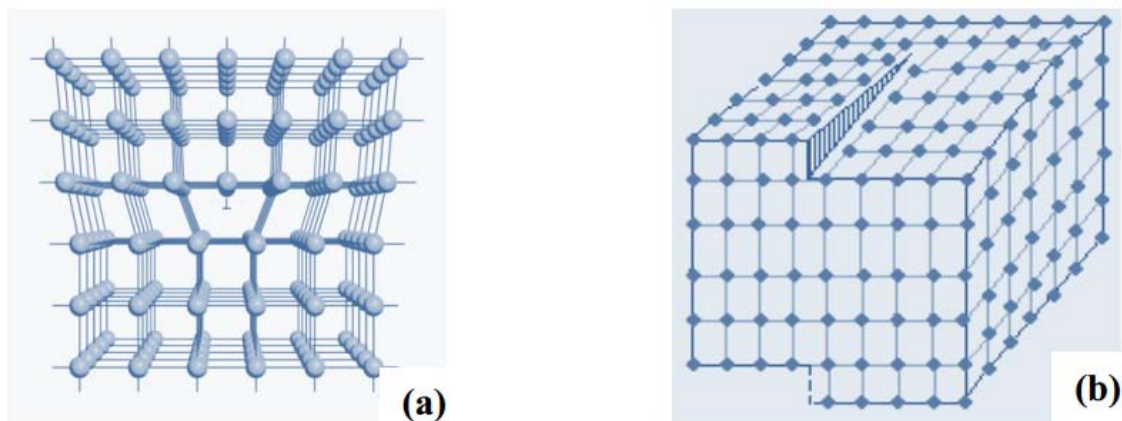


**Figure I.3 :** Illustration de défauts ponctuels [6].

(a) lacune, (b) auto-interstitiel, (c) hétéro-interstitiel , (d) atome de substitution.

### I.3.2. Défauts linéaires

Les dislocations sont des défauts linéaires, présentant une allure filiforme. Ce sont des défauts de dimension un, et résultent de la déformation du matériau : traction, contraction, torsion et conduisent à des déformations plastiques. Il exist deux type de dislocations, dislocation coin et dislocation vis. Elles sont représentées sur figure I.4 :

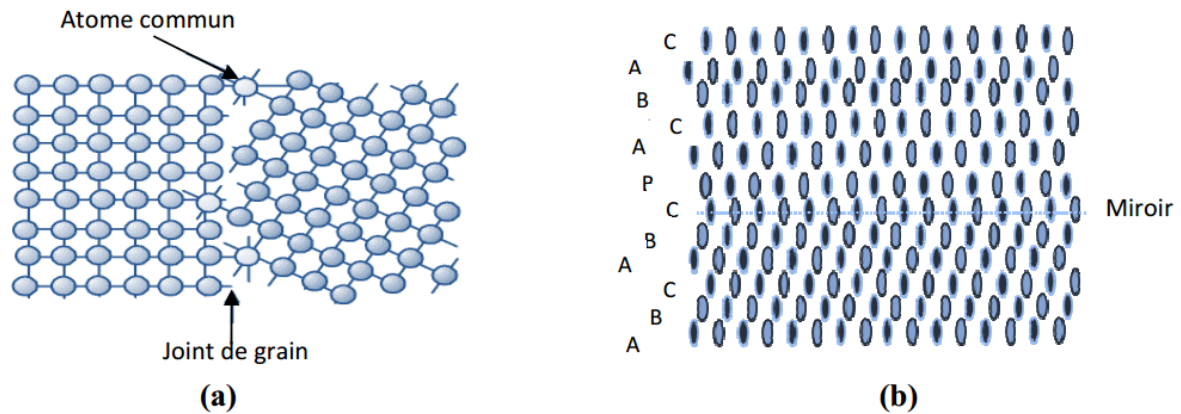


**Figure I.4 :** Illustration de défauts linéaires [6].

(a) dislocation coin , (b) dislocation vis.

### I.3.3. Défauts plans

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

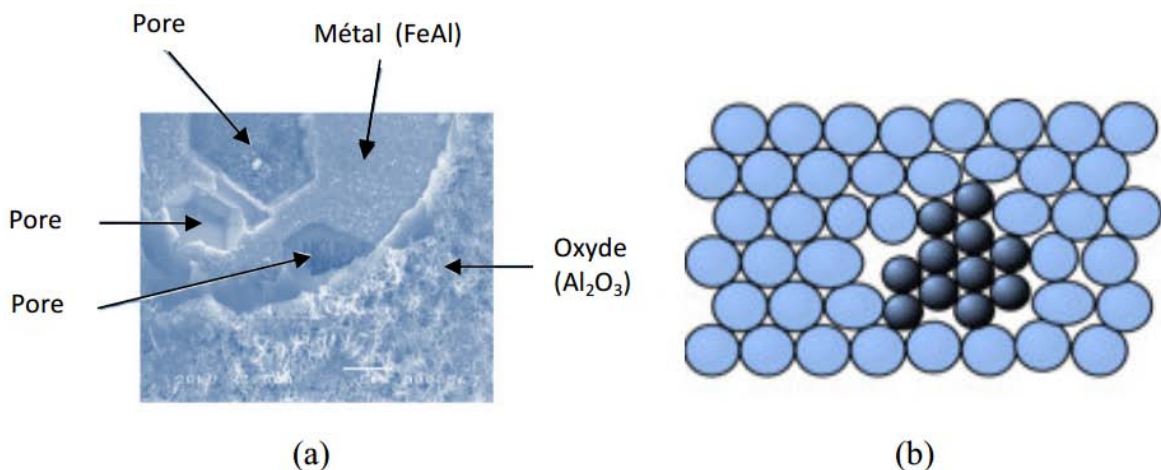


**Figure I.5 :** Illustration de défauts plans [6].

(a) Joint de grain, (b) Macles.

### I.3.4. Défauts à trois dimensions

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



**Figure I.6 :** Illustration de défauts à trois dimensions [6].

(a) Pores, (b) Précipités.

## I.4. Concept de cellule élémentaire de surface

### I.4.1. Le concept de cellule élémentaire de surface

Une cellule élémentaire (ou unitaire) de surface est définie comme étant la plus simple unité fondamentale répétée périodiquement, qui peut être identifiée dans le plan d'atomes de surface ordonnée par translation répétée de cette cellule unitaire.

### I.4.2. Réseau à deux dimensions ( $\vec{c}=\vec{0}$ )

Concept de cellule élémentaire de surface comme dans le cas d'un cristal à trois dimension, la totalité d'une surface parfaite pourra être totalement reconstruite par la répétition d'un motif d'atomes, suivant deux vecteurs de translation non coplanaires ( $\vec{a}, \vec{b}$ ). Les vecteurs  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  forment une cellule élémentaire (ou unitaire) de surface, qui est la plus simple unité fondamentale répétée périodiquement qui peut être identifiée dans un plan d'atomes de surface ordonnée. En dimensions deux, il existe seulement 5 réseaux de Bravais qui sont décrits sur la figure I.7 :

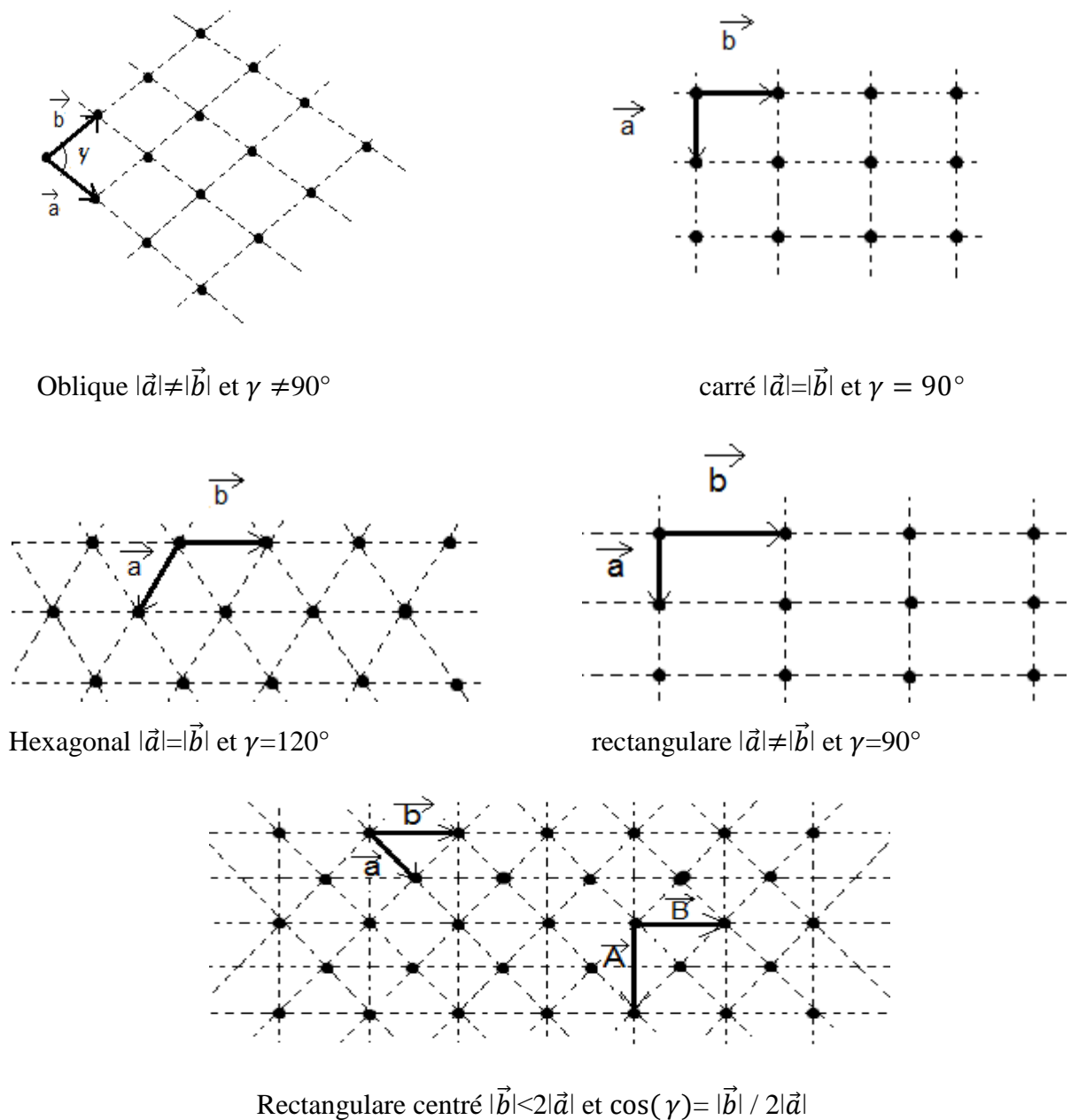


Figure I.7 : Les réseaux de Bravais à 2 D.

## II. Dynamique des réseaux

En cristallographie, des positions bien définies sont assignées aux atomes constituant le réseau. En réalité, la situation est beaucoup plus complexe et les atomes ne sont pas figés dans leurs positions [8]. En effet, le solide renferme plusieurs formes d'énergie issues essentiellement du mouvement rotatoire des molécules, du mouvement oscillatoire des atomes et du déplacement et excitation des électrons. Grâce aux forces interatomiques qui assurent la cohésion du cristal, le mouvement des atomes se transmet de proche en proche, d'où la vibration du réseau cristallin et le transport de l'énergie dans le solide. Les vibrations atomiques peuvent être d'origine thermique ou bien sous forme d'excitation électromagnétique ou d'autres excitations.

A température ambiante, l'amplitude du mouvement vibratoire des atomes est de l'ordre de 5 à 10% d'une distance interatomique. Des oscillations cristallines persistent même à (0 K). Ces vibrations ont une grande importance pour l'étude des propriétés électriques des solides car elles modifient le potentiel cristallin dans lequel évoluent les électrons, ce qui perturbe leur mouvement. Avec la dynamique du réseau, on peut décrire certaines propriétés d'un solide comme la chaleur spécifique, la dilatation thermique ou la réponse en présence d'une radiation.

### II.1. Les phonons

D'un point de vue classique, le transport de chaleur dans les solides (cristallins ou amorphes) est associé aux vibrations du réseau cristallin et à la propagation d'ondes mécaniques. D'un point de vue quantique, le concept de quasi-particules associées aux vibrations du réseau cristallin est introduit afin de rendre compte de la quantification de l'énergie dans les réseaux. Le terme phonons est alors employé pour désigner ces quasi-particules. Cette quantification, et les principes physiques de la mécanique quantique qui lui sont associés, est analogue à la quantification de l'énergie électromagnétique par les photons, ou encore à la quantification des états d'énergie des électrons ou des neutrons. Les phonons, tout comme les photons, sont des bosons dans le sens où leur masse est nulle et le taux d'occupation d'un niveau d'énergie est donné par la statistique de Bose-Einstein (eq I.8). Les phonons sont caractérisés par un couple  $(\omega, \vec{q})$ , où  $\omega$  est la fréquence angulaire et  $\vec{q}$  est le vecteur d'onde. Ils ont une énergie  $\varepsilon = \hbar \omega$  et une quantité de mouvement  $\vec{p} = \hbar \vec{q}$ . (Ou plutôt quasi-quantité de mouvement car ils ont une masse nulle), ce qui permet de traiter les interactions entre ondes élastiques et particules matérielles ou non (phonons, électrons, photons ou encore neutrons) comme des processus d'annihilation et de création de phonons.

Les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement sont alors applicables lors de ces processus. Cependant, et à la différence des photons, la symétrie de translation des cristaux impose que la quantité de mouvement est conservée à un vecteur de l'espace réciproque près. Ceci est un point fondamental pour les processus de diffusion thermique [7,9].

Les vibrations collectives dans un cristal sont par conséquent assimilées à un gaz de phonons occupant différents niveaux d'énergie. L'occupation moyenne d'un niveau d'énergie  $N(\omega, \vec{q})$  donné varie selon la statistique de Bose-Einstein :

$$N(\omega, q) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad (\text{I.8})$$

Où  $\hbar$  est la constante de Planck et  $k_B$  la constante de Boltzman.

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

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

$$H_T(\vec{r}, \vec{R}) \psi(\vec{r}, \vec{R}) = E_T \psi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (\text{I.9})$$

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

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

$$H_T(\vec{r}, \vec{R}) = T_i(\vec{R}) + U_{ii}(\vec{R}) + T_e(\vec{r}) + U_{ee}(\vec{r}) + U_{ie}(\vec{r}, \vec{R}) \quad (\text{I.10})$$

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

La complexité des systèmes à plusieurs corps s'avère très importante et l'équation obtenue ne pourra être résolue que moyennant des approximations simplificatrices [10], sur l'Hamiltonien et sur la fonction d'onde  $\psi$ .

### II.2.1. Approximation de Born Oppenheimer

L'approximation principale qui permettra de découpler le mouvement des électrons de celui des noyaux sera celle élaborée conjointement par Born et Oppenheimer en 1927 [6,11]. Elle consiste à prendre en compte l'énorme différence de masse qui existe entre les noyaux et les électrons ( $m_p=1836m_e$ ), et à considérer dans l'étude du mouvement des électrons que les noyaux sont fixes.

L'étude du mouvement des électrons nécessite un traitement quantique, tandis qu'un traitement classique permet de traiter les noyaux démunis de leurs électrons et de mettre en évidence la dynamique vibrationnelle des ions autour de leurs positions d'énergie. Ces quantas d'énergie de vibration sont les phonons définis précédemment.

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

$$H(\vec{r},\vec{R}) = U_{ii}(\vec{R}) + T_e(\vec{r}) + U_{ee}(\vec{r}) + U_{ie}(\vec{r},\vec{R}) \quad (\text{I.11})$$

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

$$\psi(\vec{r},\vec{R}) = \phi(\vec{r},\vec{R}) \varphi(\vec{R}) \quad (\text{I.12})$$

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

$$H(\vec{r},\vec{R}) \phi(\vec{r},\vec{R}) = E(\vec{R}) \phi(\vec{r},\vec{R}) \quad (\text{I.13})$$

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

### II.2.2. Approximation harmonique

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

$$E(\vec{r}_n^a) = E(\vec{R}_n^a) + \sum_{n\alpha} \frac{dE}{d\vec{r}_{n\alpha}^a} \vec{u}_{n\alpha}^a + \frac{1}{2} \sum_{n'\beta b} \frac{d^2E}{d\vec{r}_{n\alpha}^a d\vec{r}_{n'\beta}^b} \vec{u}_{n\alpha}^a \vec{u}_{n'\beta}^b + \dots \quad (\text{I.14})$$

Les exposant :  $a, b$  désignent les différentes mailles du cristal,  $n, n'$  repèrent les différents atomes de maille et les indices  $\alpha, \beta$  désignent les trois directions de l'espace ( $ox, oy$  et  $oz$ ).

$E(\vec{R}_n^a)$  est l'énergie du cristal, sans tenir compte des vibration (réseau statique) dans sa position d'équilibre. Etant constante, elle est sans intérêt pour la description des vibrations

atomiques puisqu'on s'intéresse aux variations d'énergie autour de positions d'équilibre données.

$$\frac{dE}{d\vec{r}_{n\alpha}^a} \vec{u}_{n\alpha}^a = - \vec{F}_{n\alpha} \quad (\text{I.15})$$

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

L'approximation harmonique [12-13] revient à négliger dans le développement tous les termes d'ordre supérieur à deux, on aura dans ce cas

$$E(\vec{r}_n^a) = \frac{1}{2} \sum_{n'\beta b} n\alpha a \frac{d^2E}{d\vec{r}_{n\alpha}^a d\vec{r}_{n'\beta}^b} \vec{u}_{n\alpha}^a \vec{u}_{n'\beta}^b \quad (\text{I.16})$$

Pour une paire d'atomes différents, on pose

$$\frac{d^2E}{d\vec{r}_{n\alpha}^a d\vec{r}_{n'\beta}^b} = K_{n\alpha, n'\beta}^{a,b} \quad (\text{I.17})$$

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

### III. Mode normaux de vibration des réseaux cristallins

Dans un modèle parfait du réseau cristallin, on suppose que les atomes (ou les ions) sont fixes sur les sites du réseau cristallin. Cette approximation de la configuration réelle peut être considérée comme valide à température nulle. A température non nulle, chaque ion possède une certaine énergie thermique et par conséquent présente un certain mouvement autour de sa position d'équilibre. Même à température nulle, les ions ne peuvent être immobiles (relation d'incertitude d'Heisenberg). Intéressons-nous maintenant aux vibrations du réseau cristallin. Considérons l'énergie potentielle totale d'un cristal en fonction des potentiels interatomiques.

