



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



FACULTE DES SCIENCES ET DES SCIENCES APPLIQUEES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

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

OPTION

Physique des Matériaux et Nanomatériaux

THEME

Propriétés dynamiques et de diffusion d'une
interface entre deux structures cubique simple

Présenté par : DJADI Souad

Soutenu le : 02/10/2014

Devant le jury :

Président : M^r .D. MADI UMO Bouira M C B

Rapporteur : M^r .D. ZERIRGUI UMO Bouira M A A

Co-Rapporteur : M^e .M. BOUCHERRAB UMO Bouira M A A

Examineurs : M^r .S. BENAMARA UMO Bouira M A B

Examineurs : M^r .H. KHELFAN UMO Bouira M C B

REMERCIEMENT

Louange tout d'abord à dieu qui nous a donné la force pour terminer ce modeste travail.

Toutes mes infinies grâces à notre promoteur, Mr. Zerirgui Djamel et à M^{me}. Boucherrab Malika pour leurs aides précieuses.

Je remercie aussi les membres du jury qui m'ont fait l'honneur d'accepter le jugement de notre travail.

*Ma sincère reconnaissance à nos enseignants du département:
De physique et de la faculté de sciences et Technologies.
Mes remerciements s'adressent aussi, à tous les travailleurs
De la P.M.N*

Enfin je remercie tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à ce modeste travail. Veuillez agréer l'expression de mes profondes grâces et respects.

Souad



Dédicace

Je dédie ce modeste travail:

- 🕒 *A mes chers parents, que j'aime beaucoup et aucun mot ne peut exprimer ce que je ressente pour eux. Que Dieu me les garde plus longtemps:*
- 🕒 *A mes sœurs : Nadia , farida, Sabrina , Ahlame*
- 🕒 *A mes frères : Amar (Amimare),Farid , Yacine (morisse) , .*
- 🕒 *A ma grand- mère.*
- 🕒 *A mes Oncles et mes tantes et ces enfants.*
- 🕒 *A toute la famille: DJADI , GUEROUAZ,*
- 🕒 *A mes collègues de FM*
- 🕒 *A toutes mes connaissances et amis au niveau de Département de Physique.*
- 🕒 *A tous mes amis : Hayat, Assia , Dalila ,Fatima ,Tassaadit , Fatima , Lila , avec les quelle j'ai partagé*
- 🕒 *A tous mes amis de BOUIRA et de Thameur.*
- 🕒 *Et surtout a Walide (Cholo) Raouf ,Nina,Mahdi,Houda ,Melissa*
- 🕒 *Merouane et Surtout NANA Hadda.*

SOUAD



Sommaire

Sommaire

Résumé	1
Introduction générale	3

Premier chapitre

Introduction à l'étude de surface et d'interface

Introduction	6
I.1 Importance de l'étude des surfaces	7
I.1.1 Petit rappel sur la cristallographie	7
I.1.1.1 Structure cristalline	7
I.1.2 Concepts et notion de base pour l'étude des surfaces	8
I.1.2.1 Le concept de cellule élémentaire de surface	8
I.1.2.2 Réseau à deux dimensions ($\vec{c} = \vec{0}$)	8
I.2 Notation utilisées pour les structures de surface	9
I.2.1 Notation matricielle	9
I.2.2 Notation de wood's	11
I.3 Première zone de Brillouin et direction de symétrie	11
I.3.1 Zone de Brillouin	11
I.3.2 Cas de la surface (100) d'un réseau cubique simple	12
Réseau direct	12
Réseau réciproque	12
I.4 Les méthodes utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des surfaces	13
I.4.1 La méthode diagonalisation direct (ou Slab method)	13
I.4.2 La méthode des fonctions de Green	13
I.4.3 La méthode de raccordement	14
I.4.3.1 Formulation générale de la méthode de raccordement pour le calcul des modes localisés de surface	15
Régions parfaits (volume)	16
Régions de surface (défaut)	16
Régions de raccordement	17
I.4.3.2 Formulation du problème	17
Conclusion	20

Deuxième chapitre

Dynamique vibrationnelle des systèmes parfaits de type Cubique Simple

Introduction	21
II.1 Le système modèle	22
II.1.1 Etapes préliminaires	22

II.1.2 Les équations de mouvements	23
II.1.3 La matrice dynamique –équations propres.....	24
II.2 Courbes de dispersion	27
II.2.1 Courbes de dispersion pour les différentes valeurs d’angle incident	29
II.2.2 Courbes de dispersion pour les différentes valeurs de constante de force r.....	30
II.2.3 Les bandes passantes et interdites	32
II.3 Modes évanescents.....	34
II.3.1 Calcul des facteurs de phase.....	34
II.3.1.1 La méthode de déterminant	35
II.3.1.2 Les facteurs de phase obtenus	35
II.4 Calcul la vitesse de group	41
II.4.1 Calcul par la méthode perturbative	41
Conclusion	44

Troisième chapitre

Diffusion d’ondes élastiques par des défauts

Introduction	45
III.1 Description des modèles	46
III.1.1 Le premier cas : diffusion d’ondes élastique pour système interface	46
III.1.2 Le deuxième cas : diffusion d’ondes élastique pour un défaut étendu	47
III.1.3 Les troisième cas : diffusion d’ondes élastique par une chaîne diatomique	47
III.2 Matrice dynamique du système	49
III.3 Matrice de raccordement	50
III.4 Etude de la diffusion	52
III.4.1 Calcul des coefficients de transmission et de réflexion	53
III.4.2 Calcul de la conductance phononique	54
III.5 Résultats et discussions	55
Conclusion	70
Conclusion général	71

Annexes

Références bibliographique

Résumé

Résumé

L'objectif principal de ce mémoire est de contribuer à une compréhension de certains effets dus à la présence des défauts nanostructuraux dans des guides d'ondes cristallographiques quasi-bidimensionnels 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, une initiation aux calculs de la dispersion des phonons pour un guide d'onde parfait à deux dimensions dans le cadre de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins. La méthode de raccordement est utilisée pour l'analyse des ondes vibratoires diffusées par un défaut de surface d'une structure cristalline. Les spectres de transmission et de réflexion obtenus sont analysés en fonction de la fréquence des deux modes propres de vibration du réseau parfait. L'évolution de ces spectres en fonction de la masse de défaut et des constantes de forces est discutée. Les états localisés induits par le défaut interagissent avec le continuum de vibration du guide d'ondes parfait et créent des résonances de Fano. Ces dernières sont étudiées en fonction de la masse de défaut et des constantes de force. Par ailleurs, il est montré que l'évolution des fréquences de résonances en fonction des paramètres suscités est compatible avec la fréquence d'un oscillateur harmonique isolé.

Summary

The principal objective of this memory is to contribute to a comprehension of certain effects due to the presence of the nanostructuraux defects in guides of crystallographic waves quasi-two-dimensional of low dimensions which break the symmetry of translation in the normal direction with the defect. This study will be undertaken within the framework of the harmonic approximation of the central forces and the interaction between first and second neighbors. From the model structures, this work concerns the development and the application of the analytical methods and digital simulation.

We have studied the dynamic properties of the perfect network, an initiation with calculations of the dispersion of the phonons for a perfect guide of wave to two dimensions within the

framework of the harmonic approximation of the central forces and the interaction between first and second neighbors. The matching method is used to analyze the vibrationnal waves diffused by a surface defect of the crystal structure. Obtained transmission and reflection spectra are analyzed according to the frequency of the two eigenmodes of the perfect lattice. The evolution of these spectra, along with the defect mass and the strength constants, is largely discussed. The localized states induced by the defect interact with the vibrationnal continuum of the perfect waveguide and create Fano resonances, which are analyzed according to the mass of the defect and the strength constants. In addition, it is shown that the evolution of the resonance frequencies, with respect to the precedent parameters, is compatible with the frequency definition of an isolated harmonic oscillator.