Nous supposons qu'une paire d'atomes séparés par  $r$  ajoute une contribution  $\phi(r)$  à l'énergie potentielle du cristal. L'énergie potentielle totale du cristal est égale simplement à la somme des contributions de toutes les paires distinctes d'atome. Si nous tenons compte du fait que l'atome dont la position moyenne est  $\vec{R}$  se trouve, de manière générale, dans une position

$$r(\vec{R}) = \vec{R} + u(\vec{R}) \quad (\text{I.18})$$

Où  $\vec{u}(\vec{R})$  est la déviation par rapport à l'équilibre de l'ion dont le site est  $\vec{R}$ , nous pouvons alors écrire l'énergie potentielle totale du cristal comme :

$$U = \frac{1}{2} \sum_{R, R'} \phi(\vec{R} - \vec{R}' + u(\vec{R}) - u(\vec{R}')). \quad (\text{I.19})$$

Supposant que les atomes ne dévient pas de manière importante de leurs positions d'équilibre, ce qui est fondé, car les amplitudes des vibrations restent petites comparées à la distance moyenne séparant les ions, même à des températures approchant la température de liquéfaction [14], nous pouvons faire un développement en série de Taylor de l'énergie potentielle autour de sa valeur d'équilibre en fonction des petits déplacements

$$U = \frac{N}{2} \sum \phi(\vec{R}) + \frac{1}{2} \sum_{R,R'} (\mathbf{u}(\vec{R}) - \mathbf{u}(\vec{R}')) \cdot \nabla \phi(\vec{R} - \vec{R}') + \frac{1}{4} \sum_{R,R'} [(\mathbf{u}(\vec{R}) - \mathbf{u}(\vec{R}')) \cdot \nabla]^2 \phi(\vec{R} - \vec{R}') + O(u^3) \quad (I.20)$$

Le terme linéaire dans (I.20) est nulle, puisque l'énergie potentielle est minimale à l'équilibre. La dérivée première par rapport aux déplacements s'annule. La première correction non nulle à l'énergie potentielle est donnée par le terme quadratique. Dans le cadre de l'approximation harmonique, seul ce terme quadratique est retenu. Cette hypothèse revient à considérer que la force, s'appliquant sur un atome, est linéairement proportionnelle au déplacement par rapport à sa position d'équilibre. Le premier terme de la partie droite de l'équation (I.20) est une constante donnant l'énergie potentielle d'équilibre et il n'est pas importante pour des problèmes d'aspect dynamique.

#### IV. Effet des impuretés sur les vibrations du réseau

Les modifications du spectre de phonons d'un cristal, dues à la présence d'impuretés, sont maintenant relativement bien connues. Un certain nombre de modes de vibration du cristal parfait sont perturbés et voient leurs fréquences augmenter ou diminuer suivant le cas, de quantités relativement faibles. D'autre part, il apparaît dans certains cas des modes exceptionnels de vibration : modes localisés, modes de gap ou modes résonnants, dont les fréquences sont situées respectivement au dessus de la fréquence de vibration maximum, dans une bande interdite et à l'intérieur d'une bande permise du spectre de fréquence des phonons du réseau non perturbé.

Dans un mode localisé ou un mode de gap, l'amplitude de vibration des atomes est maximum au site d'une impureté et décroît plus vite qu'exponentiellement quand on s'en éloigne. Sa fréquence est d'autant plus élevée que le rapport de la masse de l'impureté à celle de l'atome auquel elle s'est substituée est plus petit et que les constantes de force entre l'impureté et ses proches voisins sont élevées par rapport à existant le cristal non perturbé.

Dans un mode résonnant, l'amplitude de vibration ne décroît pas exponentiellement en fonction de la distance à l'impureté comme dans un mode localisé.

Par contre, les amplitudes de vibration de tous les atomes du cristal, en fonction de la fréquence, passent par un maximum aigu à la fréquence du mode résonnant. Si dans un mode

résonnant, l'atome d'impureté vibre effectivement comme dans le cas d'impuretés isotopique lourdes, initialement envisagé par **Broiit** et **Visscher** [15], la plus grande augmentation d'amplitude de vibration a lieu pour l'impureté elle-même. Dans ce cas, la fréquence et la largeur du pic de résonance décroissent tandis que son intensité croît, quand la masse de l'impureté augmente. D'un autre côté, dans un mode résonnant où l'atome d'impureté demeure immobile, l'effet de résonance se fait sentir surtout sur ses proches voisins. Dans ce cas, la fréquence et l'intensité de la résonance sont régies par les chargements des forces de couplage entre l'impureté et ses proches voisins ; la résonance est d'autant plus forte que le relâchement des forces de couplage est plus grand.

Les modes résonnants ont un certain caractère optique, en ce sens que l'atome d'impureté vibre à contre-sens par rapport à ses proches voisins. Ceci n'est d'ailleurs qu'un des aspects de l'analogie qui existe entre les modes d'impureté de phonons et les états électroniques d'impuretés, pour lesquels une résonance se caractérise par un maximum de déphasage

#### **IV.1. modes localisés**

L'introduction de défauts ponctuels dans le réseau a essentiellement deux sortes d'effets sur les vibrations de réseau : d'une part les fréquences des modes normaux à l'intérieur de la bande de modes permis sont déplacées d'une quantité extrêmement faible par rapport aux fréquences non perturbées, et d'autre part les modes normaux au bord de la bande permise sont éjectés à l'intérieur de la zone interdite de fréquences, Ces modes sont alors appelés des modes localisés.

Les effets d'imperfection sur les modes de réseau ont fait depuis longtemps l'objet de nombreuses études théoriques [16-20]. Les résultats sont généralement connus sous le nom de **Théorème de Rayleigh**.

#### **IV.2. Modes normaux de vibration de surface**

A la surface d'un cristal, les conditions aux limites imposent à un certain, nombre de constantes de forces d'être nulles. Ce fait diminue la rigidité du réseau et par là abaisse aussi les fréquences des modes normaux. Cette perturbation a pour effet en outre d'éjecter de l'ensemble continu de fréquences permises une fréquence dans la zone de fréquences interdits. Les fréquences se trouvant ainsi en dehors de l'ensemble de fréquences permises

sont appelées des modes de surface, leur amplitude est maximum à la surface et décroît exponentiellement à mesure que l'on s'avance dans le réseau.

**Wallis [21]** a énoncé un critère général pour l'existence de modes de surface : la masse totale des atomes légers doit être inférieure à la masse globale des atomes lourds.

Le nombre de modes de surface est égal au nombre de sites à la surface du réseau occupés par des atomes légers.

Pour des cristaux ioniques dans lesquels les atomes de masses différentes portent des charges de signes opposés, un moment dipolaire électrique apparaît à la surface. De tels modes de surface peuvent interagir avec le champ de rayonnement et donner lieu à des bandes d'absorption optiques à des fréquences inférieures à la fréquence limite des modes optiques.

### IV.3. Modes localisés de vibration de surface

Si des atomes étrangers sont adsorbés sur un grand nombre de sites du réseau en surface, comme dans le cas d'impuretés substitutionnelles, il résultera des modes localisés de surface, lorsque la masse des atomes adsorbés en surface est suffisamment petite, ou bien lorsque les forces de liaison sont suffisamment grandes.

Les études des modes localisés de surface et leurs spectres optiques ne sont encore que tout à leurs débuts, mais elles s'annoncent comme un moyen puissant d'étude des cas limites de dynamique des réseaux et états de surface.

## V. Contribution des phonons à la chaleur spécifique

Par analogie aux photons quantifiant l'énergie d'une onde électromagnétique les phonons quantifient l'énergie des vibrations élastiques du réseau cristallin. Les valeurs d'énergie permises sont données par l'équation suivante :

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (\text{I.21})$$

Avec  $\hbar = h/2\pi$  où  $h$  est la constante de Planck et  $n$  un nombre entier positif.

La théorie de vibration du réseau cristallin trouve son application dans le calcul de la chaleur spécifique.

La capacité calorifique à volume constant est définie par :

$$C_v = \left(\frac{dU}{dT}\right)_v \quad (\text{I.22})$$

Où  $U$  est l'énergie interne du réseau et  $T$  la température.

Dans un solide, l'énergie interne est exprimée essentiellement sous deux formes : l'énergie thermique du réseau cristallin qui est due aux vibrations des atomes autour de leur position d'équilibre et l'énergie cinétique des électrons. Dans le cas des matériaux céramiques diélectriques, la contribution des phonons est prédominante et seulement considérée.

L'énergie interne du cristal est alors donnée par :

$$U = \int d\omega D(\omega) N(\omega) \hbar \omega \quad (\text{I.23})$$

Où  $D(\omega)$  représente la densité d'états vibrationnels à la pulsation,  $\omega$  et  $N(\omega)$  la population de phonons qui occupe le mode  $\omega$ .

Dans l'approximation de **Debye**, les atomes vibrent avec toute les pulsations possibles, il remplace toutes les branches du spectre de vibration par 3 branches, chacune avec une même loi de dispersion linéaire  $\omega = V_{son} k$  autrement : tout les modes sont acoustique avec la même vitesse, pour toutes les directions de les espace et indépendante de la température, il est valable au voisinage du centre première zone de Brillouin. La densité des états vibrationnels peut alors être calculée. Dans le cas d'un cristal monoatomique, cubique, de dimension  $L$  avec des conditions aux limites périodiques et dans l'hypothèse où les trois modes (1 longitudinal et 2 transverses) sont décrits par la même relation de **Debye**, l'énergie interne devient :

$$U = 3 \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{K_B T}} - 1} \frac{1}{2\pi^2 V_{son}} \omega^2 L^3 d\omega \quad (\text{I.24})$$

Où  $\omega_D$  est la pulsation limite de Debye, au-delà de laquelle les modes de vibration ne sont pas occupés.

Soit  $x = \hbar \omega / (K_B T)$  et  $\theta_D$  la température de Debye définie par :

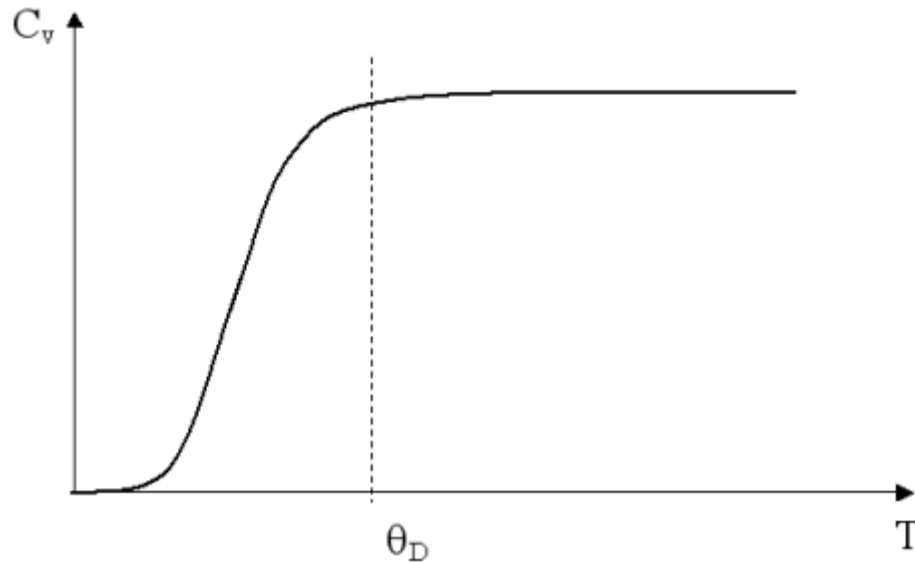
$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{K_B} = \frac{\hbar V_{son}}{K_B} \left( \frac{6\pi^2 N}{L^3} \right)^{1/3} \quad (\text{I.25})$$

Où  $N$  est le nombre de mailles dans le cristal cubique et monoatomique.

Finalement la chaleur spécifique s'écrit :

$$C_V = 9NK_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{X_d} \frac{X^4 e^X}{(e^X - 1)^2} dX \quad (\text{I.26})$$

Cette dernière relation montre que la chaleur spécifique varie avec la température, figure I.8. Il sera donc indispensable d'en tenir compte lors des caractérisations expérimentales de la conductivité thermique.



**Figure I.8** : Variation de la chaleur spécifique en fonction de la température [32].

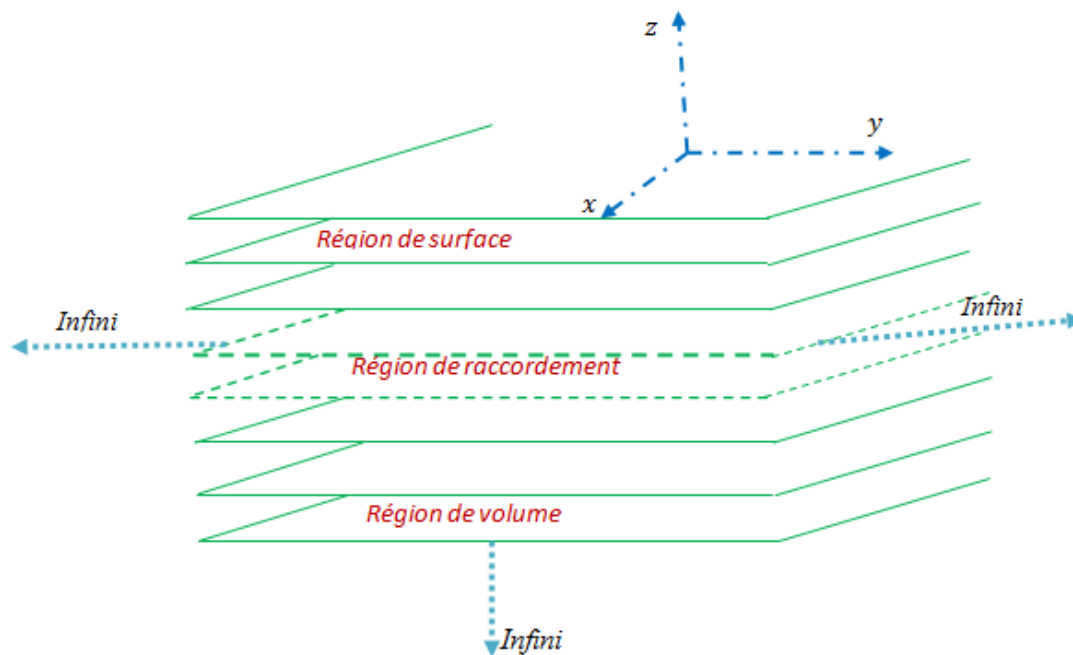
## VI. La méthode de raccordement

La méthode de raccordement, sur laquelle est basé notre travail, trouve ses origines dans l'étude théorique de la dynamique vibrationnelle des surfaces ordonnées, cette méthode a été introduite pour la première fois par **Feuchtwang** en 1967[22] pour étudier l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin à trois dimensions avec une limite qui est la surface, par la suite, elle a été reprise en 1987 par **Szefitel** et **Khater** dans les deux articles [22 ,23], le premier étant un développement du formalisme mathématique utilisé et le second une application directe aux surfaces  $Ni(100)$  et  $Ni(100) + c(2 \times 2)$  [2].

En 1994, la méthode a été appliquée et adaptée par **M. Tamine** [24] dans son travail de thèse sous la direction scientifique du professeur A. Khater, à l'étude des modes des magnons en surface d'une structure antiferromagnétique à deux sous réseaux frustrés. En utilisant cette méthode, *Khater et al.* ont effectué de nombreux travaux ; leurs études ont été liées à des systèmes réels traitant en modélisation théorique et numérique de nombreux phénomènes physique à savoir : les phonons de surface, la diffusion et le transport thermique d'excitations magnétiques et vibrationnelles. Nous donnons en détail le principe de la méthode au paragraphe suivant.

## VI.1. Formulation générale de la méthode de raccordement pour le calcul des modes localisés de surface

La méthode de raccordement est une méthode analytique [24], a été introduite pour déterminer les courbes de dispersions des modes localisés. L'application de cette méthode consiste à décrire les relations entre les mouvements atomiques d'un système semi-infini par un nombre fini d'équations en divisant l'espace du solide en trois régions [2,24]. Pour une surface plane qui borne un solide semi-infini, les trois régions sont les suivantes (figure I.9) :



**Figure I.9 :** Représentation schématique d'un solide cristallin semi-infini qui cite les trois régions : de défaut, de raccordement, et de volume.

A partir de la figure I.9, les différentes régions qui compose le système sont:

- **Régions parfaites (volume)**

la figure I.11[24], c'est une partie du réseau d'atomes se trouvant loin de la surface du solide (suffisamment loin du défaut) d'une manière quelle soit hors de la portée de tous les effets de celle-ci Cette région est caractérisée par sa périodicité tridimensionnelle et permet de déterminer les courbes de dispersion en volume.

- **Régions de surface (défaut)**

C'est la région qui renferme tous type de défaut [24] ou bien celle-ci est composée des premiers plans atomiques du système formant la surface de semi-infini [2] (figure I.9).

Cette région affectée par la relaxation et la reconstruction des plans atomiques, c'est une région ayant une périodicité bi-dimensionnelle [2] (une symétrie de translation planaire), elle a en général des propriétés vibrationnelles différentes de celles du volume.

- **Régions de raccordement**

Est une région intermédiaire, entre la région parfaite et la région de défaut [2]. Elle permet dans la modélisation théorique de raccorder analytiquement les modes de surface avec les états vibrationnels de la région de volume [2] :

## VI.2. Formulation du problème

La présence d'une surface limitant un solide semi infini constitue un défaut qui brise la symétrie de translation suivant la direction normale au défaut [2]. Les déplacements dans la direction cartésienne  $\alpha$ , 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 défaut mais se trouvant dans la région de volume, vérifient la relation suivante :

$$u_{\alpha}(l', P', \omega) = u_{\alpha}(l, P, \omega) \cdot z^{(P'-P)} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}(l', l)} \quad (I.27)$$

Où  $z$  : est un facteur de phase inconnu, normal au défaut, tel que  $|z| \leq 1$  ;  $\vec{q}$  est dans la première zone de Brillouin et  $\alpha \in \{x, y, z\}$ .

L'équation du mouvement d'un atome occupant le site ( $l$ ) et ayant une fréquence  $\omega$ , est donnée par l'expression suivante :

$$\omega^2 m_l u_{\alpha}(l, \omega^2) = \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} K(l', l) \left[ \frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{d^2} \right] [u_{\beta}(l', \omega) - u_{\beta}(l, \omega)] \quad (I.28)$$

$m_l$  : La masse de l'atome au site ( $l$ ).

$u_{\alpha}(l, \omega^2)$  : le déplacement suivant la direction  $\alpha$ .

$r_{\alpha}$  : représente la composante de la vectrice position relative entre les sites ( $l$ ) et ( $l'$ ).

$d$  : la distance qui les sépare entre ( $l, l'$ ), obier est la constante de force entre les atomes occupant les sites ( $l$ ) et ( $l'$ ).

$\omega^2$  : est la fréquence de vibration de l'atome considéré.

En insérant l'équation (I.27) dans l'équation de mouvement (I.28) on obtient un système d'équations clos pour les déplacements  $|u\rangle = |u_{\alpha}(l, \omega)\rangle$  des sites atomiques d'une maille élémentaire dans le plan, qui peuvent analytiquement s'écrire ainsi :

$$\omega^2 m_l u_\alpha(l, \omega) + \sum_{l' \neq l} \sum_\beta K(l', l) \left[ \frac{r_\alpha r_\beta}{d^2} \right] u_\beta(l', \omega) [Z^{(P'-P)} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}'(l', l)} - 1] = 0 \quad (\text{I.29})$$

Ou sous la forme matricielle suivante :

$$[\omega^2 \mathbf{I} - \mathbf{D}(\vec{q}, \mathbf{Z})] \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (\text{I.30})$$

$\mathbf{I}$  : représente la matrice identité.

$\mathbf{D}(\vec{q}, \mathbf{Z})$  : est appelée matrice dynamique .

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

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

La détermination des états de phonons localisés, au voisinage d'une surface plane sans défaut d'un solide semi-infini, commence dans un premier temps par le calcul de ces modes évanescents dans tout le domaine  $(\vec{q}, \omega)$ . Puis nous déterminons les équations de mouvement (I.29) pour les sites représentatifs des trois régions. Ceci nous conduit naturellement à un système matriciel  $\mathbf{M}$ , ayant le nombre d'équations plus petit que le nombre de déplacements inconnus.

La résolution de ce système d'équations, nécessite la réduction du nombre de variables inconnues pour en déduire un système homogène d'équations.

Pour ce faire, on décrit pour chaque donnée  $(\vec{q}, \omega)$  les déplacements atomiques par une combinaison linéaire sur les  $n$  modes vibrationnels de volume suivant la direction normale à la surface.

Ces  $m$  modes correspondent aux  $n$  racines  $z$  satisfaisant la condition d'évanescence  $|z| < 1$ . L'état de raccordement se fait à l'aide de relation suivante :

$$u_\alpha(l, \omega) = \sum_{i=1}^n A(\alpha, z_i) z_i^P R_i \quad (\text{I.31})$$

$P$  : représente les coordonnées de l'atome  $l$ .

$\alpha$  : parcourt les trois directions cartésiennes  $x, y$ .

$R_i$  : est un vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent  $i$  dans la base  $\{R\}$ .

$n$  : est le nombre de modes évanescents.

$z_i$  : 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 du  $i^{eme}$  mode évanescent dans la direction cartésienne  $\alpha$ .

La détermination simultanée des facteurs de phases  $Z_i$  caractérisant les modes évanescents, ainsi que des vecteurs propres correspondants, toute de l'étude dynamique des zones parfaites en volume, permet de définir la matrice de raccordement  $D_R$  à l'aide des développements (I.32)

Le produit des deux matrices  $D_d$  (matrice dynamique) et matrice  $D_R$  (matrice de raccordement) conduit à une matrice carrée  $D_S$  caractérisant un système d'équations homogènes, pour lequel des solutions non triviales conduisent à :

$$\det(\Omega^2 I - D_S(\vec{q}, \Omega)) = 0 \quad (I.32)$$

Donc il est alors possible de calculer les courbes de dispersions, les densités spectrales et les densités d'états associées aux différents modes localisés au voisinage de surface.

$\Omega = \frac{\omega}{\omega_0}$  étant une fréquence normalisée donnée en fonction de la fréquence caractéristique  $\omega_0$  du volume donnée par  $\omega_0^2 = K_1 / m_l$

$K_1$  : Constante de force entre premiers voisins en volume.

## **Conclusion**

La dynamique vibrationnelle est un domaine très vaste qui regroupe l'ensemble des phénomènes statiques et dynamiques associés aux vibrations des atomes et des molécules. Parmi les enjeux modernes de la dynamique vibrationnelle, citons l'étude des propriétés structurales des molécules, la caractérisation des interactions intermoléculaires.

Le travail présenté dans ce premier chapitre, s'inscrit dans le cadre d'une introduction à l'étude de la dynamique vibrationnelle d'un réseau à deux dimension, vu l'importance de leurs études, en introduisant des notions de base concernant les vibrations du réseau et les phonons, Ces vibrations ont des conséquences directes sur les propriétés des solides (chaleur spécifique, fusion, conductivité thermique). En effet, nous avons effectué un rappel sur la cristallographie et la zone de Brillouin), pour faciliter aux lecteurs sa compréhension. Par la suite, nous avons décrit la méthode de raccordement.

## Introduction

Les ondes élastiques ou vibrationnelles de surface ont fait l'objet d'un intérêt théorique et expérimental croissant depuis la fin de 19<sup>ème</sup> siècle. Les premières études remontent à 1887, lorsque Lord Rayleigh discuta de la présence d'ondes localisées pouvant se propager dans des directions parallèles à la surface pour des milieux isotropes et élastiques, ces excitations ont été identifiées comme des ondes de surface car elles sont caractérisées par une décroissance exponentielle de leur amplitude depuis la surface vers le volume et par la relation de proportionnalité entre la fréquence et le vecteur d'onde. Jusqu'au milieu des années soixante les applications principales de ces ondes de surface étaient orientées vers l'étude des ondes sismiques se propageant dans la croûte terrestre [25].

Cependant, dans un solide, le modèle du réseau cristallin est une approximation de la configuration des atomes, En effet, ceux-ci exécutent en fait des déplacements vibrationnels autour de leur position d'équilibre. Ce sont des fluctuations thermiques dont les amplitudes et les énergies sont déterminées par la température de solide [25].

Dans ce chapitre nous rappelons brièvement quelques notions de la dynamique vibrationnelle dans les solides cristallins, puis nous allons étudier la dynamique vibrationnelle d'un guide d'onde parfait quasi-bidimensionnel et établiront la matrice dynamique, qui nous permettra de calculer les courbes de dispersion, les bandes passantes et interdites, qui définissent les modes vibrationnels d'une surface ordonnée.

### I. Description du modèle

Le modèle que nous avons choisi d'étudier est purement classique. Le système modèle est un plan carré infini formé d'atomes identiques qui peuvent se déplacer dans deux directions. Ce plan infini d'atomes « classiques » constitué des chaînes atomiques linéaires infini, les paramètres propres du système sont symbolisés par un assemblage des masses  $m$  ponctuelles reliées par des constantes des forces  $K_1$  et  $K_2$  entre premiers et seconds voisins respectivement (figure II.1). On écrit les équations du mouvement de l'atome  $u(u_x, u_y)$  représenté sur la figure ci-dessous. Tous les atomes du réseau parfait ont des sites identiques, ils sont donc équivalents. Ces atomes sont dits réductibles. Les équations du mouvement ne seront écrites, par conséquent, que pour un seul atome et pourront être déduites par simple translation suivant les deux directions cartésiennes  $x$  et  $y$  pour les autres atomes. Pour des raisons de simplification, la distance interatomique sera toujours égale à l'unité ( $a = 1$ ).

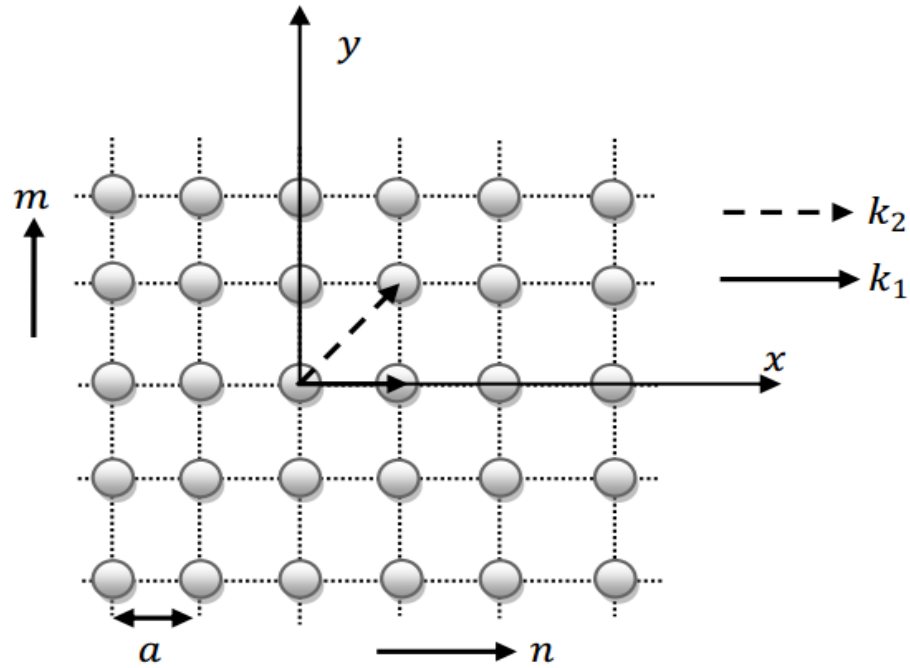


Figure II .1 : Représentation du guide d'onde parfait.

## II. Dynamique vibrationnelle dans les régions loin du défaut

Nous nous plaçons ici dans une région choisie suffisamment éloignée de défaut pour que les atomes, constituant ce domaine, aient un environnement d'une surface parfaite, à savoir 4 atomes premiers voisins situés à une distance  $a$  et 4 seconds voisins à une distance  $a\sqrt{2}$  comme le montre la figure II.1,  $a$  étant la distance interatomique.

Le repère orthogonal choisi ici est défini ainsi :

- L'axe  $Ox$  coïncidant avec la direction  $[10]$  (dans le plan), c'est-à-dire la direction parallèle à la surface et perpendiculaire au défaut.
- L'axe  $Oy$  selon  $[01]$ , c'est-à-dire selon la direction parallèle à la surface.

Afin de déterminer la dynamique vibrationnelle en surface loin de défaut, nous allons écrire les équations de mouvements d'un atome de la surface en considérant les premiers et les seconds voisins dans le cadre de l'approximation harmonique[26], associée au modèle des forces centrales. L'équation de mouvement d'un atome est donnée par :

$$\omega^2 m(l) u_\alpha(l, \omega) = - \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left( \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) K(l, l') [u_\beta(l', \omega) - u_\beta(l, \omega)] \quad (\text{II.1})$$

$\alpha$  et  $\beta$  représentent des directions cartésiennes.  $m(l)$  indique la masse de l'atome du site  $(l)$ ,  $u_\alpha(l, \omega)$  le déplacement suivant la direction  $\alpha$ ,  $r_\alpha$  représente la composante

cartésienne du vecteur position joignant les sites ( $l$ ) et ( $l'$ ),  $r$  le module du vecteur position,  $K(l, l')$  la constante de force entre les atomes ( $l$ ) et ( $l'$ ), et  $\omega$  est la fréquence de vibration de l'atome considéré.

Pour les  $N$  atomes contenus dans la cellule élémentaire et selon, les deux directions cartésiennes on aura un système de  $2N$  équations de mouvements. Ce réseau présente l'avantage de la symétrie de translation et tous les atomes ont des sites identiques. En appliquant les conditions aux limites périodiques de Born et Von Karman, on peut réduire le champ des déplacements et les équations de mouvement ne seront écrites que pour un seul atome, et le reste des équations seront déduites par une simple translation dans les deux directions cartésiennes.

En utilisant les équations (II.1), le mouvement atomique d'un site de coordonnées  $(n_x, n_y)$  situé sur la surface loin de défaut peut s'exprimer ainsi :

$$[\Omega^2 I - D(\varphi_y, z, r)] |\vec{u}\rangle = |\vec{0}\rangle \quad (\text{II.2})$$

Avec  $\Omega = \left[ \frac{m \omega^2}{k_1} \right]^{1/2} = \frac{\omega}{\omega_0}$  est la fréquence normalisée sans dimension, avec  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k_1}{m}}$  est la fréquence propre de vibration de la structure parfaite.  $r = \frac{K_2}{K_1}$  le rapport entre les constantes de force de deuxième et de premier voisins du réseau parfait.  $I$  représente la matrice identité de dimension.  $D(\varphi_y, z, r)$  c'est la matrice dynamique du réseau parfait, une matrice carrée donnée en fonction de  $\varphi_y$ ,  $z$  et  $r$  par :

$$D(\varphi_y, z, r) = \begin{bmatrix} D_1 & D_3 \\ D_3 & D_2 \end{bmatrix}$$

$$D_1 = \Omega^2 - 2 - 2r + (z + z^{-1}) (1 + \cos(\varphi_y))$$

$$D_2 = \Omega^2 - 2 - 2r + \cos(\varphi_y) (2 + r(z + z^{-1}))$$

$$D_3 = ir \sin(\varphi_y) (z - z^{-1})$$

$z$  est le facteur générique pour le plan, satisfaisant les conditions d'évanescences suivant les  $x$  positifs.  $\varphi_y = q_\alpha a$ ,  $q_\alpha$  étant un vecteur d'onde unidimensionnel du réseau réciproque dans la direction parallèle au défaut (à l'axe  $y$ ),  $a$  est la distance interatomique entre premiers voisins.  $|\vec{u}\rangle$  est un vecteur représentatif des déplacements vibrationnels d'un site de réseau parfait donné :

$$|\vec{u}\rangle = \begin{pmatrix} u_x(n_x, n_y) \\ u_y(n_x, n_y) \end{pmatrix} \quad (\text{II.3})$$

### III. courbe de dispersion

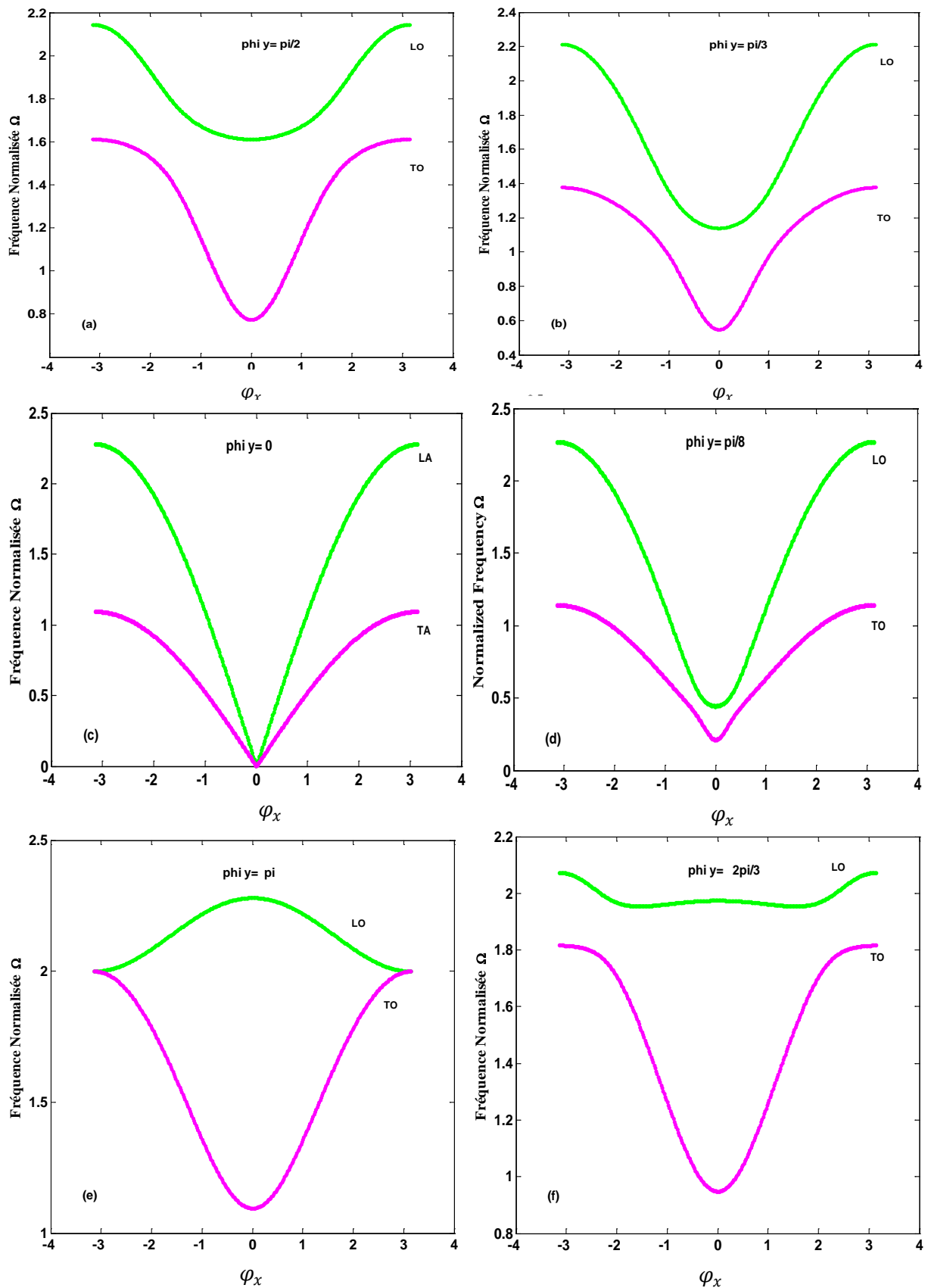
En résolvant l'équation (II.2) , pour  $z = e^{i\varphi_x}$  fixe, la résolution du problème aux valeurs propres de la matrice dynamique  $D$  en volume donne les fréquences propres de vibration  $\Omega_v$ , ainsi que les vecteurs propres  $\vec{u}_v$  correspondants. Les modes propageants du guide d'onde plan correspondent aux solutions  $|Z| = 1$ . Ils sont habituellement donnés en fonction de  $\varphi_x$ . La fonction d'onde  $\varphi_x = r_x q_x = q_x$  représente la composante du vecteur d'onde suivant la direction  $x$  dans le réseau réciproque du fait que la direction interatomique  $a$  est égale à l'unité. En fait, les composantes  $(\varphi_x, \varphi_y)$  du vecteur d'onde déterminent l'angle d'incidence de l'onde propageant relativement aux directions  $x$  et  $y$ .

Lorsque  $\varphi_x$  parcourt la première zone de Brillouin  $[-\pi, \pi]$  on obtient les courbes de dispersion  $\Omega(\varphi_x)$ . Où la fréquence  $\Omega$  se déduit du nombre d'onde  $\varphi_x$ , qui est appelée relation de dispersion. C'est la façon la plus commode pour caractériser le comportement ondulatoire d'un système. Un milieu satisfaisant à la relation simple,  $\Omega$  est proportionnel à  $\varphi_x$ , est dit non dispersif.

L'allure des courbes de dispersions  $\Omega(\varphi_x)$  obtenues, qui sont symétriques par rapport à l'axe des fréquences, est montrée sur la figure II.2 pour les différentes valeurs de  $\varphi_y$ . Ces résultats indiquent la tendance des branches de dispersion à être des fonctionnelles de  $\varphi_y$ .

On note que ces courbes sont symétriques par rapport à l'origine et que leurs dépendances en fonction de  $\varphi_x$  n'est pas linéaire, ce qui exprime que le système est dispersif.

Sur la Figure II. 2, **TA** est la branche transversale acoustique, **TO** est la branche transversale optique, **LO** est la branche longitudinale optique et **LA** la branche longitudinale acoustique.



**Figure II. 2:** Dispersion des modes propageant du guide d'onde parfait pour différentes valeurs de  $\phi_y$ , mode 1 ; en couleur vert, mode 2 ; en couleur violet pour la valeur de  $r = 0.3$ .

### III.1 Courbes de dispersion pour des différentes valeurs de $\varphi_y$

De point de vue technique, cette simulation est réalisée par le logiciel MATLAB. Les résultats numériques sont obtenus pour  $r = 0,3$  et pour différentes valeurs de  $\varphi_y$ .

Nous observons que pour  $\varphi_y = 0$ , les deux modes du plan sont tous les deux acoustiques ( $\Omega \rightarrow 0$  quand  $\varphi_x \rightarrow 0$ ) et que pour les autres valeurs de  $\varphi_y$  ces modes deviennent optiques ( $\Omega \neq 0$  quand  $\varphi_x = 0$ ). Les figures II.2.c et II.2.e indiquent aussi que les deux branches sont dégénérées pour  $\varphi_y = 0$  et  $\pi$ , limites de la zone de Brillouin.

Cette première remarque sur les courbes de dispersion en amène plusieurs autres :

a) Premièrement, Contrairement au cas électronique où les courbes sont des sinusoides parallèles, nous n'avons ici aucun espoir de trouver une expression analytique utilisable. Il faudra donc recourir à des méthodes purement numériques pour intégrer ces relations de dispersion dans le problème avec défauts.

b) Sans grande surprise, que ces courbes sont très proches des courbes de dispersions des phonons dans les cristaux. La courbe de dispersion peut également être considérée comme donnant le spectre des énergies  $\hbar\Omega$  possibles pour les phonons.

c) Les deux branches de dispersion se recouvrent sur un certain intervalle de fréquence qui diminue quand la composante  $\varphi_y$  augmente de 0 à  $\frac{\pi}{2}$ . A partir de cette valeur, le recouvrement disparaît.