ملخص:

الهدف الرئيسي من هذا البحث هو فهم بعض الآثار المسببة بحضور عيوب الجسيمات الجد صغيرة (نانوستركتور) في دليل علم التبلور ذو الأبعاد الصغيرة الذي يكسر التناظر بالإزاحة في اتجاه عادي إلى الخطأ، هذه الدراسة تسير في إطار التجاور المتجانس للقوى المتوسطة والتحركات الداخلية بين الجزيئات المتجاورة الأولى والتالية من خلال الهيكلية النموذجية، هذا العمل يؤدي إلى تطور وتطبيق طرق تحليلية والتظاهر بالرقمية.

لقد درسنا الملكية الديناميكية للشبكة المثالية كمدخل لحسابات التوزيعات الذرية من أجل الدليل الجزيئي المثالي إلى ثنائي الأبعاد في إطار التجاور المتجانس للقوى الوسطى والتحركات الداخلية بين الجزيئتين المتجاورتين الأولى والتالية، الطريقة الترابطية استعملناها من أجل تحليل الاهتزازات وانتشارها من طرف خطأ المساحة التركيبية الكريستالية.

أطراف نقل الحركة ورد الفعل الناتج حللوا مع عمل تردد الأسلوبين لإهتزازات الشبكة المثالية. تطور هذه الأطراف من هذا العمل بالكتلة الخطأ وجليد القوى نوقشت، الحالات الملاحظة مستقرأ من أخطاء مع مجموعة إتصالية لتردد الدليل الجزيئي المثالي تنتج رنين.

هذه الأخيرة درست بعمل كتلة الخطأ و متابرة للقوى. في موضع اخر تظهر تطور ترددات الرنين من وظيفة الإعدادات المتناغمة مع الترددات للمسرع المثالي المنفرد.

Introduction générale



Introduction générale

Les études concernant les systèmes de basses dimensions (films minces, fils et boîtes quantiques, systèmes nanostructurés, surfaces,...) est un domaine de recherche en plein développement à l'heure actuelle, à la fois sur le plan de la recherche fondamentale et sur celui du progrès technologique qui permet la construction de composants à l'échelle nanométrique [1- 7]. Ces systèmes sont aussi d'un grand intérêt théorique puis qu'ils peuvent apporter des renseignements utiles avec des propriétés mathématiques bien définies [8].

Par conséquent, la miniaturisation des dispositifs constitue un véritable saut technologique. Elle a contribué considérablement à accroître la densité de stockage et l'efficacité des composants électroniques [9]. Le développement de la science des matériaux et plus particulièrement de la physique de l'état condensé a conduit les physiciens et chimistes à comprendre que les propriétés d'un matériau dépendaient étroitement de sa structure (défaut compris) et de son environnement [3].

Particulièrement, les surfaces et les couches minces présentent un grand intérêt dans le domaine de la nanotechnologie. Souvent ces couches sont déposées à la surface de substrats cristallins. Malgré les progrès enregistrés ces dernières années dans les techniques de préparation et d'élaboration des systèmes, leur structure peut être alors perturbée par la présence de défauts qu'on peut séparer en adatoms, adlacunes ou atomes de substitution. Cette observation est confirmée par des techniques expérimentales d'exploration, comme les microscopes à effet tunnel (S.T.M) ou à force atomique (A.F.M) qui offrent une vision directe de la morphologie des systèmes.

Les inhomogénéités (où les défauts) modifient les propriétés mécaniques et thermiques de la structure [2], considérée par la physique du solide comme un réseau cristallin et par la mécanique ondulatoire comme un guide d'ondes.

L'objectif de ce travail est de contribuer à une meilleure compréhension de la diffusion d'ondes élastiques (où phonons) dans des systèmes de basses dimensions ayant des formes planes quasi-bidimensionnel en présence de défauts atomiques, jamais examiné à ce jour. A partir d'une structure modèle, ce travail porte sur le développement et l'application des méthodes analytiques et de simulation numérique. En utilisant des programmes de simulation adaptés « MATLAB » basées sur des algorithmes d'analyse numérique, nous déterminons les différentes courbes des phénomènes étudiés.

Introduction générale

Nous nous intéressons particulièrement, à la présence de trois types de défauts atomiques : le premier est une interface entre deux plans adjacents de structure cubique simple et de masses différentes M_1 et M_2 . Le deuxième cas est un réseau cristallin plan formé d'atomes de masses M_1 dans lequel on insère une chaîne d'atomes de masses M_2 parallèle à l'axe Oy qui sépare ce plan en deux plans semi-infinis. Le troisième cas est un réseau cristallin plan formé d'atomes de masses M_1 dans lequel on insère une double chaîne adjacentes d'atomes de masse M_2 .

L'existence de ces défauts provoque une brisure de symétrie dans la direction normale aux défauts, et par conséquent l'application de formalisme basé sur les conditions aux limites de Born et Von Karman devient inapplicable, d'où la nécessité d'une méthode appropriée qui permet de limiter le nombre d'équations et d'inconnus. C'est la méthode de raccordement sur laquelle s'appuiera notre modélisation qui est associée aux fonctions de Green pour le calcul de certaines propriétés physiques comme les densités spectrales, les densités d'états et les probabilités de transmissions et de réflexions [24].

Dans le premier chapitre de cette mémoire, nous avons rappelé quelques généralités et concepts de base conçues pour l'étude des surfaces, et rappelé sur la 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, et quelque méthodes théoriques utilisées pour l'étude et l'analyse des surfaces.

Le deuxième chapitre constitue une application directe du formalisme rappelé au chapitre précédent. Il traite la dynamique de phonons d'un guide d'onde parfait ordonné. Nous définirons les courbes de dispersion phononiques, leurs modes propageant et évanescent et nous introduirons les vitesses de groupe indispensables pour l'étude de la diffusion. Elles seront utilisées lors de la normalisation des grandeurs physiques telles que les coefficients de réflexion et de transmission.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude de la diffusion des ondes vibrationnelles par les trois défauts. En utilisant la méthode de raccordement nous déterminerons les matrices dynamiques des différents systèmes considérées précédemment ainsi que les matrices de raccordement. Ensuite, nous déterminerons les coefficients de transmission et de réflexion que nous étudierons l'évolution des spectres en fonction de la masse des atomes défauts et des constantes de forces.

Introduction générale

Nous terminerons ce travail par une conclusion générale qui rappellera les principaux résultats obtenus ainsi que les perspectives offertes dans le domaine. Les éléments des différentes matrices dynamiques seront donnés en annexe pour ne pas alourdir le dernier chapitre.

CHAPITRE I

Introduction à l'étude de surface et interface

INTRODUCTION

Tout matériau solide isolé est nécessairement limité par une **surface** du fait de son volume fini [10]. Ces surfaces constituent aujourd'hui des formes de la matière condensée qui peuvent présenter un intérêt technologique de première importance autant dans le domaine de l'électronique, de l'optique ou du magnétisme [12]. Parmi les diverses configurations dans lesquelles peut apparaître une surface, il est intéressant de mentionner les structures artificielles que donne la technologie toute récente de manipulation atomique.