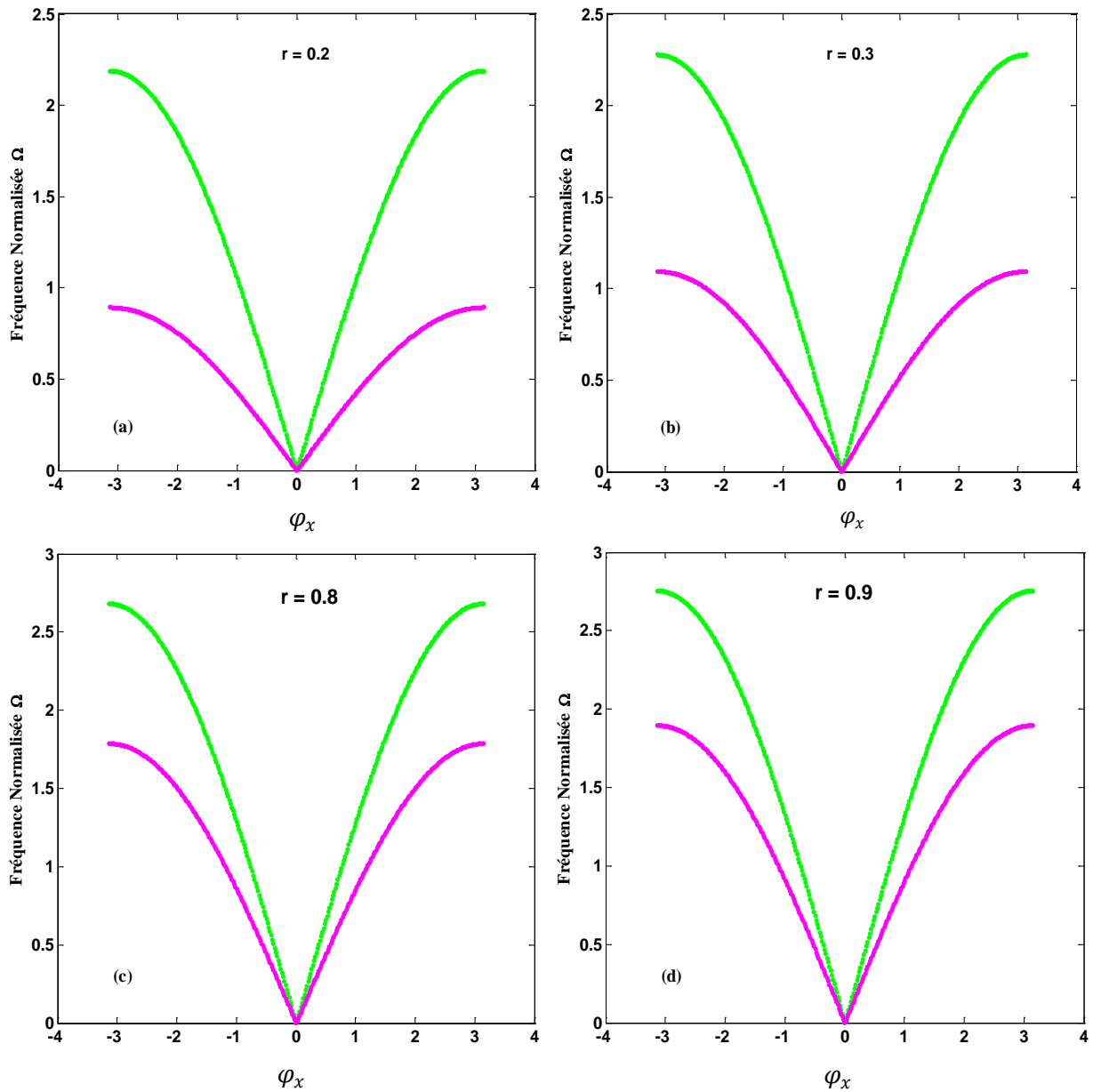
d) On constate qu'il existe des régions où certaines courbes ont une dérivée négative comme sur la figure (II.2.e) pour  $\varphi_y = \pi$ . Cela signifie un changement de sens de propagation. cette particularité liée à des problèmes d'instabilité.

e) L'évolution des courbes en fonction de  $\varphi_y$  indique que la plage de propagation du mode 1 (numérotation se faisant de bas en haut) diminue dans tout l'intervalle  $[0, \pi]$ , alors que le mode 2 voit d'abord sa plage se réduire de  $\Delta\Omega = 1.45$  (figure II.2.c) à  $\Delta\Omega = 0$  (figure II.2.f) pour  $\varphi_y \leq \frac{2\pi}{3}$ , elle augmente ensuite dans le reste de l'intervalle.

Pour  $\varphi_y = 0$ , le mode 1 se propage entre  $\Omega = 0$  et  $\Omega = 1.45$  ; les fréquences de propagation du mode 2 occupent l'intervalle tout entier, i.e.  $[0, 2.45]$  (figure II.2.c). A  $\varphi_y = \pi$ , le mode 1 devient propageant uniquement entre  $\Omega = 1.43$  et  $\Omega = 2$  et le mode 2 entre 2 et 2.5 (figure II.2.e).

Nous concluons que l'angle d'incidence de l'onde augmente au moment où la plage de propagation de chaque mode diminue, c'est-à-dire quand l'angle d'incidence est nul (la propagation se fait parallèlement à l'axe  $Ox$  dans le sens positif), l'intervalle de propagation est maximum (figure II.2.c); quand celui-ci est supérieur à  $\frac{2\pi}{3}$  (le sens de propagation s'inverse pour le mode 2), les modes se propagent dans des intervalles réduits (figure II.2.e).

Enfin, en examinant les vecteurs propres obtenus dans la résolution du système aux valeurs propres, on montre que les courbes correspondent à un mode transversal (**T**) et à un mode longitudinal (**L**) ; la numérotation se fait de bas en haut ; il y a lieu de signaler que ce choix est arbitraire.

III.2. Courbes de dispersions pour différentes valeurs de  $r$ 

**Figure II .3 :** Courbes de dispersion du guide d'ondes parfait dans la première zone de Brillouin qui représente les deux modes pour les différentes valeurs de  $r$ .

Dans cette partie, nous avons présenté les courbes de dispersion du guide d'ondes parfait pour les différentes valeurs de  $r$  ( $\varphi_x$ ,  $\varphi_y$  ont des valeurs fixes pour les valeurs de  $r$ ). Nous observons que : Si on augmente la valeur de  $r$  la plage de propagation pour les deux modes augmente. Par exemple pour :  $r = 0.2$  :  $\Omega_1 \in [0, 0.894]$  et  $\Omega_2 \in [0, 2.191]$ .

$r = 0.8$  :  $\Omega_1 \in [0, 1.789]$  et  $\Omega_2 \in [0, 2.683]$ .

Par analogie, si on diminue la valeur de  $r$  la plage de propagation diminue.

### III.3. Les bandes passantes et interdites

La loi de dispersion qui donne la pulsation  $\Omega$  associée à chaque valeur du vecteur d'onde  $\varphi_x$ , permet d'étudier la propagation des ondes dans le système. Une vibration de fréquence  $\Omega$  ne peut se propager que si  $\Omega$  est contenue dans la bande permise, les autres valeurs correspondent naturellement à la bande interdite.

On projetant les équations dynamique (II.1) :

Suivant ( $ox$ ) :

$$[\Omega^2 - 2 - 2r + (z+z^{-1})(1 + \cos(\varphi_y))]u_x(m,n) + [(z - z^{-1}) \sin(\varphi_y)]u_y(m,n) = 0$$

Suivant ( $oy$ ) :

$$[\Omega^2 - 2 - 2r + (z+z^{-1})(1 + \cos(\varphi_y))]u_y(m, n) + [(z - z^{-1}) \sin(\varphi_y)]u_x(m,n) = 0 \quad (\text{II.4})$$

La résolution numérique du système d'équation (II.4) pour des solutions itinérantes,  $|z| = 1$ , donne la bande des phonons de volume du guide d'onde. Elle est représentée sur la figure II .4. Nous remarquons, la présence d'une petite fenêtre dans la bande passante dont la largeur s'agrandit quand la valeur de la constante de force entre seconds voisins du réseau augmente, ce petit espace constitue un intervalle interdit dans lequel les phonons ne peuvent se propager.

Nous remarquons pour les différentes valeurs de  $r$  que la largeur de la fenêtre dans la bande passante augmente si la valeur de  $r$  augmente, c'est-à-dire la valeur de la constante de force  $K$  du réseau augmente (figure II.4).

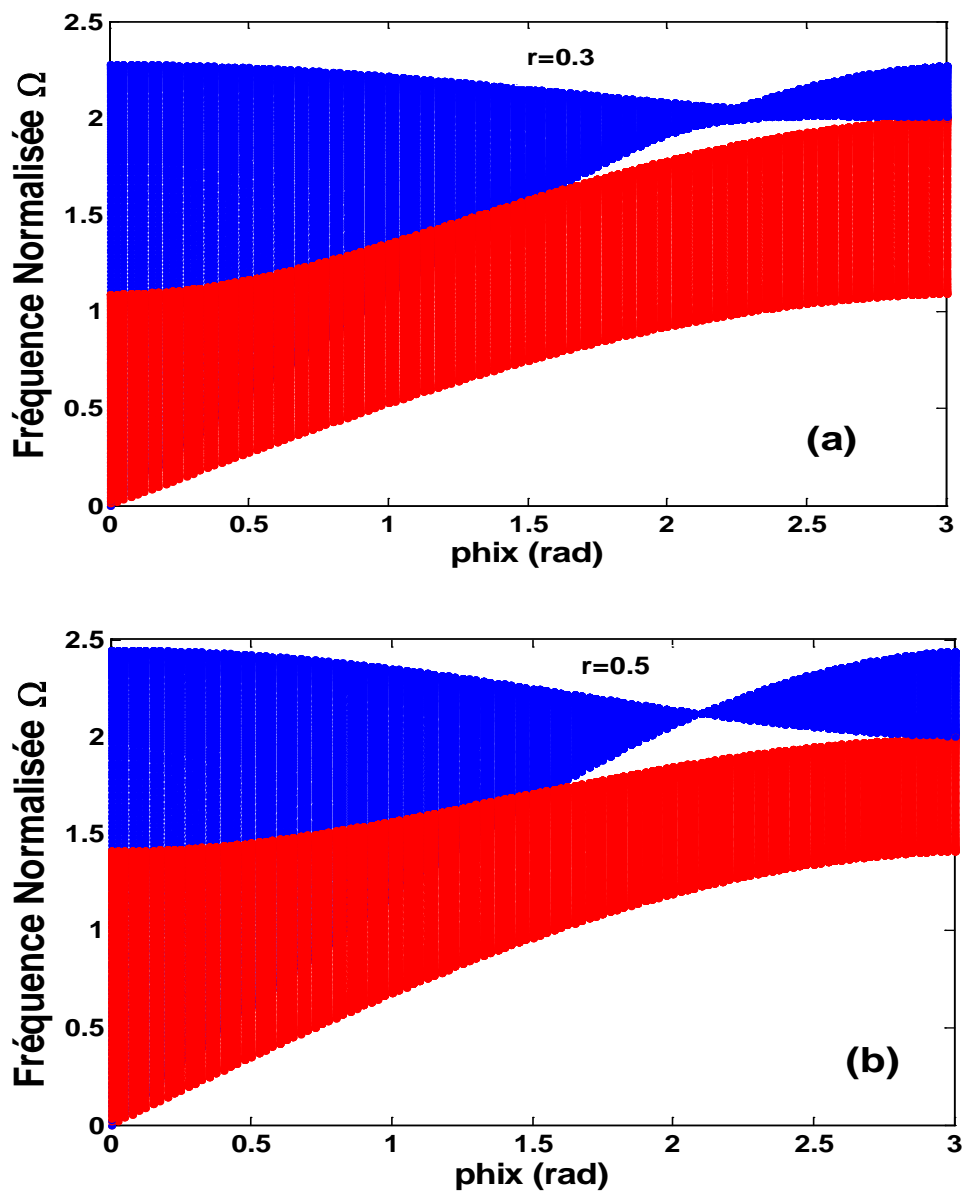


Figure II.4 : Bandes passantes de volume en (a) et (b) pour différentes valeurs de  $r$

En plus, nous pouvons même connaître les plages de propagation associées à chacun des modes. Sur la figure( II.5), sont représentées séparément les bandes propageantes pour chacun des deux modes, transversal 1 (figure II.5.a) et longitudinal 2 (figure II.5.b). La zone pointillée correspond à la plage de propagation des modes alors que le reste de l'espace intéresse naturellement les bandes interdites. Nous remarquons que la superposition de ces bandes reproduit rigoureusement celle obtenue à la figure II.4. pour la bande passante totale. La petite fenêtre évoquée précédemment se rapporte à l'espace qui n'est pas recouvert par superposition

des deux bandes propageantes. Autrement dit, elle représente bien un espace interdit aux phonons issus des deux modes.

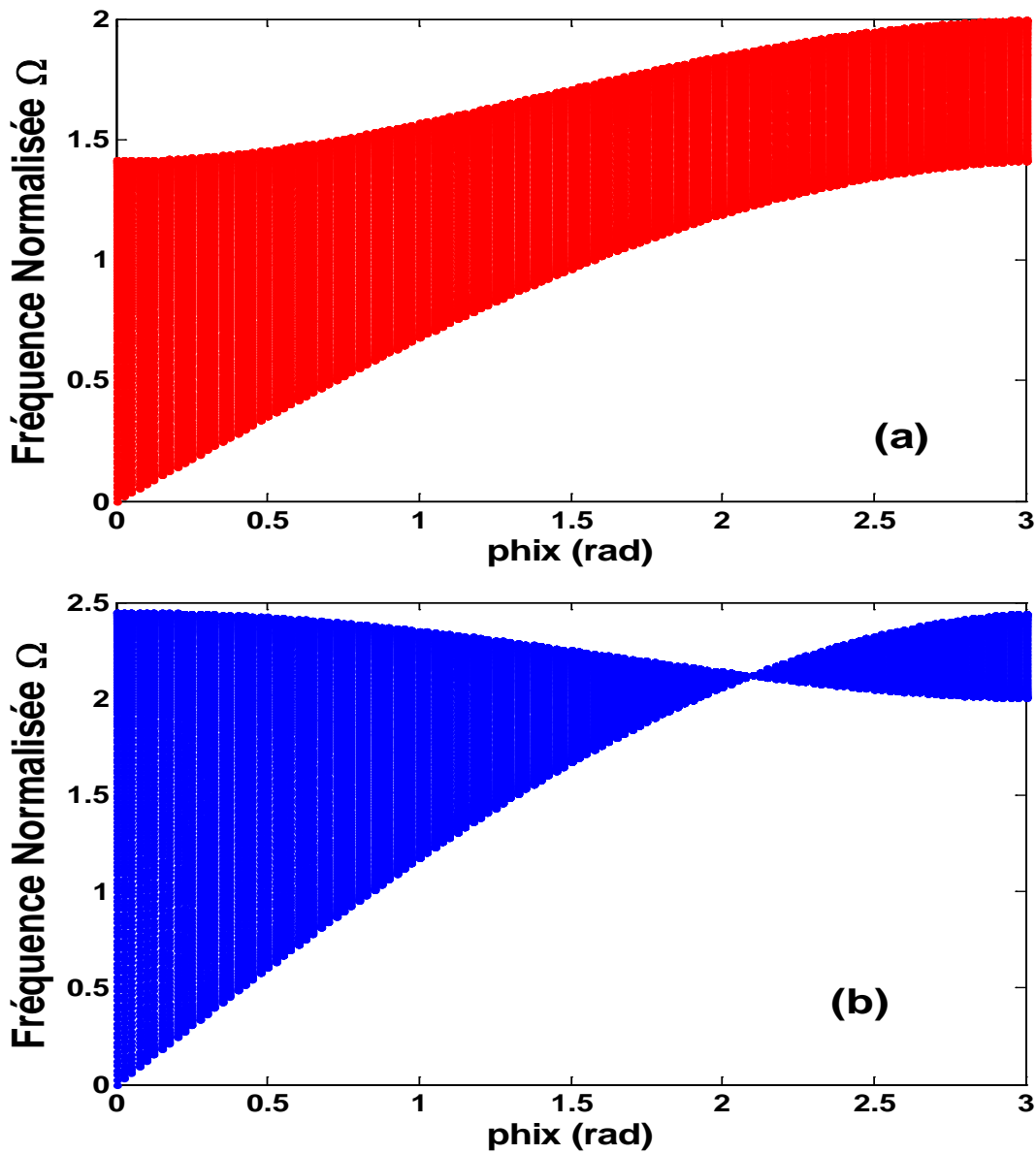


Figure II.5 : Bande propageante des modes transversal en (a) et longitudinal en (b) pour la valeur de  $r$  fixe ( $r = 0.5$ ).

## IV. Densité d'état et chaleur spécifique

### IV.1. La méthode des fonctions de Green

Pour l'étude des vibrations des surfaces cristallines, **Lifshitz et al.**, ont proposé une méthode de résolution utilisant les fonctions de Green [18]. Cette méthode appliquée par **Rosenzweig** à un modèle de cristal cubique simple avec des interactions centrales entre atomes premiers et seconds voisins [2], des forces dues à la rigidité angulaire d'un système de trois premiers voisins formant un angle droit à l'équilibre et des constantes de force telles que le cristal soit isotrope à la limite des grandes longueurs d'onde, lui a permis de retrouver à cette limite les ondes de **Rayleigh** pour une surface (001) et dans la direction de propagation [100].

Par suite, **Dobrzynskiet al.** ont montré comment cette méthode peut être simplifiée dans les calculs qu'elle implique par des considérations de symétrie. Ils lui ont alors associé la méthode des déphasages généralisés introduits par **DeWill** et **Toulouse** pour résoudre complètement le problème des vibrations des surfaces cristallines [27,28]. Ils ont alors détaillé cette méthode simplifiée, qui est en principe générale, dans le cas d'un cristal monoatomique cubique simple, avec des interactions centrales entre premiers voisins. En 1971, **Masriet al.** [29] ont à leur tour appliqué cette méthode simplifiée des fonctions de Green à l'étude des vibrations de la surface (100) du modèle de cristal cubique simple de **Rosenzweig** [2]. Ils ont alors retrouvé les ondes de **Rayleigh** à la limite des grandes longueurs d'ondes, et de plus, ils ont montré l'existence d'états localisés en surface dans le **gap** situé entre les bandes du cristal infini.

Durant ces dernières années, cette méthode a été très utilisée pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes réels, avec quelques variantes dans le formalisme mathématique, elle est devenue aussi une technique de référence souvent utilisée dans la détermination des états de magnons localisés en surface [30].

Le principe de la 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 du plan bissecteur de deux plans atomiques consécutifs. L'effet de cette modification sur la dynamique vibrationnelle des atomes constituant le système peut être interprété comme une perturbation qui transforme la matrice dynamique  $M_d$  du système illimité en une matrice  $M_s$  ayant la forme suivante :

$$M_s = (M_d + M_p) \quad (\text{II.5})$$

Où  $M_p$  représente la matrice de perturbation composée d'une sous matrice non nulle dont l'ordre fini dépend du nombre de plans affectés par la perturbation.