La compréhension des propriétés diverses des surfaces passe par une connaissance de leur structure, c'est-à-dire de l'arrangement ordonné ou non des atomes en surface [13]. Le terme de structure est ici considéré dans un sens large et inclut autant la cristallographie de surface que la morphologie à une échelle micrométrique et sub-micrométrique. La surface d'un matériau doit donc être considérée comme un milieu quasi bidimensionnel avec une extension spatiale très limitée [14] dans la direction normale.

À la différence de la notion mathématique de surface correspondant à un espace strictement bidimensionnel, la description physique de la surface d'un matériau s'intéresse à une **zone de transition** qui est constituée de quelques couches atomiques à la frontière entre le cœur du matériau et le vide, une atmosphère gazeuse ou un autre matériau dense, solide ou liquide et qui peut constituer une [15] interface les différentes formes de la matière.

Les termes de **surface** et **d'interface** sont souvent associés, mais ce dernier est usuellement employé dans le cas de la frontière d'un matériau solide avec un autre milieu dense. Les interfaces cristallines présentent un domaine d'application intéressant en Physique des Solides : on peut citer les cas des hétérojonctions, de l'interface métal-semiconducteur, des systèmes lamellaires métalliques constitués par juxtaposition de films cristallins alternés, des phases adsorbées, Les excitations élémentaires telles que les électrons, les phonons et les magnons ont fait l'objet de nombreuses études.

I.1 Importance de l'étude des surfaces

L'étude des surfaces a reçue une grande importance à travers le temps pour plusieurs raisons dont on peut citer :

- Tous les phénomènes vraiment intéressants se produisent sur les surfaces des objets.
- Les surfaces dominent plusieurs activités.
- Plusieurs phénomènes intéressants, peuvent être observés sur la surface / interface mais pas en volume, par exemple :
 - Les excitations de surface : phonons de surface, plasmon de surface, etc....
 - Les reconstructions de surface (réarrangement atomique en surface).
 - Les phénomènes à deux dimensions uniquement (propriétés d'un gaz d'électrons 2D) [10].

I.1.1 Petit rappel sur la cristallographie

I.1.1.1 Structure cristalline

L'état cristallin correspond à un arrangement compact et périodique des atomes du solide. Un système parfait est donc constitué par la répétition d'un motif atomique, appelé *base*, suivant trois *vecteurs de translation* $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ qui définissent un *réseau*. Alors :

$$\text{Structure cristalline} = \text{réseau} + \text{base}$$

A partir d'une origine O, tous les points A tels que $\vec{OA} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$ voient le même environnement atomique que O. L'ensemble des points A constitue un réseau de points appelés *nœud du réseau*. La donnée d'une base et d'un réseau caractérise donc entièrement la structure cristalline.

Les vecteurs de translation sont dit *fondamentaux* ou *primitifs* si pour tous les points A voient le même environnement atomique que O, on peut trouver des entiers n_1, n_2, n_3 tels que :

$$\vec{OA} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}. \quad (\text{I } 1)$$

Le parallélépipède défini par \vec{a}, \vec{b} et \vec{c} est appelé *maille*. Une maille permet de remplir tout l'espace en appliquant les opérations de translation convenables. La maille définie par les vecteurs de translation fondamentaux est dite primitive ou élémentaire. C'est en fait une maille de volume minimal [23].

Considérons un réseau tridimensionnel semi-infini, constitué d'atomes ℓ dont les coordonnées s'écrivent :

$$\vec{R}_\ell = x_\ell \vec{i} + y_\ell \vec{j} + z_\ell \vec{k} \quad (\text{I } 2)$$

Dans la base du réseau direct appropriée $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ telle que le vecteur \vec{k} est perpendiculaire à la surface d'équation $z = 0$. Soit une maille élémentaire du réseau direct $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, contenant n_0 d'atomes, d'indices $(1 \leq \ell_0 \leq n_0)$:

$$\begin{aligned}\vec{a} &= a_x \vec{i} + a_y \vec{j} + a_z \vec{k} \\ \vec{b} &= b_x \vec{i} + b_y \vec{j} + b_z \vec{k} \\ \vec{c} &= c_x \vec{i} + c_y \vec{j} + c_z \vec{k}\end{aligned}\tag{I 3}$$

Cette maille élémentaire a pour volume :

$$V = \vec{a} \cdot (\vec{b} \wedge \vec{c})\tag{I 4}$$

La position de tout atome du réseau s'obtient donc à partir d'un atome de cette maille par une translation \vec{T}_ℓ :

$$\vec{R}_\ell = \vec{R}_{\ell_0} + \vec{T}_\ell \quad \text{avec} \quad \vec{T}_\ell = n_x \vec{a} + n_y \vec{b} + n_z \vec{c}\tag{I 5}$$

La maille du réseau réciproque $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ correspondante est définie par :

$$\begin{aligned}\vec{A} &= 2\pi (\vec{b} \wedge \vec{c}) / V \\ \vec{B} &= 2\pi (\vec{c} \wedge \vec{a}) / V \\ \vec{C} &= 2\pi (\vec{a} \wedge \vec{b}) / V\end{aligned}\tag{I 6}$$

Avec

$$\begin{aligned}\vec{a} \cdot \vec{A} = \vec{b} \cdot \vec{B} = \vec{c} \cdot \vec{C} &= 2\pi \\ \vec{a} \cdot \vec{B} = \vec{a} \cdot \vec{C} = \vec{b} \cdot \vec{A} = \vec{b} \cdot \vec{C} &= \vec{c} \cdot \vec{A} = \vec{c} \cdot \vec{B} = 0\end{aligned}\tag{I 7}$$

I.1.2 Concepts et notions de base pour l'étude des surfaces

Nous avons regroupé quelques concepts et notion de base utiles pour l'étude et l'analyse des surfaces :

I.1.2.1 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.1.2.2 Réseau à deux dimensions ($\vec{c} = \vec{0}$) : concept de cellule élémentaire de surface

Comme dans le cas d'un cristal à trois dimensions, 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 identifié dans un plan d'atomes de surface ordonnée. En dimensions deux, il existe seulement 5 réseaux de Bravais qui sont décrits dans la figure (I.1):

- Oblique, hexagonal, carré, rectangulaire et rectangulaire centré.

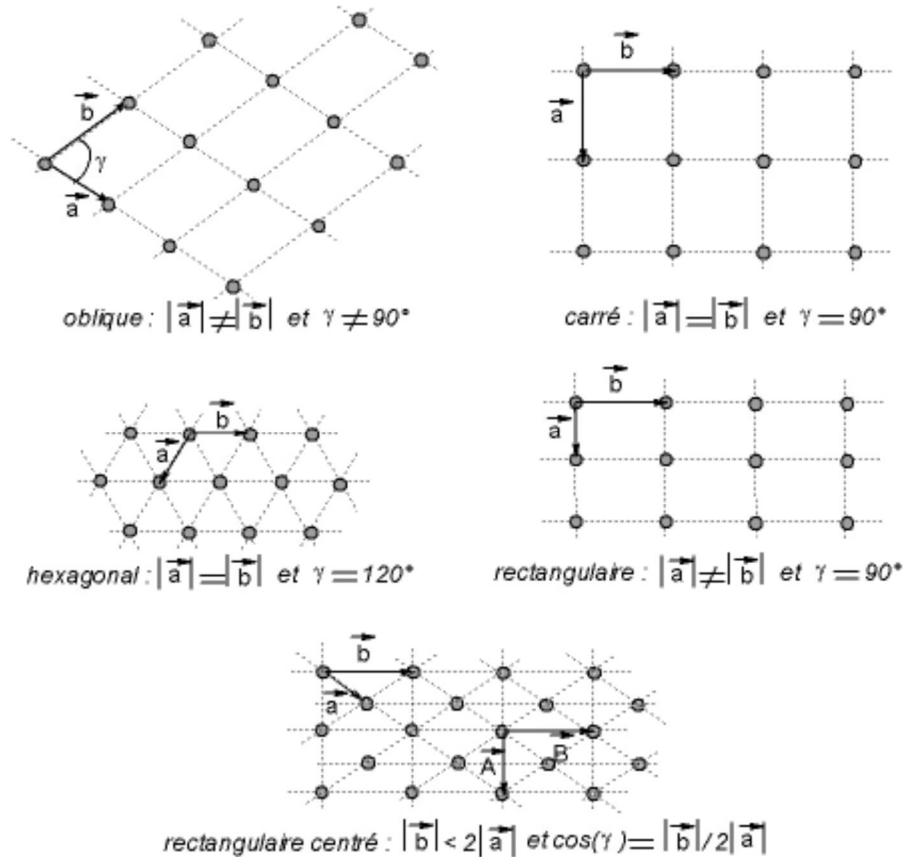


Figure I. 1 : Les 5 réseaux de Bravais à 2D

I.2 Notations utilisées pour les structures de surface

La structure d'une couche de surface n'est pas nécessairement identique à celle des plans sous-jacents du volume même pour les surfaces propres (c'est-à-dire absorbant libre). Le terme superstructure est employée conventionnellement pour décrire la structure spécifique de la couche atomique (ou de quelques couches). La notation utilisée pour décrire une superstructure, lié son réseau 2D, à celui du plan sous-jacent du substrat. Deux principales méthodes sont utilisées pour indiquer la structure d'une surface, à savoir la notation de Wood's et la notation matricielle [10].

I.2.1 Notation matricielle

On représente la structure atomique bidimensionnelle, d'une surface parfaite, par deux vecteurs de base traduisant la périodicité atomique par translation, ainsi que le motif atomique répété. La structure de surface sera donc repérée par cette base et ce motif. Étant donné que sous cette surface se trouve le cristal qui a une structure connue, la structure de

surface est repérée par rapport au réseau de surface obtenu en créant la surface reconstruite, et qui sera caractérisée par une nouvelle base (\vec{a}_s, \vec{b}_s) .

La notation matricielle proposée par *Park* et *Madden* [15], réside dans la détermination d'une matrice qui établit une relation entre les vecteurs de translation de base (\vec{a}_s, \vec{b}_s) de la surface reconstruite considérée et ceux du plan idéal du substrat (\vec{a}, \vec{b}) .

$$\begin{aligned}\vec{a}_s &= m_{11} \vec{a} + m_{12} \vec{b} \\ \vec{b}_s &= m_{21} \vec{a} + m_{22} \vec{b}\end{aligned}\quad (\text{I } 8)$$

Cette relation peut être réécrit d'une manière équivalente au moyen de la matrice de transformation M par :

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_s \\ \vec{b}_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \end{pmatrix}\quad (\text{I } 9)$$

Et la structure de surface est alors spécifiée par la matrice

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}\quad (\text{I } 10)$$

Où m_{ij} sont des nombres entiers positifs ou négatifs ou nuls.

Il est facile de voir que la superficie de la cellule unité de la structure de surface formée par les vecteurs de base (\vec{a}_s, \vec{b}_s) est égale au produit de la valeur du déterminant de la matrice M , $\det(M)$, et la superficie de la cellule unité du substrat formée par les vecteurs de base (\vec{a}, \vec{b}) .

La valeur du $\det(M)$ permet de classifier les structures de surfaces résultantes de façon suivantes :

- ✓ Le déterminant de la matrice de transfert M est un nombre entier : la structure de la couche de surface et celle du substrat sont simplement reliées, et la structure du système constitué par la couche extérieure et le substrat est appelé système simple.
- ✓ Si la valeur de déterminant de la matrice de transfert M est un nombre rationnel, et les réseaux (\vec{a}_s, \vec{b}_s) et (\vec{a}, \vec{b}) sont reliés rationnellement ; la structure du système constitué par la couche extérieure et le substrat est appelé « structure de cohabitation de sites » et le réseau extérieur dit « commensurable »
- ✓ Si la valeur du déterminant de la matrice de transfert M est un nombre irrationnel, et les réseaux (\vec{a}_s, \vec{b}_s) et (\vec{a}, \vec{b}) sont reliés irrationnellement ; la structure du système constitué par la couche extérieure et le substrat est

appelé « structure de cohabitation de sites » et le réseau extérieur dit « incommensurable ».

Une fois que la matrice M est définie, le système entier i.e. substrat –couche de surface, pourra être dénoté par la formule suivante :

$$S(hkl) - M - A \quad (\text{I } 11)$$

Où $S(hkl)$ signifie l'orientation cristallographique du substrat S , et M dénote la matrice de transformation et A étant l'élément chimique adsorbé en surface [10].

I.2.2 Notation de Wood'S

La notation la plus simple et la plus fréquemment utilisée pour décrire une structure de surface a été proposée par Wood'S en 1964 [15,18]. Les vecteurs de base correspondants à la reconstruction de surface sont colinéaires aux vecteurs (\vec{a}, \vec{b}) . De ce fait, si dans une surface substrat $S(hkl)$ la surface reconstruite est formée par les vecteurs de translation de base :

$$\begin{aligned} \vec{a}_s &= m \vec{a} \\ \vec{b}_s &= n \vec{b} \end{aligned} \quad (\text{I } 12)$$

Et avec un angle de rotation de φ^0 , alors la structure de surface reconstruite est notée comme suit :

$$S(hkl) - (m \times n) R \varphi^0 - A \quad (\text{I } 13)$$

$R \varphi^0$: le facteur apparaissant dans le deuxième terme peut être omis.

I.3 Première zone de Brillouin et direction de symétrie

I.3.1 Zone de Brillouin

L'énoncé le plus important de la condition de diffraction pour la physique de l'état solide fut donné par Brillouin. La zone de Brillouin est par définition la maille de Wingner-Seitz du réseau réciproque ; nous représentons les vecteurs joignant un site du réseau réciproque à tous les sites voisins, puis on dessine les plans bissecteurs perpendiculaires à ces vecteurs. Le volume le plus petit autour du site choisi limité par ces plans est appelé zone de Brillouin.

Nous pouvons construire les zones supérieures de Brillouin de la même manière, la $i^{\text{ème}}$ zone de Brillouin est l'espace limité d'une part par les plans bissecteurs perpendiculaires aux vecteurs joignant le site à l'origine aux $i^{\text{ème}}$ sites voisins et d'autre part les plans bissecteurs des zones de Brillouin inférieures [14].