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

$$G(\omega^2) = [\omega^2 I - M_d]^{-1} \quad (\text{II.6})$$

Sont équivalent  $G_s(\omega^2)$  pour le système perturbé s'écrit :

$$G_s(\omega^2) = [\omega^2 I - M_s]^{-1}$$

$$G_s(\omega^2) = [\omega^2 I - (M_d + M_p)]^{-1}$$

$$\Rightarrow G_s(\omega^2) = [(\omega^2 I - M_d) \left( I - \frac{M_p}{\omega^2 I - M_d} \right)]^{-1}$$

$$\Rightarrow G_s(\omega^2) = [(\omega^2 I - M_d) \{ (I - G(\omega^2) \cdot M_p \}]^{-1}$$

D'où la relation matricielle suivante :

$$G_s(\omega^2) = [I - G(\omega^2) \cdot M_p]^{-1} \cdot G(\omega^2) \quad (\text{II.7})$$

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

## IV.2. Calcul des densités d'état vibrationnelles

Beaucoup de propriétés physiques intéressantes induites par les excitations élastiques ou magnétiques, sont obtenus à travers un calcul de densité d'état  $D(\Omega)$  [31], définie d'une manière que la quantité  $D(\Omega)d(\Omega)$  soit le nombre d'état d'énergies compris entre  $\Omega$  et  $(\Omega + d\Omega)$ . Dans la limite thermodynamique,  $D(\Omega)$  est considérée comme étant une fonction continue permettant le calcul de toutes les quantités thermodynamiques 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, donnée par la définition standard  $F = U - TS$ , où  $U$  est l'énergie interne du système considéré,  $S$  son entropie, et  $T$  étant sa température absolue [2].

Nous pouvons faire un calcul de densité d'états vibrationnelles au voisinage d'une surface métallique donnée en utilisant un formalisme basé essentiellement sur les fonctions de *Green* et la méthode de raccordement [24,25]. Pour cela, il faut tout d'abord calculer la densité

spectrale. Le moyen le plus direct pour avoir cette dernière est d'utiliser l'opérateur de *reen*, qui peut être exprimé d'une manière très compacte, en utilisant la méthode de raccordement [2], sous la forme suivante :

$$G(\Omega^2 + i\varepsilon, \varphi_x, \varphi_y, \zeta, \lambda) = [(\Omega^2 + i\varepsilon)I - M_s(\varphi_x, \varphi_y, \zeta, \lambda)]^{-1} \quad (\text{II.8})$$

La matrice des densités spectrales, pour un vecteur d'onde parallèle à la direction de la surface métallique est alors donnée par la relation suivante :

$$\rho_{(\alpha,\beta)}^{(l,l')}(\Omega, \varphi_x, \varphi_y) = 2\Omega \sum_m P_{\alpha m}^l \cdot P_{\beta m}^{l'*} \cdot \delta(\Omega^2 - \Omega_m^2) \quad (\text{II.9})$$

Où  $l$  et  $l'$  représentent deux sites différents,  $\alpha$  et  $\beta$  deux différentes directions cartésiennes, et  $P_{\alpha m}^l$  la composante  $\alpha$  du vecteur déplacement de l'atome  $l$  pour la branche d'énergie  $\Omega_m$ .

La densité d'état, qui correspond à la somme sur  $\varphi_x$  et  $\varphi_y$  de la trace des matrices de densités spectrales, peut alors s'écrire sous la forme générale suivante :

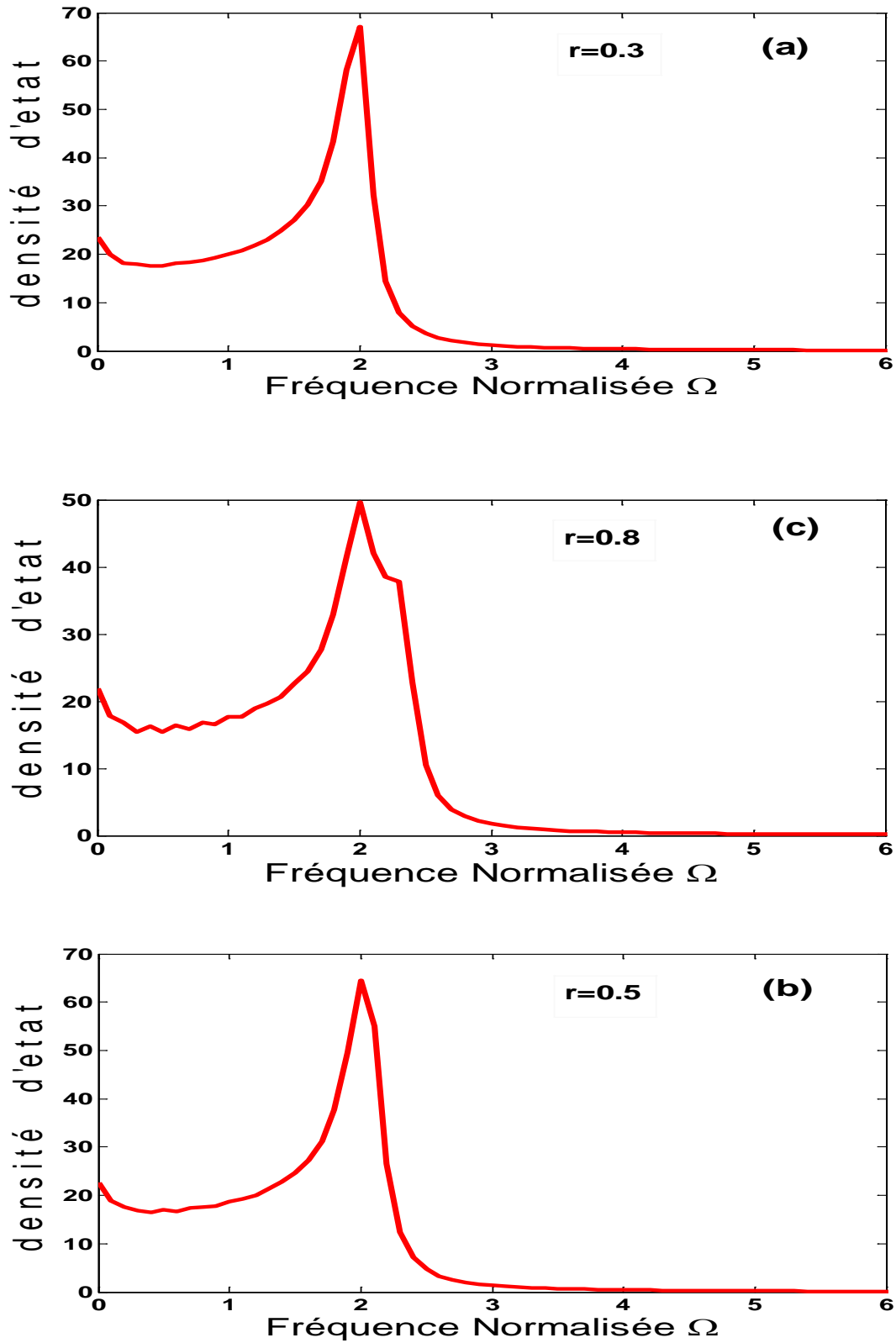
$$D(\Omega) = \sum_{\varphi_x, \varphi_y} \sum_{la} \rho_{\alpha, \alpha}^{(l,l')}(\Omega, \varphi_x, \varphi_y) = -\frac{2\Omega}{\pi} \sum_{\varphi_x, \varphi_y} \sum_{la} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [Im G_{aa}^{ll'}(\varphi_x, \varphi_y, \Omega^2 + i\varepsilon)] \quad (\text{II.10}).$$

### IV.3. Résultats et discussion

#### IV.3.1. La densité d'état :

La densité d'état phononique d'un réseau parfait, représentée sur la figure (II.6) pour différentes valeurs de constante de force  $r$ .

On remarque que lorsque on augmente la valeur de  $r$ , l'apparition d'une marche vers les hautes fréquences avec une diminution de la valeur maximale des pics de la densité d'état.



**Figure II.6** : densité d'état d'un réseau parfait pour différentes valeurs de  $r$  ( $r = 0.3, r = 0.5, r = 0.8$ ).

## Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié la dynamique vibrationnelle d'un guide d'onde parfait quasi-bidimensionnels « un plan », dans lequel nous avons procédé à la détermination des équations de mouvement dans les deux directions cartésiennes d'un atome dans le plan, ce qui nous a amené à établir la matrice dynamique de système et les équations propres de système, puis en utilisant des programmes de simulation adaptés « **MATLAB** » nous avons présenté les courbes de dispersions obtenues, les bandes passantes et interdites pour les différentes valeurs de  $\varphi_y$  et  $r$  lors des calculs numériques. Les résultats obtenus sont discutés et commentés.

Nous utiliserons l'ensemble des résultats précédemment trouvés dans le prochain chapitre, qui porte sur la diffusion de phonons par un guide d'onde perturbé par différents défauts. Nous verrons que les courbes de dispersion et l'évanescence du champ vibrationnel sont indispensables pour traiter la chaleur spécifique.

## Introduction

Le présent chapitre est consacré à l'étude de l'effet de défaut sur les propriétés de propagation d'ondes élastiques dans les systèmes bidimensionnels. Cette étude sera menée dans un cas simple de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins.

Actuellement, pour décrire l'impact des défauts de structure sur les propriétés de localisation et de propagation, plusieurs méthodes théoriques et expérimentales sont proposées entre autres ; la méthode de diagonalisation directe [33], La méthode des fonctions de Green [33] et La méthode de raccordement [22].

La méthode de calcul utilisée dans notre travail est la méthode de raccordement développée initialement pour l'étude des phénomènes de localisation que nous adaptons aux calculs des propriétés de transport cohérent dans les systèmes bidimensionnels en étudiant le phénomène de diffusion d'ondes élastiques.

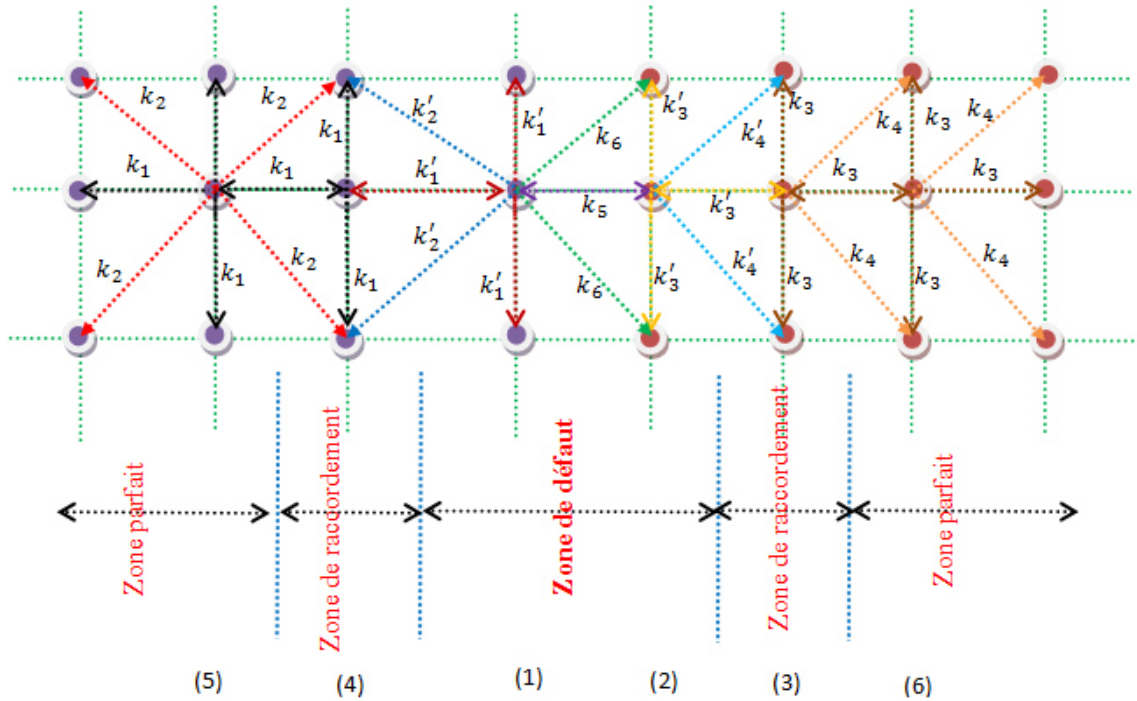
Dans le premier cas, nous appliquerons ce formalisme au cas d'un défaut d'interface, c'est-à-dire, le système est composé de deux structures carrées bidimensionnelles de masses différentes  $M_1$  et  $M_2$  respectivement ( $S(1) : M_1, S(2) : M_2$ ). Dans le deuxième cas nous l'étendrons à un autre type de défaut qui se présente sous la forme d'un réseau parfait de masse  $M_1$  dans lequel on intercale une ligne infinie d'atomes de masse  $M_2$  dans la direction  $Oy$  et qui brise la symétrie dans la direction  $Ox$ . Le troisième cas nous considérons un défaut plus complexe que le deuxième c'est-à-dire on insère un double plan dans la structure.

## I. Description du modèle

### I. 1. Premier cas : un système interface

Le système modèle de basse dimension que nous introduisons dans le cadre de cette partie est un système interface, ce modèle est composé de deux réseaux cristallins plans reliés l'un à l'autre, chaque réseau constituée des atomes de masse  $M_1$  et  $M_2$  respectivement, représenté dans la (figure III.1). Pour une étude détaillée de cette structure et afin d'appliquer le formalisme de raccordement, en tenant compte uniquement des interactions entre premiers et seconds voisins, nous définirons pour cela plusieurs régions d'étude. Le système est composé tout d'abord d'une région de défaut avec des atomes  $M_1$  (couleur verte) et  $M_2$  (couleur rouge), d'une région de volume suffisamment éloignée du défaut pour avoir des propriétés du système semi-infini ; d'une région à gauche et région à droite avec des atomes

$M_1$  (à gauche) et  $M_2$  (à droite) qui représentent les zones parfaites. Enfin il ya deux régions de raccordement qui sont définies par les sites atomiques situés entre la région de défaut et la région de volume.



**Figure III.1 :** Schéma d'un modèle d'un système interface.

L'étude dynamique dans le volume pour le système parfait a été faite au chapitre II. Notre étude est réalisée dans le cadre de l'approximation harmonique limité aux premiers et seconds voisins.

## I.2. Deuxième cas : un défaut étendu

Dans ce cas, nous généralisons l'étude menée dans le cas précédent à un autre défaut de structure ; un défaut étendu, c'est-à-dire, un réseau cristallins ayant un défaut qui sont des puits infinis espacés d'un paramètre du réseau.

Le système à étudier est un réseau cristallin plan formé d'atomes de masses  $M_1$  qui peuvent se déplacer dans deux directions, ce plan infini d'atomes  $M_1$  constitue un défaut qui symbolisé par un plan d'atomes de masses  $M_2$ , ce système reliées par des ressortes harmoniques. La figure III.2 schématise le modèle et qui définit les différentes régions d'étude de système (les mêmes régions dans le premier cas).

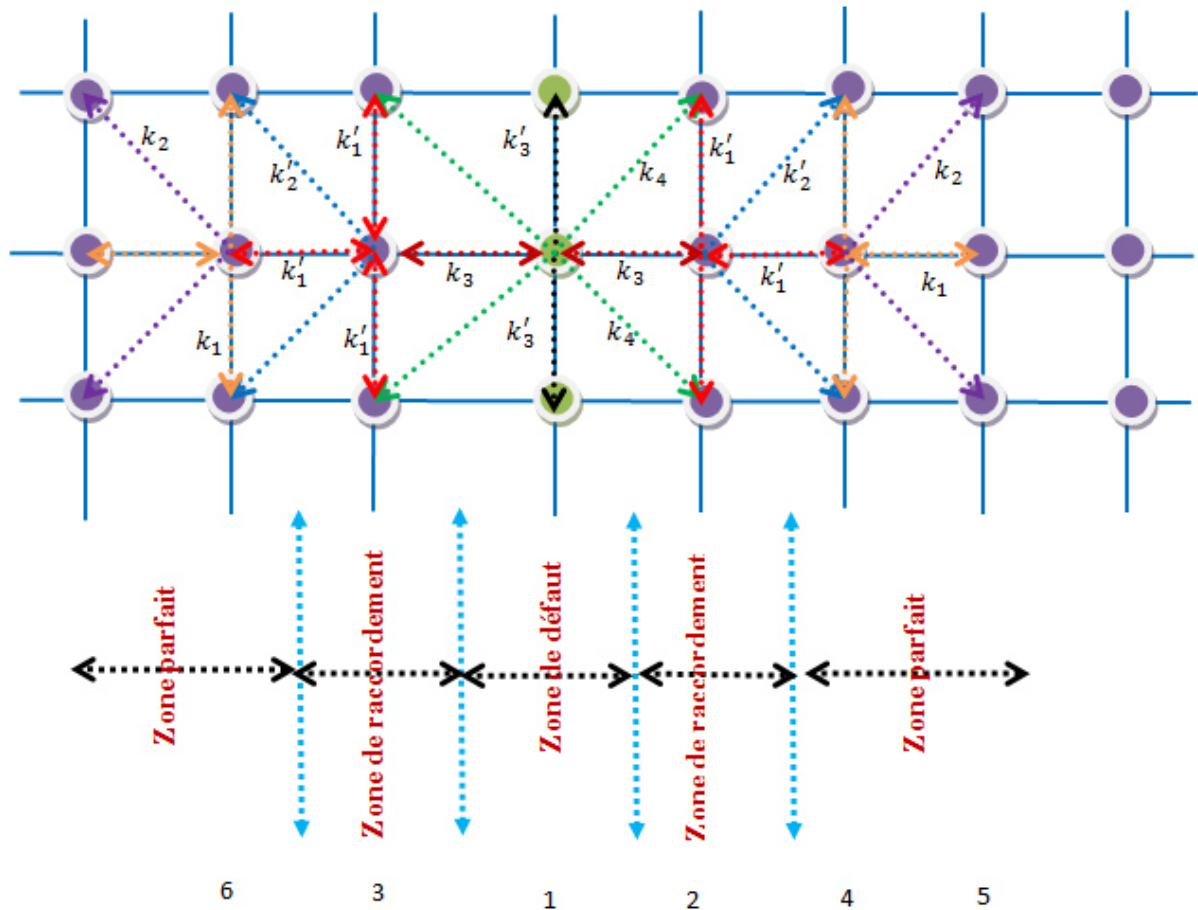


Figure III.2 : Schéma d'un modèle d'un défaut étendu.

### I.3. Troisième cas : un défaut à deux plans

Notre modèle est constitué de trois chaînes atomiques linéaires infinies, les chaînes sont parallèles se composent de masses  $M_1$  qui peuvent se déplacer dans deux directions, ce plan infini d'atomes  $M_1$  constitue un défaut de la masse  $M_2$ , chaque atome est relié à son premier et seconde voisins, les atomes  $M_1$  et  $M_2$  sont différentes l'un par rapport à l'autre, les distances entre masses adjacentes sont considérées égales suivant les deux directions cartésiennes  $x$  et  $y$  du plan. Figure III.3 montre le modèle.