I.3.2 Cas de la surface (100) d'un réseau cubique simple :

• Réseau direct

La structure du réseau direct de la surface (100) est carré (figure I.1-a), il est formé par les deux vecteurs de base suivant :

$$\vec{a} \begin{pmatrix} a/2 \\ a/2 \end{pmatrix} ; \quad \vec{b} \begin{pmatrix} -a/2 \\ a/2 \end{pmatrix} \quad (I 14)$$

• Réseau réciproque

Le réseau réciproque du réseau direct est obtenu à l'aide des deux vecteurs de base \vec{A}^* et \vec{B}^* définis par :

$$\begin{aligned} \vec{A}^* \cdot \vec{a} &= 2\pi & \text{et} & \quad \vec{a} \cdot \vec{B}^* = 0 \\ \vec{B}^* \cdot \vec{b} &= 2\pi & \text{et} & \quad \vec{b} \cdot \vec{A}^* = 0 \end{aligned} \quad (I 15)$$

Un simple calcul permet d'avoir les résultats suivants :

$$\begin{aligned} \vec{A}^* & \begin{pmatrix} 2\pi/a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} & (I 16) \\ \vec{B}^* & \begin{pmatrix} -2\pi/a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Avec

$$\begin{aligned} \|\vec{A}^*\| &= 2\sqrt{2} \pi/a \\ \|\vec{B}^*\| &= 2\sqrt{2} \pi/a \end{aligned} \quad (I 17)$$

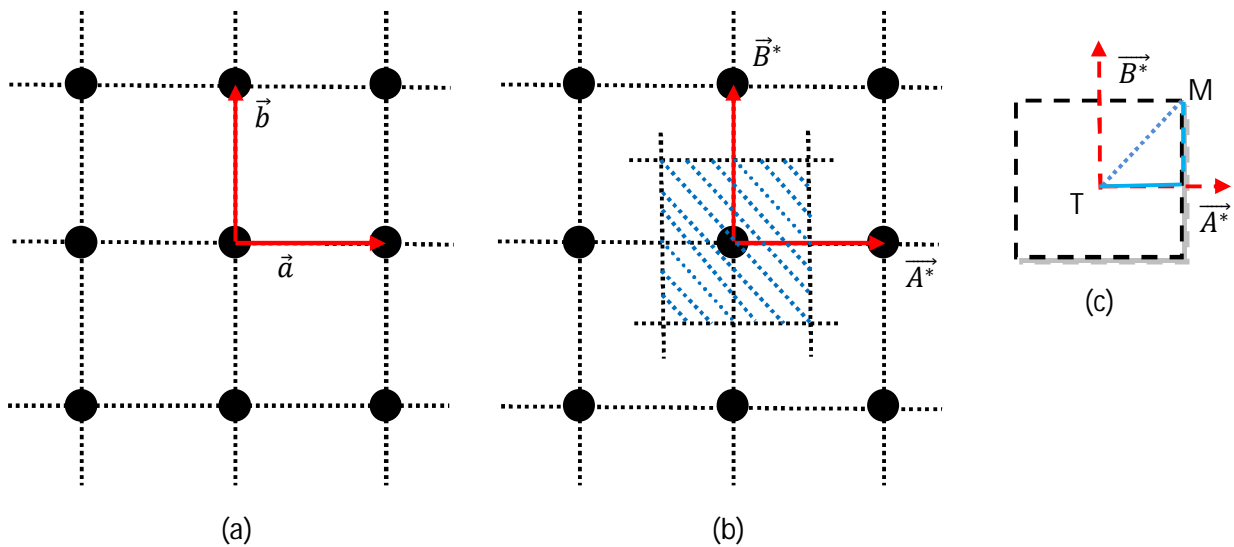


Figure I.2 : Représentation des réseaux directs en (a) et réciproque en (b) ainsi que la première zone de Brillouin en (c) de la surface (100).

I.4 Les méthodes utilisées pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des surfaces

Actuellement, il existe plusieurs méthodes pour l'étude des systèmes désordonnés et le calcul des états de phonons de surface. Parmi celles-ci, on peut citer : la méthode de diagonalisation directe « *slab methede* », la méthode des fonctions *de Green* et la méthode de *raccordement*.

I.4.1 La méthode de diagonalisation direct (ou Slab method)

Cette méthode a été introduite dans sa formulation général en 1965 par *clark* [10]. sa première application sur un système physique a été réalisée par *Allen* et *Allredge* [11, 19, 20,22], pour l'étude des états vibrationnels de surface afin de garantir l'existence d'une région dite de volume au centre du système, cette méthode consiste à modéliser les systèmes magnétiques par un nombre fini de plans atomique de structure périodique donnant lieu à deux surfaces limitées [11]. Durant les vingt dernières années cette méthode est apparue comme pratique et puissante pour l'étude des propriétés vibrationnelles [10] et pour les phonons.

Le principe de la méthode de diagonalisation direct consiste à limiter les systèmes de surface étudiés, à un nombre fini de plans atomique dans une direction donnée (direction Z par exemple), avec une extension infini dans les deux autres directions cartésiennes x et y [10]. Il reste alors à écrire les équations de mouvements des atomes appartenant à une cellule unitaire pour déduire la matrice dynamique qui permet de déterminer les vecteurs et les valeurs propres. Ce qui permet ensuite la détermination des courbes des densités spectrales, de dispersions et des vecteurs déplacements des atomes.

Enfin, cette méthode présente l'inconvénient d'utiliser des matrices de taille importante qui augmente les temps de calcul lors des simulations numériques, ce qui permet d'avantage de développer les connaissances concernant les propriétés vibrationnelles des surfaces et interfaces.

I.4.2 La méthode des fonctions de Green

Pour l'étude des vibrations des surfaces cristallines [10], *Lifshitz* en 1948 a proposé une méthode de résolution utilisant les fonctions *de Green* [19]. Cette méthode appliquée par *Rosenzweig* à un modèle de cristal cubique simple avec des interactions centrales entre atomes premiers et seconds voisins [17].

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 [10].

Cette modification sur la dynamique vibrationnelle des atomes est considérée comme étant une perturbation qui transforme la matrice dynamique D de système illimité en une matrice D_p ayant la forme suivant :

$$D_p = (D + P) \quad (\text{I } 18)$$

Où P : représente la matrice de perturbation composée d'une sous matrice non nulle.

Soit $G (w^2)$ la matrice des fonctions de Green défini par :

$$G (w^2) = [w^2 I - D]^{-1} \quad (\text{I } 19)$$

Où I : représente la matrice identité

Son équivalent $G_p(w^2)$ pour le système perturbé s'écrit :

$$G_p(w^2) = [w^2 I - (D + P)]^{-1} \quad (\text{I } 20)$$

$$G_p(w^2) = [(w^2 I - D) (I - \frac{P}{w^2 I - D})]^{-1} \quad (\text{I } 21)$$

$$G_p(w^2) = [(w^2 I - D) \{I - G (w^2) P\}]^{-1} \quad (\text{I } 22)$$

D'où la relation matricielle:

$$G_p(w^2) = [I - G (w^2) . P]^{-1} G (w^2) \quad (\text{I } 23)$$

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

I.4.3 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[20] 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 *Szeftel* et *Khater* dans les deux articles [20 ,21], le

premier étant un développement du formalisme mathématique utilisé et le second une application directe aux surfaces $Ni(100)$ et $Ni(100) + c(2 \times 2)$ [10].

En 1994, la méthode a été appliquée et adaptée par M. Tamine [11], en utilisant par *Khater-al*, 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.