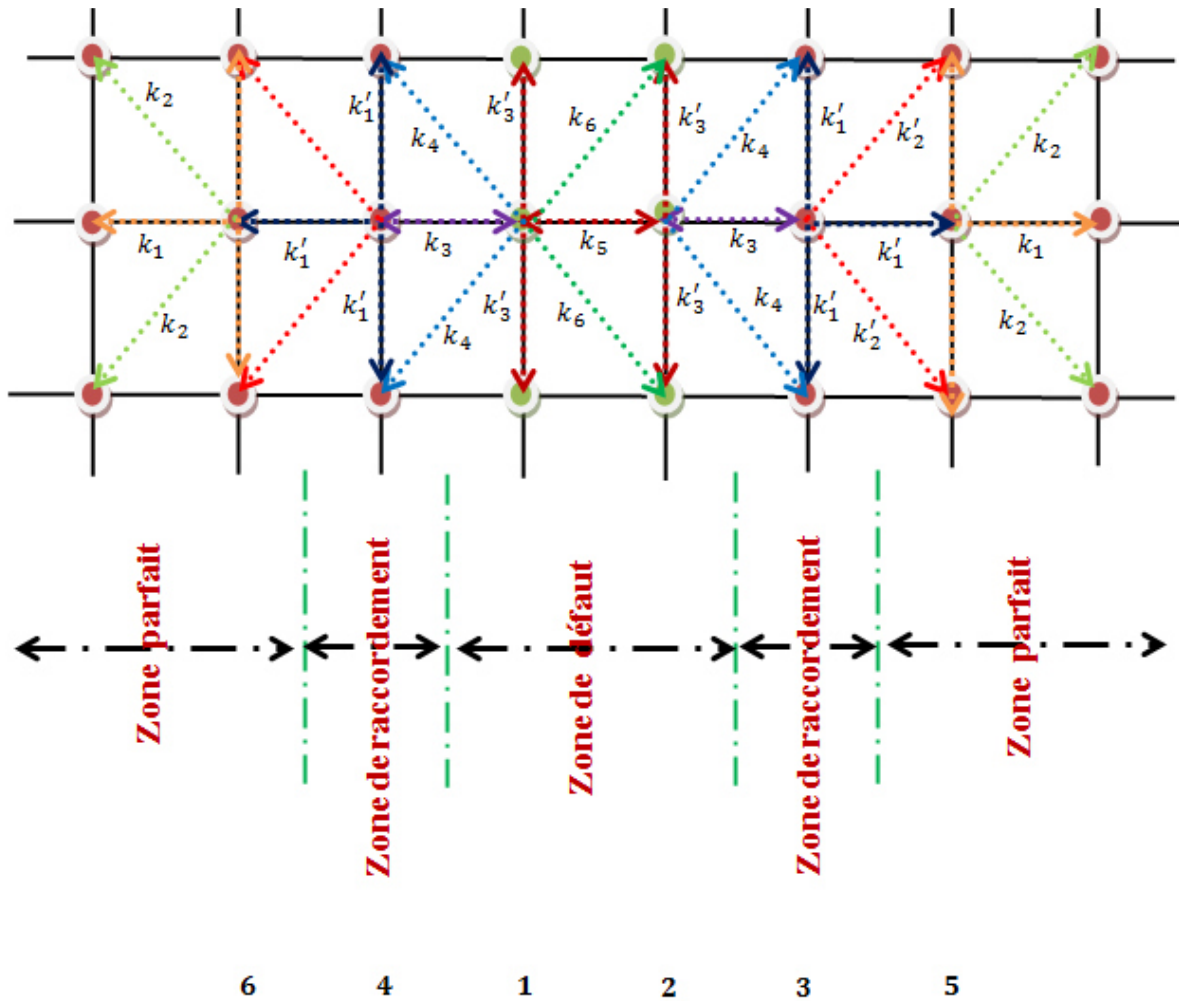


Figure III.3 : Schéma d'un modèle d'un défaut de deux plan.

Les rapports entre les différentes constantes des forces en volume et la région perturbée sont définis comme suit, pour les trois cas :

$$r = \frac{k_2}{k_1} ; k'_1 = \lambda k_1 ; k'_2 = \lambda k_2 ; k'_3 = \lambda k_3 ; k'_4 = \lambda k_4$$

$$\frac{k'_2}{k_1} = \lambda r ; \frac{k_3}{k_1} = \gamma ; \frac{k_4}{k_1} = \beta ; \frac{k'_3}{k_1} = \lambda \gamma ; \frac{k'_4}{k_1} = \lambda \beta ; \frac{k_5}{k_1} = \alpha_1 ; \frac{k_6}{k_1} = \alpha_2$$

$$e = \frac{M_2}{M_1} : \text{rapport entre les atomes.}$$

## II. Matrice dynamique du système

La matrice dynamique  $\mathbf{D}$ , trouve son origine dans l'écriture des équations du mouvement de vibration à la zone irréductible des figures (III.1), (III.2),(III.3) ,ainsi que les atomes de raccordement, possédant un environnement du guide d'onde parfait, La matrice correspondante à l'écriture des équations de mouvement de ces atomes, est une matrice rectangulaire formée de  $n$  lignes et  $m$  colonnes. Elle contient plus d'inconnues que d'équations. Elle peut s'écrire sous la forme :

$$[D] |u\rangle = |0\rangle \quad (\text{III.1})$$

$$\text{Avec : } \dim [D] = (n \times m) \quad (\text{III.2})$$

$$\dim . |u\rangle = m \times 1 \quad (\text{III.3})$$

$$\dim . |0\rangle = n \times 1 \quad (\text{III.4})$$

La quantité  $|u\rangle$  dans l'équation (III.1), représente les déplacements vibrationnels de tous les sites de la zone perturbée du système modèle. Les matrices dynamiques obtenues pour chacune des trois configurations sont :

### Première cas :

$$[D] |u\rangle = |0\rangle, \text{ Avec } \dim [D] = (8 \times 12)$$

$$\dim . |u\rangle = 12 \times 1$$

$$\dim . |0\rangle = 8 \times 1$$

$$[D] = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & d_2 & d_3 & 0 & 0 & d_4 & d_5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_6 & d_3 & d_7 & 0 & 0 & d_5 & d_8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_2 & -d_3 & d_9 & 0 & d_{10} & d_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -d_3 & d_7 & 0 & d_{12} & d_{11} & d_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_{10} & -d_{11} & d_{14} & 0 & 0 & 0 & d_{15} & d_{16} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -d_{11} & d_{13} & 0 & d_{17} & 0 & 0 & d_{16} & d_{18} & 0 & 0 \\ d_4 & -d_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{19} & 0 & 0 & 0 & d_{20} & d_{21} \\ -d_5 & d_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{22} & 0 & 0 & d_{21} & d_{23} \end{pmatrix}$$

Avec :

$$d_1 = \Omega^2 - a_1 - \lambda - a_2 - \lambda r$$

$$d_5 = -\lambda r (i \sin(\varphi_y))$$

$$d_2 = a_1 + a_2 (\cos(\varphi_y))$$

$$d_6 = \Omega^2 - 2\lambda - a_2 - \lambda r + \lambda (2 \cos(\varphi_y))$$

$$d_3 = a_2 (i \sin(\varphi_y))$$

$$d_7 = a_2 (\cos(\varphi_y))$$

$$d_4 = \lambda + \lambda r (\cos(\varphi_y))$$

$$d_8 = \lambda r (\cos(\varphi_y))$$

$$d_9 = e\Omega^2 - \gamma\lambda - a_2 - \lambda\beta - a_1$$

$$d_{17} = e\Omega^2 - 2\gamma + \gamma (2 \cos(\varphi_y)) - \lambda\beta - \beta$$

$$d_{10} = \lambda\gamma + \lambda\beta (\cos(\varphi_y))$$

$$d_{18} = \beta (\cos(\varphi_y))$$

$$\begin{aligned}
d_{11} &= \lambda\beta(i \sin(\varphi_y)) & d_{19} &= \Omega^2 - \gamma - 1 - \lambda r - r \\
d_{12} &= e\Omega^2 - 2\gamma\lambda - a_2 - \lambda\beta - \gamma\lambda(2 \cos(\varphi_y)) & d_{20} &= 1 + r(\cos(\varphi_y)) \\
d_{13} &= \lambda\beta(\cos(\varphi_y)) & d_{21} &= -r(i \sin(\varphi_y)) \\
d_{14} &= e\Omega^2 - \gamma\lambda - \gamma - \lambda\beta - \beta & d_{22} &= \Omega^2 - 2 - \lambda r - r + (2 \cos(\varphi_y)) \\
d_{15} &= \gamma + \beta(\cos(\varphi_y)) & d_{23} &= r(\cos(\varphi_y)) \\
d_{16} &= \beta(i \sin(\varphi_y))
\end{aligned}$$

Ou  $\Omega = \left[ \frac{m \omega^2}{k_1} \right]^{1/2} = \frac{\omega}{\omega_0}$  est la fréquence normalisée sans dimension.  $r = \frac{K_2}{K_1}$  : le rapport entre les constantes de force des deuxièmes et premiers voisins du réseau parfait.  $\omega_0 = \sqrt{\frac{k_1}{m}}$  est la fréquence propre de vibration de la structure sans défaut.

### Deuxième cas :

$$[D] | u = | 0 \rangle, \text{ Avec } \dim [D] = (10 \times 14)$$

$$\dim . | u \rangle = 14 \times 1$$

$$\dim . | 0 \rangle = 10 \times 1$$

$$[D] = \begin{pmatrix}
d_1 & 0 & d_2 & d_3 & 0 & 0 & d_2 & -d_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & d_4 & d_3 & d_5 & -d_3 & d_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
d_2 & -d_3 & d_6 & 0 & 0 & 0 & d_7 & d_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-d_3 & d_5 & 0 & d_9 & 0 & 0 & d_8 & d_{10} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
d_2 & -d_3 & 0 & 0 & d_6 & 0 & 0 & 0 & d_7 & d_8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
d_3 & d_5 & 0 & 0 & 0 & d_9 & 0 & 0 & d_8 & d_{10} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & d_7 & -d_8 & 0 & 0 & d_{11} & 0 & 0 & 0 & d_{12} & d_{13} & 0 & 0 \\
0 & 0 & -d_8 & d_{10} & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 & d_{13} & d_{15} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & d_7 & -d_8 & 0 & 0 & d_{11} & 0 & 0 & 0 & d_{13} & -d_{13} \\
0 & 0 & 0 & 0 & -d_8 & d_{10} & 0 & 0 & 0 & d_{16} & 0 & 0 & -d_{13} & d_{15}
\end{pmatrix}$$

Avec :

$$\begin{aligned}
d_1 &= e\Omega^2 - 2\gamma - 2\beta & d_9 &= \Omega^2 - 2\lambda + \lambda(2 \cos(\varphi_y)) - \lambda r - \beta \\
d_2 &= \gamma + \beta(\cos(\varphi_y)) & d_{10} &= \lambda r(\cos(\varphi_y)) \\
d_3 &= \beta(i \sin(\varphi_y)) & d_{11} &= \Omega^2 - 1 - r - \lambda - \lambda r \\
d_4 &= e\Omega^2 - 2\gamma\lambda - 2\beta - \lambda\gamma^*(2 \cos(\varphi_y)) & d_{12} &= 1 + r(\cos(\varphi_y)) \\
d_5 &= \beta(\cos(\varphi_y)) & d_{13} &= r(i \sin(\varphi_y)) \\
d_6 &= \Omega^2 - 2\lambda - \gamma - \lambda r - \beta & d_{14} &= \Omega^2 - 2 + (2 \cos(\varphi_y)) - \lambda r - r \\
d_7 &= \lambda + \lambda r(\cos(\varphi_y)) & d_{15} &= r(\cos(\varphi_y)) \\
d_8 &= \lambda r(i \sin(\varphi_y)) & d_{16} &= \Omega^2 - 2 + (2 \cos(\varphi_y)) - 2r
\end{aligned}$$

Troisième cas :

$$[D] | u = | 0 \rangle, \text{ Avec } \dim [D] = (12 \times 16)$$

$$\dim . | u \rangle = 16 \times 1$$

$$\dim . | 0 \rangle = 12 \times 1$$

$$[D] = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & d_2 & d_3 & 0 & 0 & d_4 & d_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_6 & d_3 & d_7 & 0 & 0 & d_5 & d_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_2 & -d_3 & d_1 & 0 & d_4 & -d_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -d_3 & d_7 & 0 & d_6 & -d_5 & d_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_4 & d_5 & d_9 & 0 & 0 & 0 & d_{10} & d_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_5 & d_8 & 0 & d_{12} & 0 & 0 & d_{11} & d_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ d_4 & -d_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_9 & 0 & 0 & 0 & d_{10} & -d_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -d_5 & d_8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{12} & 0 & 0 & -d_{11} & d_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{10} & -d_{11} & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 & 0 & d_{15} & d_{16} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{11} & d_{13} & 0 & 0 & 0 & d_{17} & 0 & 0 & d_{16} & d_{18} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{10} & d_{11} & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 & 0 & d_{15} & -d_{16} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{11} & d_{13} & 0 & 0 & 0 & d_{17} & 0 & d_{18} & -d_{16} & 0 \end{pmatrix}$$

Avec :

$$d_1 = e\Omega^2 - 2^*a_1 - a_2 - \gamma - \beta$$

$$d_{10} = \lambda + \lambda r(\cos(\varphi_y))$$

$$d_2 = a_1 + a_2^*(\cos(\varphi_y))$$

$$d_{11} = \lambda r(i \sin(\varphi_y))$$

$$d_3 = a_2^*(i \sin(\varphi_y))$$

$$d_{12} = \Omega^2 - 2^*\lambda + \lambda^*(2\cos(\varphi_y)) - \lambda r - \beta$$

$$d_4 = \gamma\beta^*(\cos(\varphi_y))$$

$$d_{13} = \lambda r(\cos(\varphi_y))$$

$$d_5 = -\beta(i \sin(\varphi_y))$$

$$d_{14} = \Omega^2 - \lambda - 1 - r - \lambda r$$

$$d_6 = e\Omega^2 - 2^*a_1 + a_1^*(2\cos(\varphi_y)) - \beta - a_2$$

$$d_{15} = 1 + r(\cos(\varphi_y))$$

$$d_7 = a_2^*(\cos(\varphi_y))$$

$$d_{16} = r(i \sin(\varphi_y))$$

$$d_8 = \beta^*(\cos(\varphi_y))$$

$$d_{17} = \Omega^2 - 2 + (2\cos(\varphi_y)) - r - \lambda r$$

$$d_9 = e\Omega^2 - \lambda - \gamma - \beta - \lambda r$$

$$d_{18} = r(\cos(\varphi_y))$$

### III. Matrice de raccordement

L'objectif de cette partie, dans le cadre de notre étude, 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. La connaissance simultanée des facteurs de phase  $(Z, 1/Z)$ , déterminés à partir de la matrice dynamique en volume (système parfait) du système tubulaire quasi-2D, permet de définir la matrice de raccordement, 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 différentes, c'est pour cela que nous allons définir deux bases distinctes  $\{R^+\}$  et  $\{R^-\}$ , la première caractérise la région de raccordement gauche (RRG) et la seconde caractérise la région de raccordement droite (RRD). 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 2.

Pour un atome appartenant à la région de raccordement gauche (RRG), on peut décrire ses déplacements vibrationnels de la manière suivante [23] :

$$u_\alpha(n, m) = \sum_{v=1}^2 [Z(v)]^{-l} R p(\alpha, v) \quad \text{pour } l < 1 \quad (\text{III.5})$$

De même, pour un atome de la région droite (RRD)

$$u_\alpha(n, m) = \sum_{v'=1}^2 [Z(v')]^{-l} T p'(\alpha, v') \quad \text{pour } l > 1 \quad (\text{III.6})$$

Ici  $\alpha$  représente les directions cartésiennes et  $p(\alpha v)$ ,  $p'(\alpha v')$  sont les poids pondérés associés aux différents modes évanescents. Ils sont déterminés à l'aide des vecteurs propres de la matrice dynamique  $\mathbf{D}$  définies auparavant.

Le vecteur  $|u\rangle$  des déplacements atomiques des sites de la maille élémentaire de la zone de défaut (voir les figures (III.1, III.2, III.3)) peut se décomposer en deux parties :

La première est partie irréductible est notée par  $|irr\rangle$ , elle est constituée par les amplitudes de vibrations des  $n$  atomes irréductibles formant la région du défaut.

Quant à la seconde est la partie de raccordement, qui est notée par  $|rac\rangle$  elle est formée par les amplitudes de vibration associées aux  $m$  atomes raccordés, ceci pour les deux bases  $|R\rangle$  et  $|T\rangle$  Ainsi on écrit [23]

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{III.7})$$

$$\text{Avec : } \dim |irr\rangle = (n \times 1), \dim |rac\rangle = (m \times 1) \quad (\text{III.8})$$

A partir de là, le raccordement des atomes peut être décrit à l'aide des expressions suivantes :

$$|u^{\otimes} = \begin{pmatrix} |irr^{\otimes} \\ |rac^{\otimes} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr^{\otimes} \\ |R^{\otimes} \\ |T^{\otimes} \end{pmatrix} \quad (III.9)$$

Où  $I_d$  est une matrice identité de dimension  $(n \otimes n)$  ; et  $R_1, R_2, R_3, R_4$  sont des sous matrices de dimension  $((m-n)/2 \times (m-n)/2)$ . Elles sont données par :

$$R_1 = \begin{bmatrix} Z(1,1).p(1,1) & Z(1,2).p(1,2) \\ Z(2,1).p(2,1) & Z(2,2).p(2,2) \end{bmatrix}$$

$$R_2 = \begin{bmatrix} Z(1,1).p'(1,1) & Z(1,2).p'(1,2) \\ Z(2,1).p'(2,1) & Z(2,2).p'(2,2) \end{bmatrix}$$

$$R_3 = \begin{bmatrix} Z^2(1,1).p(1,1) & Z^2(1,2).p(1,2) \\ Z^2(2,1).p(2,1) & Z^2(2,2).p(2,2) \end{bmatrix}$$

$$R_4 = \begin{bmatrix} Z^2(1,1).p'(1,1) & Z^2(1,2).p'(1,2) \\ Z^2(2,1).p'(2,1) & Z^2(2,2).p'(2,2) \end{bmatrix}$$

En posant  $D_R = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix}$ , le système d'équation (III.9) peut s'exprimer à l'aide :

Matrice de raccordement  $D_R$  comme suit :

$$|u^{\otimes} = \begin{pmatrix} |irr^{\otimes} \\ |rac^{\otimes} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr^{\otimes} \\ |R^{\otimes} \\ |T^{\otimes} \end{pmatrix} = D_R \begin{pmatrix} |irr^{\otimes} \\ |R^{\otimes} \\ |T^{\otimes} \end{pmatrix} \quad (III.10)$$

Avec :

$$\dim [D_R] = (m \times n) \quad (III.11)$$

En utilisant la relation (III.10), on peut réécrire le système (III.1) de la manière suivante :

$$D_d(n \times m)[D_R(m \times n)] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (III.12)$$

Soit :

$$[D_s(m \times m)] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (III.13)$$

Ceci, pour des valeurs des rapports de constantes de forces  $\lambda, \gamma, \beta, \alpha_1$  et  $\alpha_2$  données, les modes localisés sur le défaut sont déterminés à partir de la relation de compatibilité :

$$\det([D_s(m \times m)]) = 0 \quad (III.14)$$

Ces modes correspondent à des phonons localisés qui se propagent parallèlement à la chaîne défaut, les déplacements vibrationnels associés de ces phonons s'évanouissent vers les régions dites de volume du plan simple.

Les matrices de raccordement pour les trois défauts auront les dimensions suivantes :

*i. Première cas*

$$\dim I_d = (4 \times 4)$$

Dimensions de chacune des matrices  $R_1, R_2, R_3$  et  $R_4$  sont  $(4 \times 4)$

$$\dim [D_s] = (8 \times 8)$$

*ii. Deuxième cas*

$$\dim I_d = (10 \times 10)$$

Dimensions de chacune des matrices  $R_1, R_2, R_3$  et  $R_4$  sont  $(4 \times 4)$

$$\dim [D_s] = (10 \times 10)$$

*iii. Troisième cas*

$$\dim I_d = (6 \times 6)$$

Dimensions de chacune des matrices  $R_1, R_2, R_3$  et  $R_4$  sont  $(4 \times 4)$

$$\dim [D_s] = (12 \times 12)$$

## IV. Les densités d'états vibrationnels

### IV.1 Premier cas : un système interface :

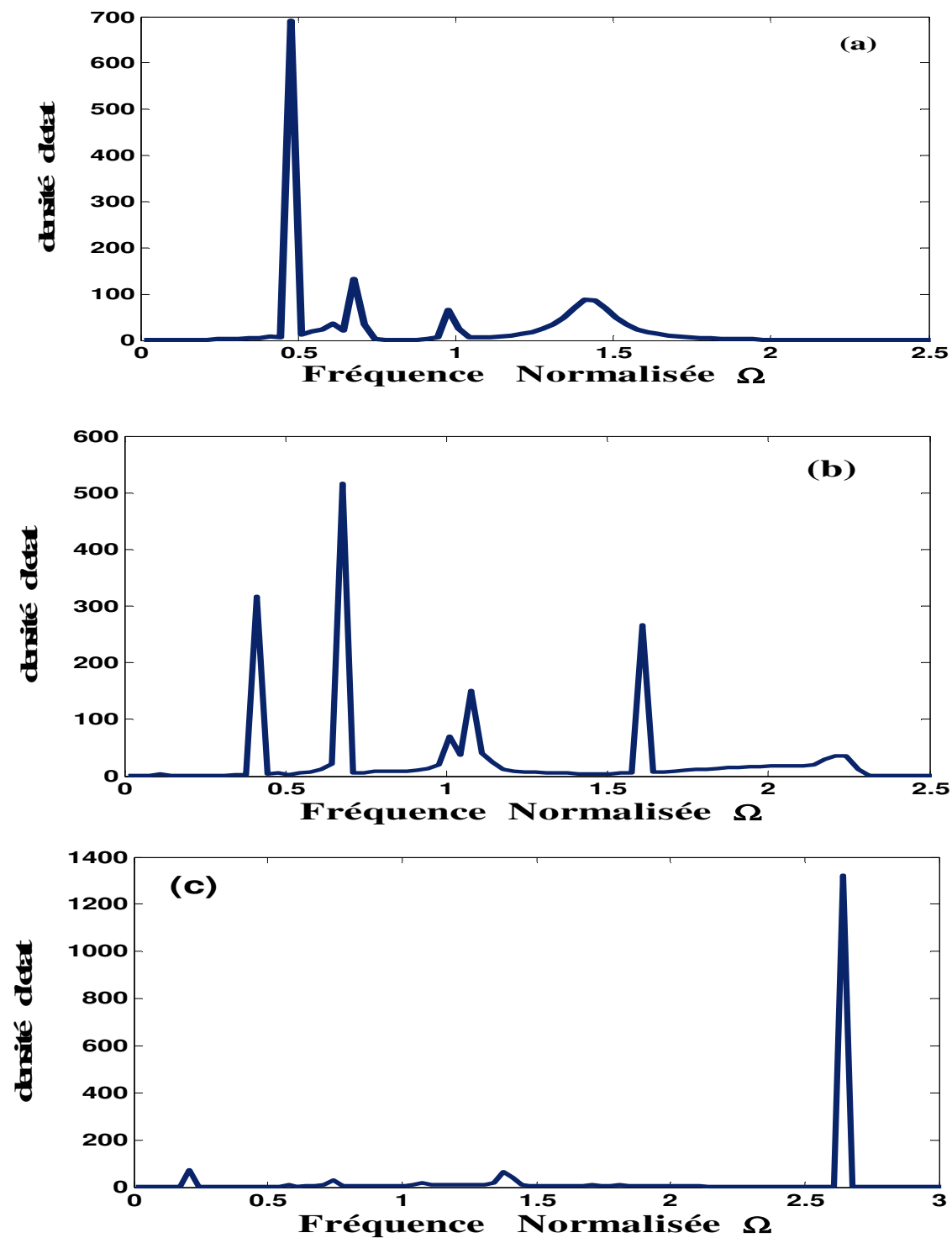
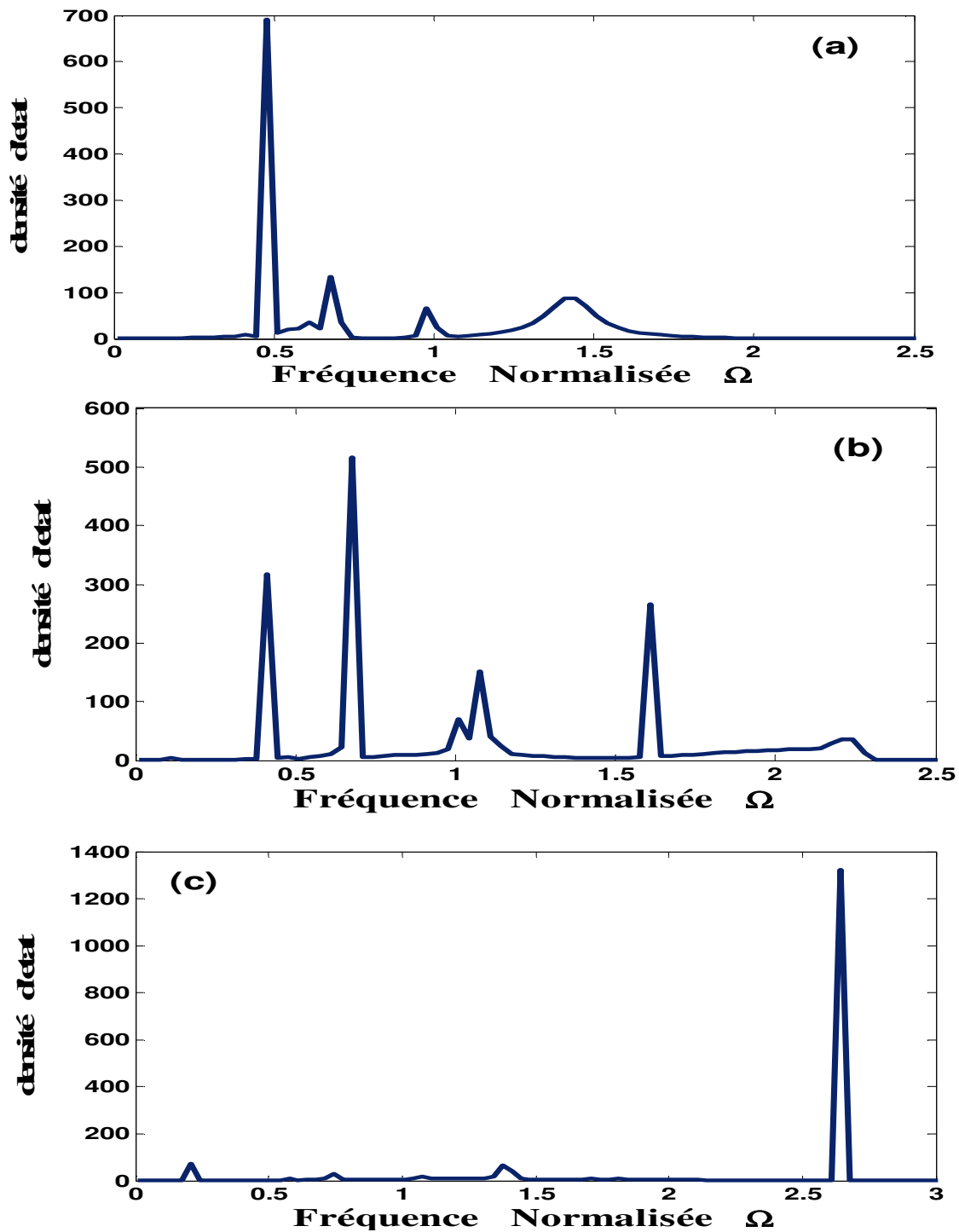


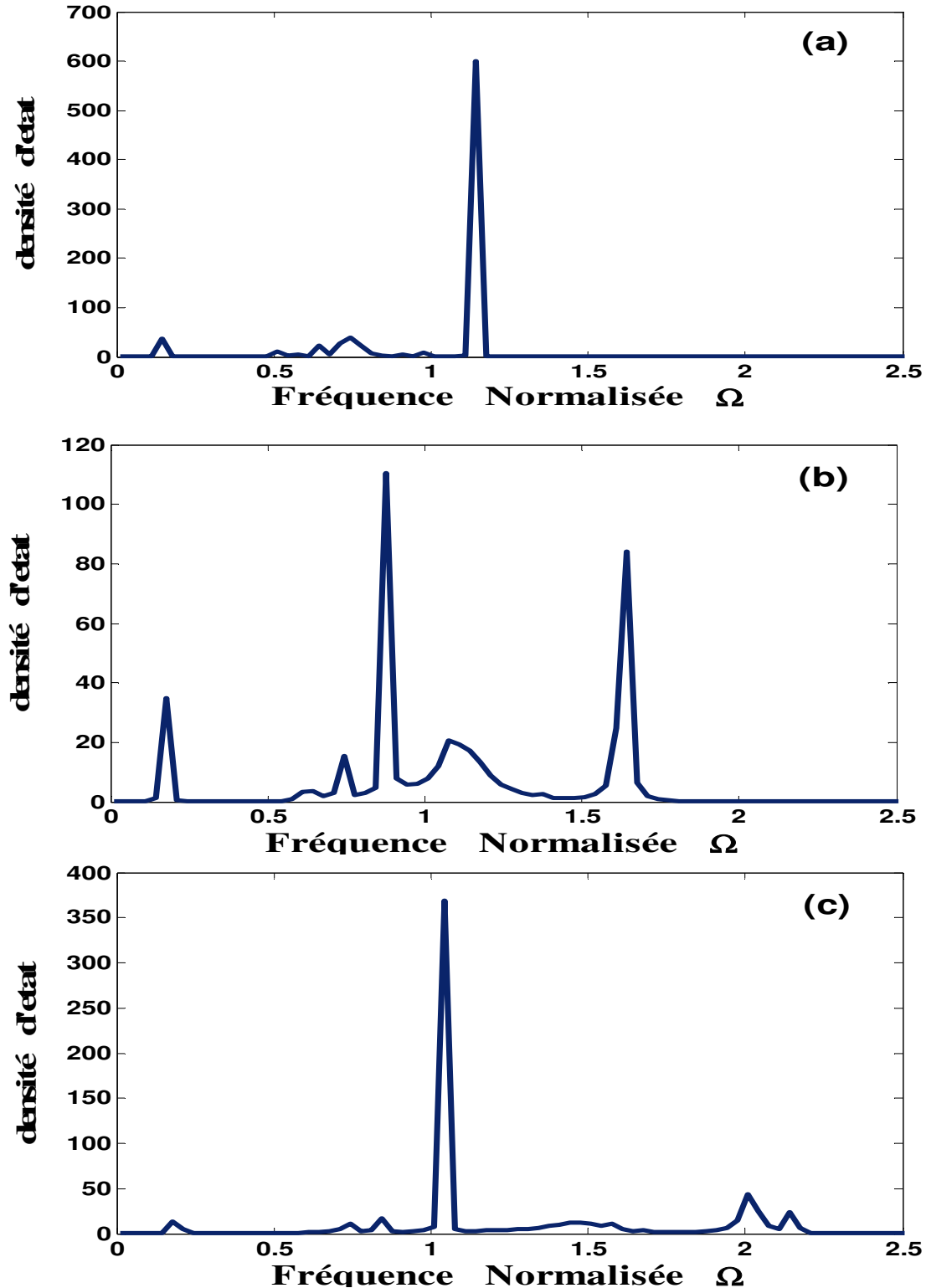
Figure III.4 : Densités d'états dans le cas d'un système interface, dans les trois possibilités de l'environnement élastique : en (a): adoucissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$ , en (b): homogène pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1$  et en (c) durcissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1,5$ .

## IV.2. Deuxième cas : un défaut étendu :



**Figure III. 5:** Densités d'états dans le cas d'un défaut étendu , dans les trois possibilités de l'environnement élastique : en (a) :adoucissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$ , en (b) :homogène pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1$  et en (c) durcissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1.5$ .

## IV.3. Troisième cas : un défaut à deux plans :



**Figure III.6:** Densités d'états dans le cas d'un défaut à deux plans (défaut de masse) , dans les trois possibilités de l'environnement élastique : en (a) adoucissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$  , en (b) : homogène pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1$  et en (c) durcissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1.5$ .

## V. Etat localisée

## V.1.Premier cas : un système interface :

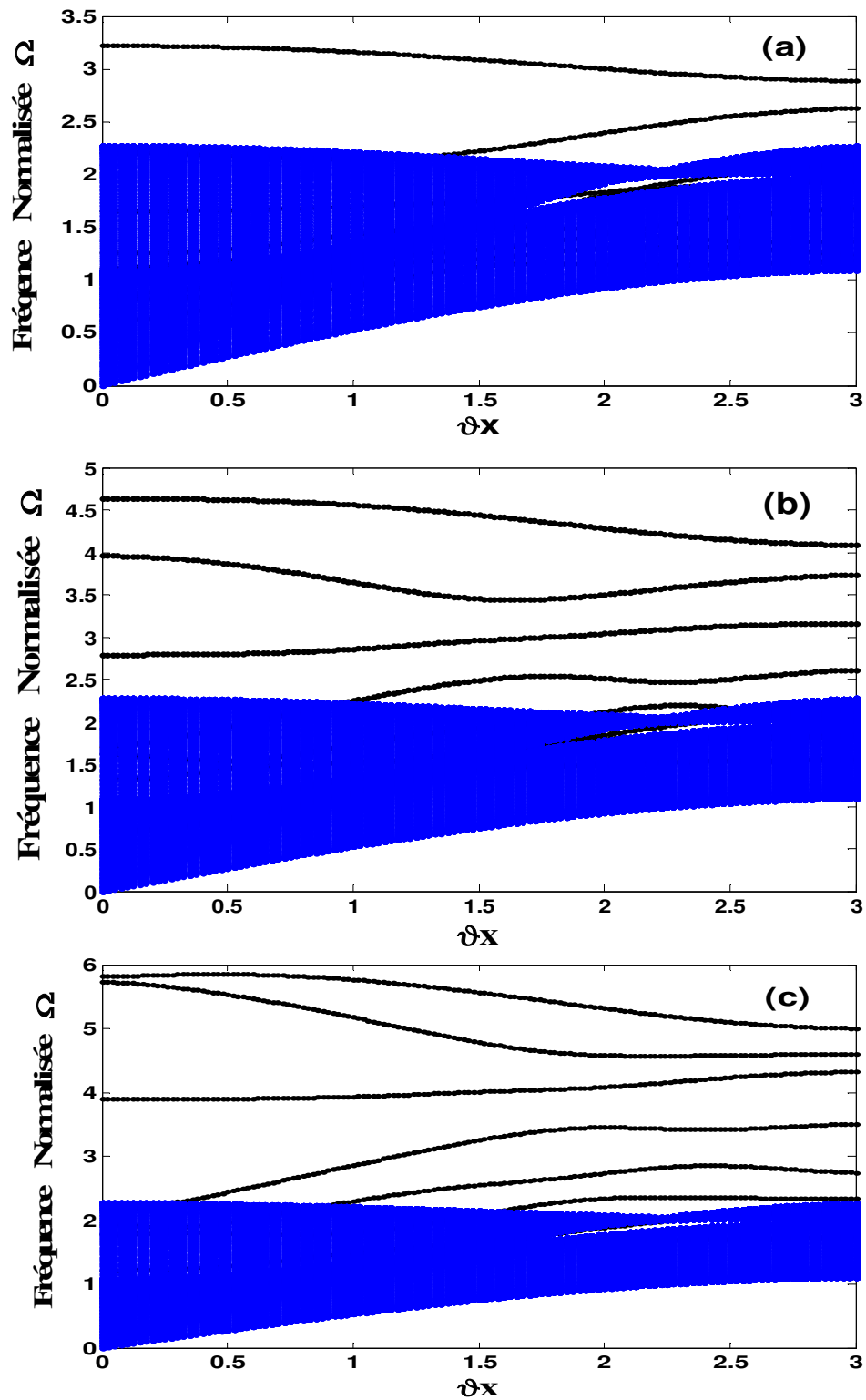
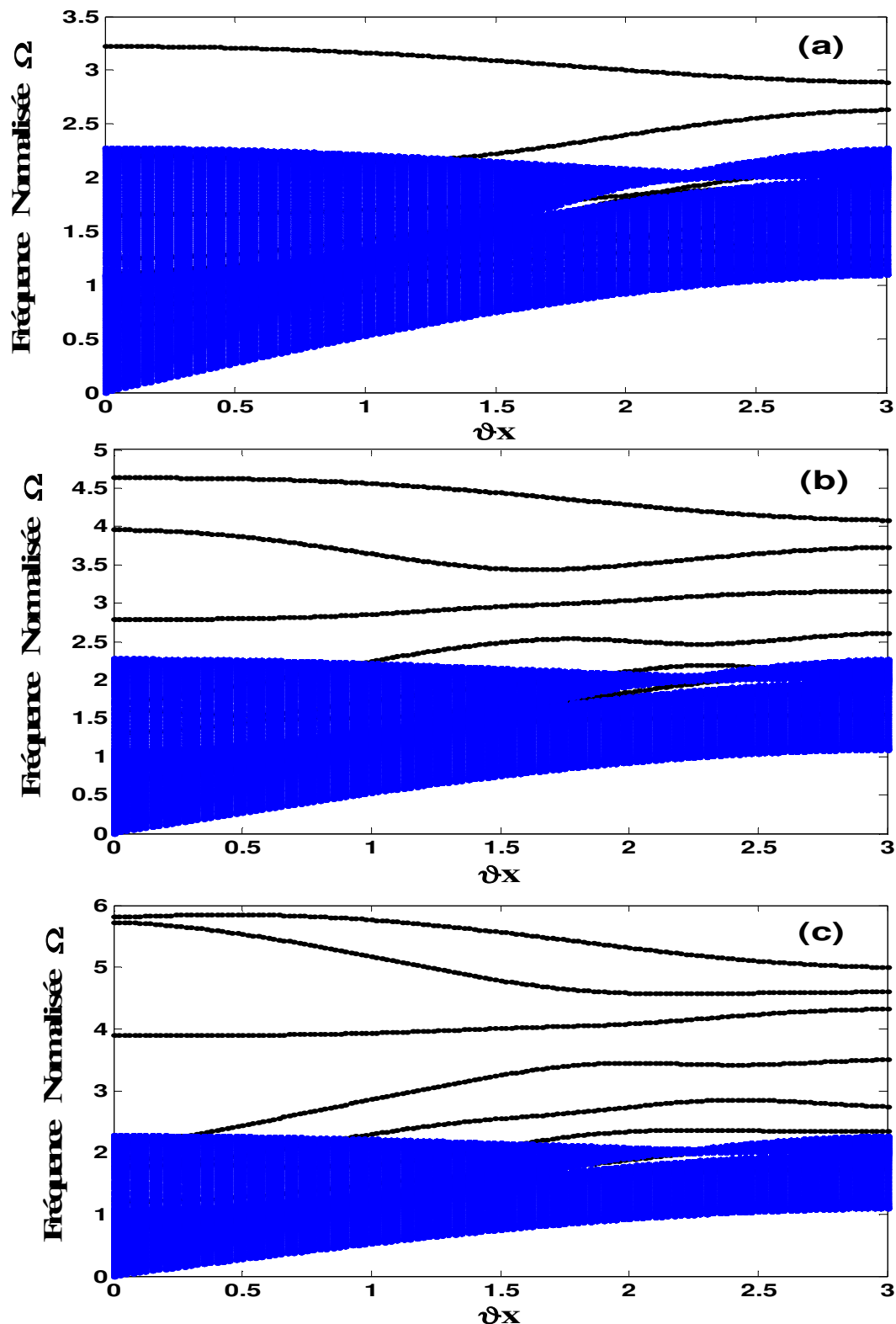