I.4.3.1 Formulation générale de la méthode de raccordement pour le calcul des modes localisés de surface

La méthode de raccordement est une méthode analytique [11], 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 [10, 11]. Pour une surface plane qui borne un solide semi-infini, les trois régions sont les suivantes (figure I.3) :

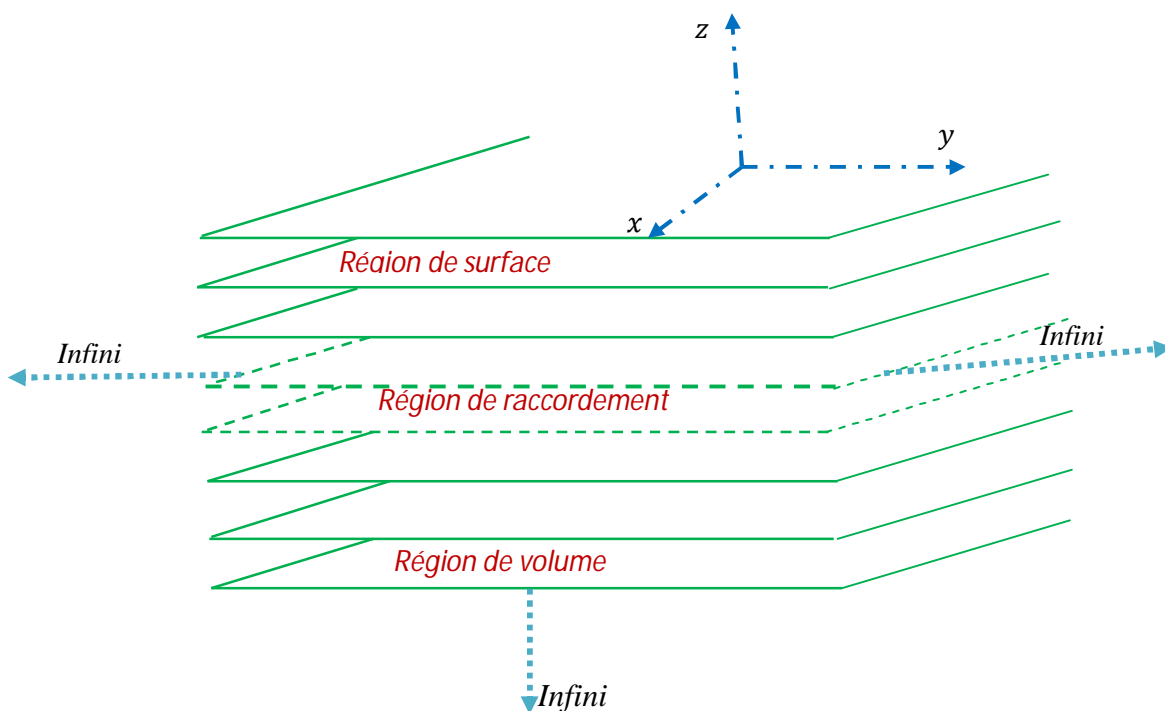


Figure I.3 : Représentation schématique d'un solide cristallin semi-infini qui cite les trois régions : de défaut, de raccordement, et de volume

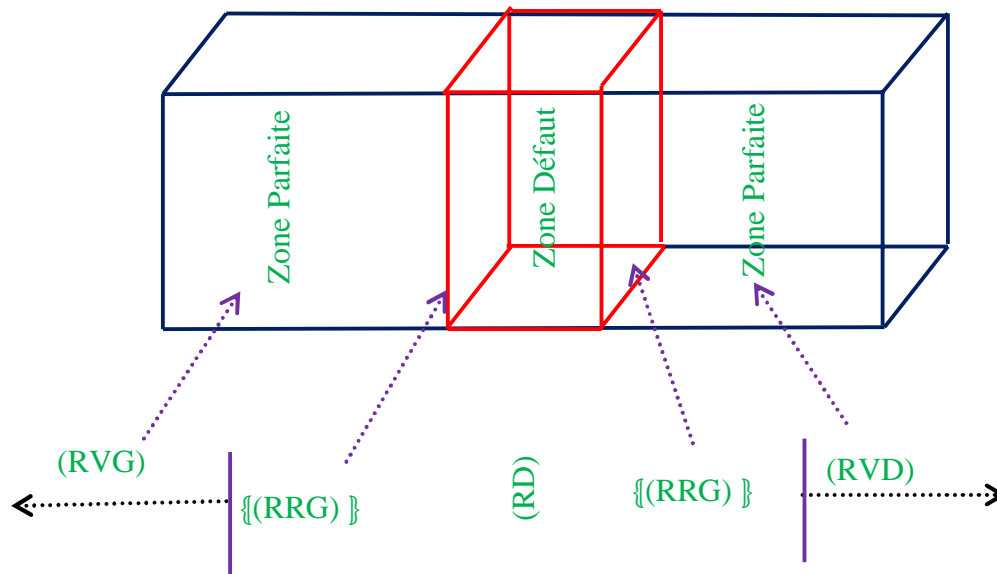


Figure I.4 : Représentation schématique des zones semi-infinies parfaites par la méthode de raccordement

A partir de la figure I.3 et la figure I.4, les différentes régions qui composent le système sont:

- **Régions parfaites (volume) (RVG et RVD) :**

C'est la région à droite ou à gauche (la figure I.3) [11], ou bien c'est une partie du réseau d'atomes se trouvant loin de la surface du solide (suffisamment loin du défaut) d'une manière telle qu'elle soit hors de la portée de tous les effets de celle-ci (figure I.4). Cette région est caractérisée par sa périodicité tridimensionnelle et permet de déterminer les courbes de dispersion en volume :

$$l > l_v$$

Où l_v : représente la troisième coordonnée de l'atome associé au premier plan définissant la région de volume.

- **Régions de surface (défaut) (RD) :**

C'est la région qui renferme tous les types de défaut [11] (figure I.4), ou bien celle-ci est composée des premiers plans atomiques du système formant la surface de semi-infini [10] (figure I.3). Cette région affectée par la relaxation et la reconstruction des plans atomiques, c'est une région ayant une périodicité deux dimensionnelle [10] (une symétrie de translation planaire), elle a en général des propriétés vibrationnelles différentes de celles du volume.

$$l < l_s$$

Notons :

l_s : La coordonnée selon la direction normale à la surface par laquelle se manifeste la brisure de symétrie.

○ **Régions de raccordement (RRG et RRD) :**

Est une région intermédiaire à gauche ou à droite, entre la région parfaite et la région de défaut [11]. Elle permet dans la modélisation théorique de raccorder analytiquement les modes de surface avec les états vibrationnels de la région de volume [10] :

$$l_s \leq l \leq l_v$$

Maintenant, d'après la description générale de la méthode de raccordement, que nous avons choisi pour notre étude. Vient la formulation du problème à étudier.

I.4.3.2 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 [10]. Les déplacements dans la direction cartésienne α , entre d'une part un atome l appartenant à un plan P et d'autre part, un atome l' appartenant à un plan P' tous deux parallèles au défaut mais se trouvant dans la région de volume, vérifient la relation suivante :

$$u_\alpha(l', P', \omega) = u_\alpha(l, P, \omega) \cdot z^{(P'-P)} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}(l', l)} \quad (124)$$

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 ω , est donnée par l'expression suivante :

$$\omega^2 M_l u_\alpha(l, \omega^2) = -\sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} K(l', l) \left[\frac{r_\alpha r_\beta}{d^2} \right] [u_\beta(l', \omega) - u_\beta(l, \omega)] \quad (125)$$

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

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

r_α : représente la composante du vecteur position relative entre les sites (l) et (l').

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

ω^2 : est la fréquence de vibration de l'atome considéré.

En insérant l'équation (I 24) dans l'équation de mouvement (I 25) 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 volume, qui peuvent analytiquement s'écrire ainsi :

$$\omega^2 M_l u_\alpha(l, \omega) + \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} K(l', l) \left[\frac{r_\alpha r_\beta}{d^2} \right] u_\beta(l', \omega) [Z^{(P-P)} e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}(l', l)} - 1] = 0 \quad (\text{I 26})$$

Ou sous la forme matricielle suivante :

$$[\omega^2 I - D(\vec{q}, z)] |u\rangle = |0\rangle \quad (\text{I 27})$$

La condition de ce système donne accès pour chaque donnée (\vec{q}, ω) 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}, ω) . Puis nous déterminons les équations de mouvement (I.8) pour les sites représentatifs des trois régions. Ceci nous conduit naturellement à un système matriciel 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}, ω) 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 :

$$u_\alpha(l, \omega) = \sum_{i=1}^n A(\alpha, z_i) z_i^{P-P_s} R_i \quad (\text{I 28})$$

- ✓ P : représente la troisième coordonnée de l'atome l .
- ✓ P_s : représente la troisième coordonnée de l'atome de surface.
- ✓ α : parcourt les trois directions cartésiennes x, y, z .
- ✓ 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 $i^{\text{ème}}$ mode évanescent dans la direction cartésienne α .

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 M_R à l'aide des développements (I 29)

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

$$\det(\Omega^2 I - M_S(\vec{q}, \Omega)) = 0 \quad (\text{I 29})$$

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 ω_0 du volume donnée par $\omega_0^2 = K_1 / M_l$

K_1 : Constante de force entre premiers voisins en volume.

Conclusion

Le travail présenté dans ce premier chapitre, s'inscrit dans le cadre d'une introduction à l'étude théorique de surface et d'interface, vu l'importance de leurs études, en introduisant des notions de base utiles pour faciliter aux lecteurs sa compréhension. En effet, nous avons effectué un rappel sur la cristallographie et la zone de Brillouin. Par la suite, nous avons décrits les trois méthodes cités plus haut, après nous avons donné en détaille le principe de la troisième méthode sur lesquelles s'est basé notre travail.

CHAPITRE II

Dynamique vibrationnelle des systèmes parfaits de type cubique simple

INTRODUCTION

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 et les mécanismes à l'origine de la réaction chimique.

Les atomes dans un solide cristallin, sont placés de manière très ordonnées, ce sont les forces interatomiques qui leur confèrent leur arrangement spécifique. Ces forces jouent les mêmes rôles que les ressorts dans un système « masse-ressort » [10].

Nous avons vu que les atomes s'organisaient dans les cristaux 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) et des conséquences indirectes (effet sur les électrons, l'interaction attractive). L'origine de ces vibrations peut être l'effet d'une agitation thermique ou d'une excitation électromagnétique [10].

A ces vibrations atomiques sont associées des quasi-particules appelées « phonons ». La phase solide, et plus particulièrement la phase cristalline est un milieu propice à la propagation de phonons. Toutefois, il est pratique de différencier les modes du réseau selon les situations qu'on peut classer comme suit :

- Les modes du réseau sont les modes collectifs d'un cristal parfait qui existent indépendamment de la présence d'une impureté (soit par un mouvement de translation de l'ensemble du cristal « phonons acoustique », soit par résultent des mouvements internes du cristal).
- Les modes localisés correspondent à des modes de basse énergie de l'impureté du réseau.
- Les modes pseudo localisés résultent d'une combinaison entre les modes du réseau et les modes localisés.

II.1 Le système modèle

II.1.1 Etapes préliminaires

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 ($a = 1$).

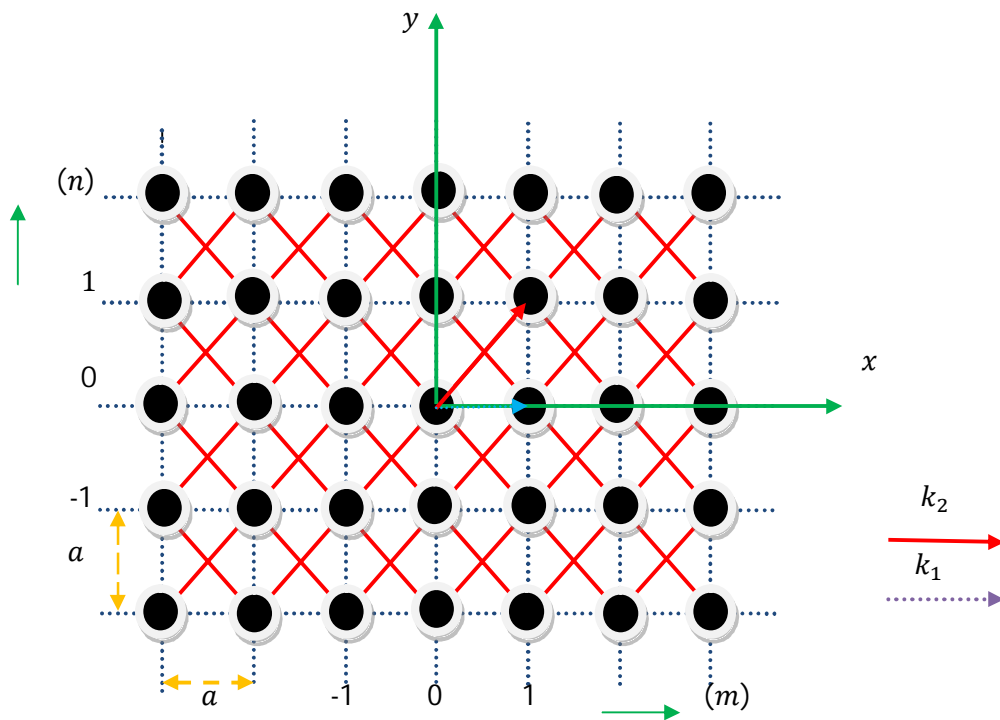


Figure II.1 : Représentation du guide d'onde parfait

II.1.2 Les équations de mouvement

La dynamique du guide d'onde est décrite par les équations de Newton qui définissent les amplitudes des déplacements $u_\alpha(l)$ en un site (l) suivant α , ou α désigne les deux directions de l'espace x et y du moment que nous étudions un mouvement dans le plan (figure .II.1).

Afin de déterminer la dynamique vibrationnelle de guide d'onde, 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 [1] associée au modèle des forces centrales. L'équation de mouvement d'un atome l est donnée par :

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

α et β représentent des directions cartésiennes. $m(l)$ indique la masse de l'atome du site (l), $u_\alpha(l, \omega)$ le déplacement suivant la direction α , r_α représente la composante 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 ω est la fréquence de vibration de l'atome considéré. Pour $(\alpha, \beta) \in \{x, y\}$, les différentes directions possibles de l'espace.

Les projections de l'équation (II.1) suivant chacune des directions cartésiennes considérées permettent de trouver les équations ci-dessous. Nous rappelons que la sommation sur l' porte sur tous les premiers et deuxièmes voisins du site (l).

a) La projection suivant ($\alpha = x$) donne l'expression :

$$m\omega^2 u_x(l, \omega^2) = - \sum_{l' \neq l} k(l, l') \frac{r_x^2}{d^2} [u_x(l, \omega^2) - u_x(l', \omega^2)] - \sum_{l' \neq l} k(l, l') \frac{r_x r_y}{d^2} [u_y(l, \omega^2) - u_y(l', \omega^2)] \quad (\text{II. 2 . a})$$

Qui s'écrit, sous forme développée, comme suit :

$$\begin{aligned} m\omega^2 u_x(m, n) = & -k_1(u_x(m, n) - u_x(m+1, n)) - k_1(u_x(m, n) - u_x(m-1, n)) \\ & - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - u_x(m+1, n+1)) - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - u_x(m+1, n-1)) \\ & - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - u_x(m-1, n+1)) - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - u_x(m-1, n-1)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - u_y(m+1, n+1)) + \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - u_y(m+1, n-1)) \\
 & + \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - u_y(m-1, n+1)) - \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - u_y(m-1, n-1)) \quad (\text{II 2 à})
 \end{aligned}$$

b) La projection suivant ($\alpha=y$) donne l'expression :

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

Après développement, devient :

$$\begin{aligned}
 m\omega^2 u_y(m, n) &= -k_1(u_y(m, n) - u_y(m, n+1)) - k_1(u_y(m, n) - u_y(m, n-1)) \\
 & -\frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - u_x(m+1, n+1)) + \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - u_x(m+1, n-1)) \\
 & + \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - u_x(m-1, n+1)) - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - u_x(m-1, n-1)) \\
 & -\frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - u_y(m+1, n+1)) - \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - u_y(m+1, n-1)) \\
 & -\frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - u_y(m-1, n+1)) - \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - u_y(m-1, n-1)) \quad (\text{II 2 b'})
 \end{aligned}$$

Où le site (l) est assimilé à un couple de coordonnées (m, n)

Notons que les liaisons diagonales qui couplent les déplacements parallèle et perpendiculaire à l'axe x sont nécessaires pour stabiliser le système relativement au cisaillement.