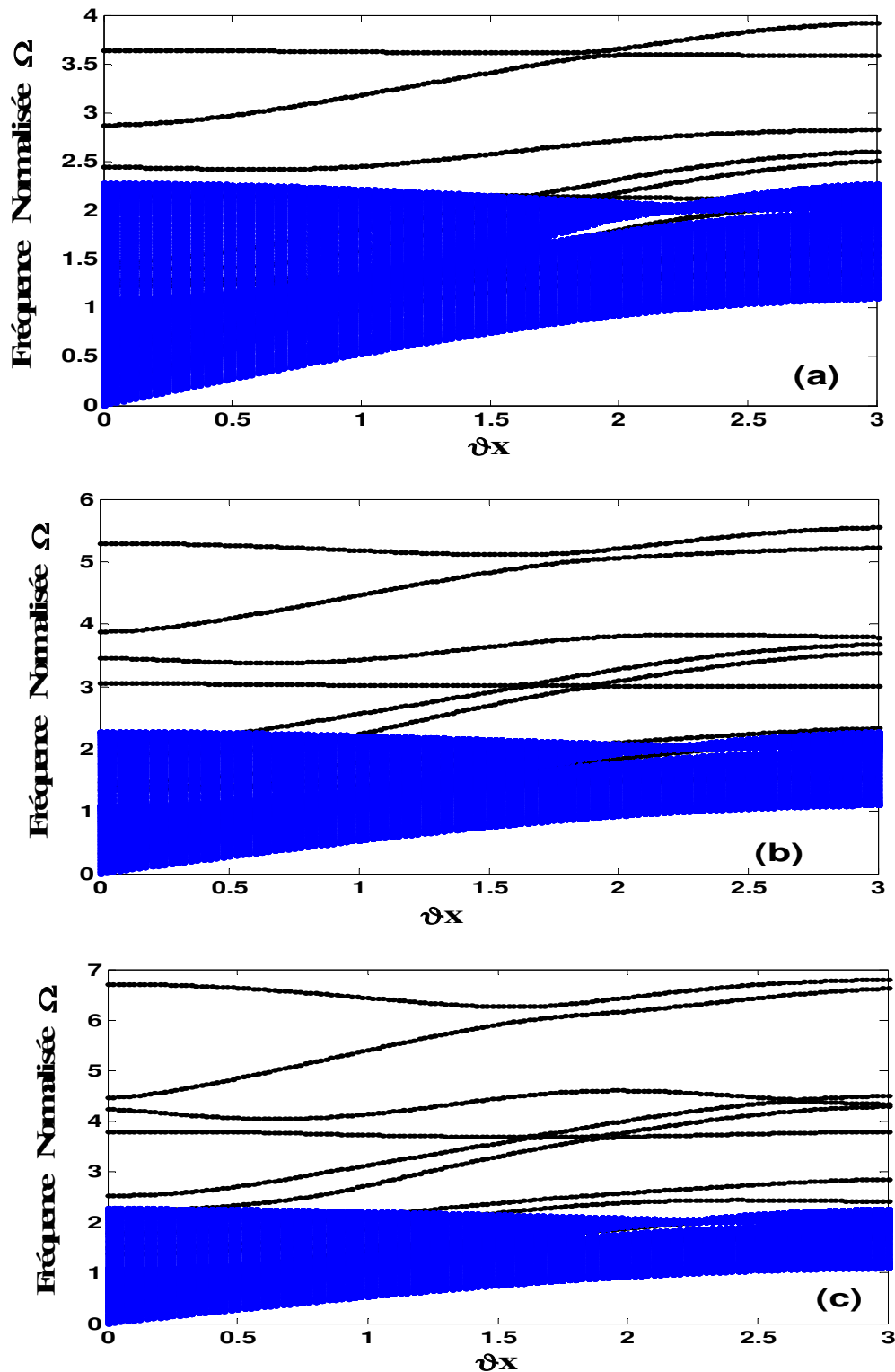
Figure III.7: Etats localisés de phonons dans le cas d'un système interface, dans les trois possibilités de l'environnement élastique : en (a) adoucissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 0,5$  en (b): homogène pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1$  et en (c) durcissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1.5$ .

## V.2. Deuxième cas : un défaut étendu :



**Figure III.8:** États localisés de phonons dans le cas d'un défaut étendu, dans les trois possibilités de l'environnement élastique : en (a) adoucissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$ , en (b) : homogène pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1$  et en (c) durcissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1.5$ .

## V.3. Troisième cas : un défaut à deux plans :



**Figure III.9:** Etats localisés de phonons dans le cas d'un défaut à deux plans (défaut de masse), dans les trois possibilités de l'environnement élastique : en (a) adoucissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$ , en (b) : homogène pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1$  et en (c) durcissement pour  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2 = 1.5$ .

## VI. Discussion et analyse des résultats obtenus

### VI.1 .Les densités d'états phononiques

La densité d'état phononique de trois systèmes de défauts sont représentés sur les figures (III.4, III.5 et III.6) pour les trois cas d'environnement élastique, homogène, adoucissement et durcissement.

Nous remarquons que les modes vibrationnels, liés aux déplacements des atomes de défaut, sont présents partout, des basses fréquences aux fréquences élevées, ils sont représentés par les pics qui apparaissent dans les spectres des densités d'états vibrationnelles de ces sites atomiques.

On remarque pour les trois cas, que les DOS, qui sont données en unités arbitraires, sont définies sur l'intervalle de fréquence  $\Omega \in [0.2, 4]$  qui correspond à celui de dispersion de phonons dans le réseau parfait. Pour chaque site, nous avons analysé trois possibilités de l'environnement élastique : (a: adoucissement), (b: homogène) et (c : durcissement), des contraintes de forces dans la zone perturbée.

Dans chaque figure, nous observons plusieurs pics de résonance de différentes tailles et largeurs. Ces derniers se déplacent légèrement vers les hautes fréquences dans le cas de durcissement. Ces résonances sont sensibles à la variation des paramètres de réseau au voisinage du domaine défaut.

On constate aussi, sur ces figures que, pour la majorité des sites, les densités d'états, à basse fréquence, sont insensibles à la variation des constantes  $\lambda, \gamma, \beta, \alpha_1$  et  $\alpha_2$ . Par contre, en haute fréquence, les amplitudes augmentent avec des valeurs croissantes des constantes  $\lambda, \gamma, \beta, \alpha_1$  et  $\alpha_2$ . Leurs hauteurs et leurs nombres augmentent en passant aux hautes énergies.

Donc, il y'a deux contributions aux densités d'états des différents sites, une partie est due aux phonons de volume et une autre aux états localisés. On peut dire que les densités d'états sont sensibles au changement des paramètres du système et que leurs réactions sont différentes à cause de la différence de leur environnement atomique et de leurs champs de forces respectifs. Cela apparait sur les pics qui sont de formes variées et différentes d'un atome à un autre, ce qui est normal, car la réponse des résonateurs que sont les atomes est différente aussi, compte tenu de leur environnement atomique et de leurs champs de forces.

## VI.2. Les états localisés

La connaissance de la matrice dynamique de volume  $D$ , permet de déterminer les limites de la bande de volume de réseau parfait en se déplaçant, selon la direction parallèle à XM, dans la zone de Brillouin. Les courbes de dispersion des phonons localisés sur le défaut sont déterminées dans l'espace  $(\Omega, \varphi_y)$  à l'aide de l'équation (III.14). Le calcul numérique de l'équation (III.14) dans l'espace  $(\Omega, \varphi_y)$  montre l'existence de phonons localisés sur le défaut, dont les courbes de dispersion sont représentées par des branches en traits gras sur les figures (III.7, III.8 et III.9), Ces figures montrent la bande passante des modes de volume avec les courbes de dispersion des phonons localisés pour différentes valeurs de  $\lambda = \gamma = \beta = \alpha_1 = \alpha_2$ , elles illustrent la présence de défaut et la brisure de symétrie due à la présence de défaut.

Sur toutes les figures (III.7, III.8 et III.9) on peut remarquer la présence d'une fenêtre dans la bande de volume résultant des deux modes propageant et qui constitue un intervalle interdit aux phonons. La largeur de cette fenêtre dépend de la valeur du rapport des constantes de force entre premiers et seconds voisins  $r$ . Ceci est justifié par les déplacements des limites de la fenêtre lorsqu'il y a un changement de l'interaction entre les atomes de réseau parfait. Les courbes de dispersion dépendent directement de la valeur de la constante de force de réseau cristallin parfait, en conséquence la bande de propagation aussi. Notons que le nombre et les caractéristiques des courbes de dispersion dépendent fortement des valeurs des constantes  $\lambda, \gamma, \beta, \alpha_1$  et  $\alpha_2$ . En plus, les branches de phonons localisés traversent la limite de la bande de volume et pénètrent à l'intérieur de celle-ci. De ce fait on peut s'attendre à plusieurs interférences dans le spectre vibrationnel dus aux interactions entre les différents modes localisés et la bande de volume.

Sur les figures (III.7, III.8 et III.9), nous avons représenté les bandes passantes des phonons de volume (en bleu) et les modes localisés (en noir) pour les trois systèmes de défaut cites dans le paragraphe (I) et pour les différentes valeurs des constantes  $\lambda, \gamma, \beta, \alpha_1$  et  $\alpha_2$ . On distingue deux types de modes localisés ; les modes de très basses énergies qui apparaissent au dessous de la bande passante de phonons de volume appelés modes acoustiques, et les modes localisé à hautes énergies qui se trouvent au dessus des modes de volume qui sont des modes optiques.

Nous constatons que le nombre et les caractéristiques des branches de phonons localisés sont fortement modifiés, et l'allure des bandes de volume ne change pas, ce qui était

prévisible, car les paramètres de défaut n'influencent pas les phénomènes de volume. On remarque l'apparition progressive de nouvelles branches optiques en dessus. Leur nombre varie avec la variation des constantes (a: adoucissement), en (b: homogène) et en (c : durcissement).

Nous remarquons aussi l'apparition des branches acoustiques dans la fenêtre de bande de volume qui est une zone interdite aux phonons. On conclut donc que pour des valeurs croissantes des paramètres du défaut, les branches se déplacent des basses fréquences (modes acoustiques) vers les hautes fréquences (modes optiques).

## **Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons étudiés le cas de diffusion d'onde élastique dans les systèmes bidimensionnels présentant des différents types des défauts de structure (a: adoucissement), (b: homogène) et (c : durcissement).

Dans la première partie nous avons présente les différents modèles de défauts de structure qui nous avons étudié, la matrice dynamique de système ainsi que la matrice de raccordement obtenue à partir de la méthode de raccordement .

Dans le deuxième partie et a l'aide de programme de simulation adaptée « MATLEB », nous déterminons l'état de diffusion d'ondes élastiques et l'évolution des courbes des etats localisés de phonons et densités d'états qui sont sensibles au changement de leur environnement atomique et de leurs champs de forces respectifs.

### **Conclusion Générale**

Les surfaces des matériaux solides sont devenues aujourd'hui d'un grand intérêt technologique qui est à l'origine d'une recherche toujours plus poussée pour obtenir des composants avec des propriétés physiques très bien contrôlées sur des dimensions de plus en plus réduites.

Dans ce travail, nous avons développé une approche théorique qui permet de traiter la propagation dans un système bi-dimensionnel présentant des défauts de structure. Cette approche est basée essentiellement sur une méthode connue sous le nom « méthode de raccordement », lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini à deux dimensions. Bien que la méthode présentée dérive de travaux menés sur les guides d'ondes élastiques. La méthode de raccordement s'applique à l'étude de la dynamique des systèmes, quelque soit leur taille, contenant des défauts variés.

L'étude dynamique d'un réseau parfait nous permet de déterminer la matrice dynamique de système ainsi que les courbes de dispersion, les bandes passantes et interdites.

En utilisant la méthode de raccordement nous avons calculé les densités d'états ainsi que les états localisés des différents systèmes défauts.

Nous avons conclu que pour des valeurs croissantes des paramètres du défaut, les branches se déplacent des basses fréquences (modes acoustiques) vers les hautes fréquences (modes optiques). On peut dire aussi que les densités d'états sont sensibles au changement des paramètres du système et que leurs réactions sont différentes à cause de la différence de leur environnement atomique et de leurs champs de forces respectifs. Cela apparaît sur les pics qui sont de formes variées et différentes d'un atome à un autre, ce qui est normal, car la réponse des résonateurs qui sont les atomes est différente aussi, compte tenu de leur environnement atomique et de leurs champs de forces.

Concernant les perspectives offertes par ce travail, nous proposons :

L'application de la méthode de raccordement à des températures supérieures à ( 0°K ) pour déterminer la chaleur spécifique et la conductivité thermique, aussi l'étude de l'effet de défaut sur les propriétés de diffusion d'ondes élastiques dans les systèmes bidimensionnels à partir de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre troisième voisins et plus .

## *Conclusion générale*

---

## ***Références bibliographiques***

---

- [1] M.S.RABIA, *Propriétés de propagation des phonons dans un guide d'onde quasi-plan comportant des impuretés interstitielles*, 10<sup>ième</sup> Congrès de Mécanique Oujda, 19-22 Avril 2011 .
- [2] R. Chadli, Thèse de Doctorat, Univ, Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou.(2012).
- [3] P.F. LORY, Thèse de Doctorat, Univ, de RENOBLE.(2015).
- [4] C. Kittel. *Physique de l'état Solide*, 7<sup>ème</sup> Ed, Paris , Dunod. (1998).
- [5] C. Kittel. *Introduction à la Physique de l'état solide*, Ed. Dunod,(1983).
- [6] Ghania. Belkacemi, Thèse de doctorat, Univ, Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, (2015).
- [7] D. TERRIS, Thèse de Doctorat, Univ, de Poitiers,(2008).
- [8] M.Born and K. Huang, *Dynamique Theory of Crystal Lattices*,Ox Ford ,University Press,(1954).
- [9] B. Gibert, Thèse de Doctorat , Univ.Mont Pellier II,(2003).
- [10] S.Chabbal. Thèse de Doctorat. Univ de Toulouse III, Paul sabayier, (2010).
- [11] M. Boran and R.Oppenhiemer, *Annalen der Physik* 457,(1927).
- [12] B.Bourahla, O.Nafa, A.khater, R.Tigrine, *Physica E* 43 ,1213.(2011).
- [13] R.E. Allen, G. P Alldrege and Wette, *phys. Rev.*4, 1648.(1971).
- [14] H. Hamzeh, Thèse de Doctorat, Univ. De Paris-Sud. (2012).
- [15] R. Bront and Visscher (W.M) *Phys . Rev. Letters.*54. (1962)
- [16] E.J. Routh, *dynamic of a system or rigid bodies*, Reprint Dover, Now York.(1955).
- [17] Lord Rayleigh, *theory of Sound*, Vol.1Reprint Dover, Now York. (1945).
- [18] L. fchitz (I.M),*Nuovo Cimento*, Suppl,716. (1956).
- [19] Montrole (L.W), POTTS (R.B), *Phys. Rev.*100.525. (1955).
- [20] R.J. Elloitt, *Phil. Mag.*1.293. (1956).
- [21] R.F Wallis, *Phys, Rev.*105,5401. (1957).

## ***Références bibliographiques***

---

- [22] J. Szeftel and A. Khater, J. Solide. State. Phys.20.4725.(1987).
- [23] S. Djadi, *Propriétés dynamique et de diffusion d'une interface entre deux structures cubique simple*, Mémoire de Master. Univ. de Bouira.(2014).
- [24] R. Chadli, Mémoire de Magistre.Univ.de Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou.(2004).
- [25] Antony. Virlovet, Thèse de Doctorat. Univ. du Maine.(1996).
- [26] R. Landaurer. J phys. Condenser matter 1, 8099.(1989).
- [27] B. S. Dewitt, phys. Rev. 103, 1563.(1956).
- [28] G. Toulouse, Solide state comm. 4,593.(1966).
- [29] P. Marsi and L. Dobrzynski, J. Physique.32, 295.(1971).
- [30] N. Chen and M.G. Cottam, Phy. Rev.B.44,14.(1991).
- [31] E. J. Garboczi and M.F.Thorope, Phy.Rev. B.32, 4513.(1985).
- [32] B.NATALI, thèse de doctorat. Univ. de Limoges.(2005).
- [33] T. E. Feuchtwang, Phys. Rev .155, 731 (1967)

## Résumé

L'objectif de notre travail est l'étude de la dynamique vibrationnelle d'un réseau bi- dimensionnel en présence des défauts .

A partir d'une étude théorique des phénomènes dynamiques liés à la localisation des ondes élastiques au voisinage d'une interface entre deux guides d'ondes cristallographiques de basses dimensions qui brisent la symétrie de translation dans la direction normale au défaut. Cette étude sera menée dans le cadre de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins. A partir des structures modèles, ce travail porte sur le développement et l'application des méthodes analytiques et de simulation numérique.

Nous avons étudiés les propriétés dynamiques du réseau parfait, qui permet de déterminer la matrice dynamique de système et les courbes de dispersion, ainsi que la bande passante et interdite dans un réseau quasi-bidimensionnels dans le cadre de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins.

En présence de défaut, nous avons, utilisant la méthode de raccordement, calculé les densités d'états ainsi que les états localisés des systèmes. A l'aide de programme de simulation adaptée « MATLEB », nous déterminons l'état de diffusions d'ondes élastiques et l'évolution des courbes des états localisés de phonons et densités d'états qui sont sensibles au changement de leur environnement atomique et de leurs champs de forces respectifs.

### ملخص:

الهدف من عملنا هو دراسة نظرية للحالات الذبذبات وانتشار موجات مرنة في نظم ثنائية الأبعاد في وجود عيوب ذرية.

من دراسة نظرية للظواهر الديناميكية المتعلقة بتوطين موجات مرنة في محيط واجهة بين اثنين من الأدلة الموحية البلورية من الأبعاد المنخفضة التي تكسر التماثل المترجمة في الاتجاه الطبيعي إلى الخل. هذه الدراسة تسيير في إطار التجاور المتجانس للقوى المتوسطة والتحركات الداخلية بين الجزيئات المتجاورة الأولى والتي تليها من خلال الهيكلة النموذجية، هذا العمل يؤدي إلى تطور وتطبيق طرق تحليلية و رقمية.

لقد درسنا الخصائص الديناميكية للشبكية المثالية، مما يجعل من الممكن تحديد مصفوفة النظام الديناميكي ومنحنيات التشتت، فضلا عن حزمة شبه الجسدية والمنعشة في إطار التجاور المتجانس للقوى المتوسطة والتحركات الداخلية بين الجزيئات المتجاورة الأولى والتي تليها.

في وجود خطأ، استخدمنا طريقة الاتصال التي من شأنها أن تجعل من الممكن حساب كثافات الحالة وكذلك الحالات المترجمة من النظم. باستخدام برنامج المحاكاة "ماتليب"، نحدد حالة تشتت الموجة المرنة وتطور منحنيات الحالات المترجمة من الفونونات وكثافات الحالة الحساسة لتغير بيتتها الذرية و من مجالات القوة الخاصة بكل منها.

## *Summary*

The objective of our work is the study of the vibrational dynamics of a two-dimensional network in the presence of defects.

From a theoretical study of the dynamic phenomena related to the localization of elastic waves in the vicinity of an interface between two crystallographic waveguides of low dimensions that break the translation symmetry in the direction normal to the defect. This study will be carried out within the framework of the harmonic approximation of the central forces and the interaction between the first and second neighbors. From the model structures, this work deals with the development and application of analytical and numerical simulation methods.

We have studied the dynamic properties of the perfect lattice, which makes it possible to determine the dynamic system matrix and the dispersion curves as well as the bandwidth and forbidding in a quasi-two-dimensional lattice in the framework of the harmonic approximation of the central and of the interaction between first and second neighbors.

In the presence of a fault, we have calculated the state densities and the localized states of the systems using the connection method. Using the matched simulation program "MATLEB", we determine the state of elastic wave scattering and the evolution of the curves of the localized states of phonons and state densities which are sensitive to the change of their atomic environment and of their respective force fields.