II.1.3 La matrice dynamique - équations propres

Les équations (II.2.à) et (II.2. b') doivent être résolues pour tous les atomes considérés avec des conditions aux limites appropriées, et pour lesquelles nous obtenons des solutions d'ondes planes de la forme :

$$\vec{u}(l) = \vec{u}(l=0) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (\text{II 3})$$

Où \vec{q} est le vecteur d'ondes, \vec{r} la position d'équilibre atomique et le vecteur \vec{u} décrit les amplitudes des déplacements de chaque atome :

$$\vec{u}(l) = \begin{pmatrix} u_x(l) \\ u_y(l) \end{pmatrix} \quad (\text{II 4})$$

Dans la direction ox du mouvement, l'onde peut être atténuée en rencontrant le défaut. De ce fait, il serait commode de relier les vecteurs déplacements de deux atomes adjacents par un facteur d'atténuation z , tel que :

$$u_x(m \pm 1, n) = z^{\pm 1} u_x(m, n) \quad (\text{II } 5)$$

Cette relation est une caractéristique essentielle de la méthode de raccordement [15,16]. Pour les ondes propagantes des équations (II 3) nous avons :

$$z = e^{iq_x \alpha} = e^{iq_x r_x} \quad (\text{II } 6)$$

C'est-à-dire que le module de z est égal à l'unité, donc dans l'équation nous pouvons écrire $z = e^{iq_x}$ où q_x : étant le vecteur d'onde unidimensionnel du réseau réciproque dans la direction parallèle à l'axe x .

Quant à la direction perpendiculaire au mouvement, c'est -à-dire suivant y qui est un axe de symétrie pour tout le problème, nous pouvons écrire :

$$u_y(m, n \pm 1) = e^{\pm i \varphi_y} u_y(m, n) \quad (\text{II } 7)$$

$$\text{Où } \varphi_y = q_y \alpha = q_y r_y \quad (\text{II } 8)$$

q_y : étant le vecteur d'onde unidimensionnel du réseau réciproque dans la direction parallèle à l'axe y .

Caractérisant les ondes planes des relations (II6) et (II7), les équations du mouvement (II 2 à) et (II 2 b) du système se transforment, respectivement, en :

$$\begin{aligned} m\omega^2 u_x(m, n) = & -k_1(u_x(m, n) - z u_x(m, n)) - k_1(u_x(m, n) - z^{-1} u_x(m, n)) \\ & - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - z e^{i\varphi_y} u_x(m, n)) - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - z e^{-i\varphi_y} u_x(m, n)) \\ & - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - z^{-1} e^{i\varphi_y} u_x(m, n)) - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - z^{-1} e^{-i\varphi_y} u_x(m, n)) \\ & - \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - z e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) + \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - z e^{-i\varphi_y} u_y(m, n)) \\ & + \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - z^{-1} e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) - \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - z^{-1} e^{-i\varphi_y} u_y(m, n)) \end{aligned} \quad (\text{II } 8 \text{ a})$$

$$\begin{aligned}
 m\omega^2 u_y(m, n) = & -k_1(u_y(m, n) - e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) - k_1(u_y(m, n) - e^{-i\varphi_y} u_y(m, n)) \\
 & - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - z e^{i\varphi_y} u_x(m, n)) + \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - z e^{i\varphi_y} u_x(m, n)) \\
 & + \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - z^{-1} e^{i\varphi_y} u_x(m, n)) - \frac{K_2}{2} (u_x(m, n) - z^{-1} e^{-i\varphi_y} u_x(m, n)) \\
 & - \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - z e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) - \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - z e^{-i\varphi_y} u_y(m, n)) \\
 & - \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - z^{-1} e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) - \frac{K_2}{2} (u_y(m, n) - z^{-1} e^{-i\varphi_y} u_y(m, n))
 \end{aligned}$$

(II 8 b)

En divisant les expressions (II 8 a) et (II 8 b) par K_1 qui représente la constante de force entre les premiers proches voisins, les équations du mouvement suivant x et y forment le système qui suit :

Suivant (ox) :

$$[\Omega^2 - 2 - 2r + (z + z^{-1}) + \frac{r}{2} (z + z^{-1})(z_2 + z_2^{-1})]u_x(m, n) + \frac{r}{2} [(z - z^{-1})(z_2 - z_2^{-1})]u_y(m, n) = 0.$$

Suivant (oy) :

$$[\Omega^2 - 2 - 2r + (z + z^{-1}) + \frac{r}{2} (z + z^{-1})(z_2 + z_2^{-1})]u_y(m, n) + \frac{r}{2} [(z - z^{-1})(z_2 - z_2^{-1})]u_x(m, n) = 0.$$

On pose : $z_2 + z_2^{-1} = 2 \cos(\varphi_y)$ et $z_2 - z_2^{-1} = 2i \sin(\varphi_y)$

Les deux équations précédentes deviennent :

Suivant (ox) :

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

Suivant (oy) :

$$[\Omega^2 - 2 - 2r + (z + z^{-1})(1 + \cos(\varphi_y))]u_y(m, n) + [(z - z^{-1})\sin(\varphi_y)]u_x(m, n) = 0 \quad (\text{II 9})$$

Où $\Omega = \left[\frac{m \omega^2}{k_1} \right]^{1/2} = \frac{\omega}{\omega_0}$ 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.

Les équations précédentes peuvent être résumées sous la forme matricielle suivante :

$$[\Omega^2 I - D(\varphi_y, z, r)]|\vec{u}\rangle = |\vec{0}\rangle \quad (\text{II } 10)$$

I : représente la matrice identité

$$D(\varphi_y, z, r) = \begin{bmatrix} D_1 & D_3 \\ D_3 & D_2 \end{bmatrix} \quad (\text{II } 11)$$

$D(\varphi_y, z, r)$: est appelée matrice dynamique de la taille (2 x 2)

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

$$D_2 = \Omega^2 - 2 - 2r + (z + z^{-1})(1 + r \cos(\varphi_y)) \quad (\text{II } 12)$$

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

Le système des trois équations (II 8), (II 9), (II 10) précédent n'admet de solution non trivial si et seulement si son déterminant est nul :

$$\text{Det} [\Omega^2 I - D(\varphi_y, z, r)] = 0 \quad (\text{II } 13)$$

II.2 Courbes de dispersion

En résolvant l'équation (II 10), 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 Ω_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 φ_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 (φ_x, φ_y) du vecteur d'onde déterminent l'angle d'incidence de l'onde propageante relativement aux directions x et y .

Lorsque φ_x parcourt la première zone de Brillouin $[-\pi, \pi]$ on obtient les courbes de dispersion $\Omega(\varphi_x)$. Où la fréquence Ω se déduit du nombre d'onde φ_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, Ω est proportionnel à φ_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 φ_y . Ces résultats indiquent la tendance des branches de dispersion à être des fonctionnelles de φ_y .

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

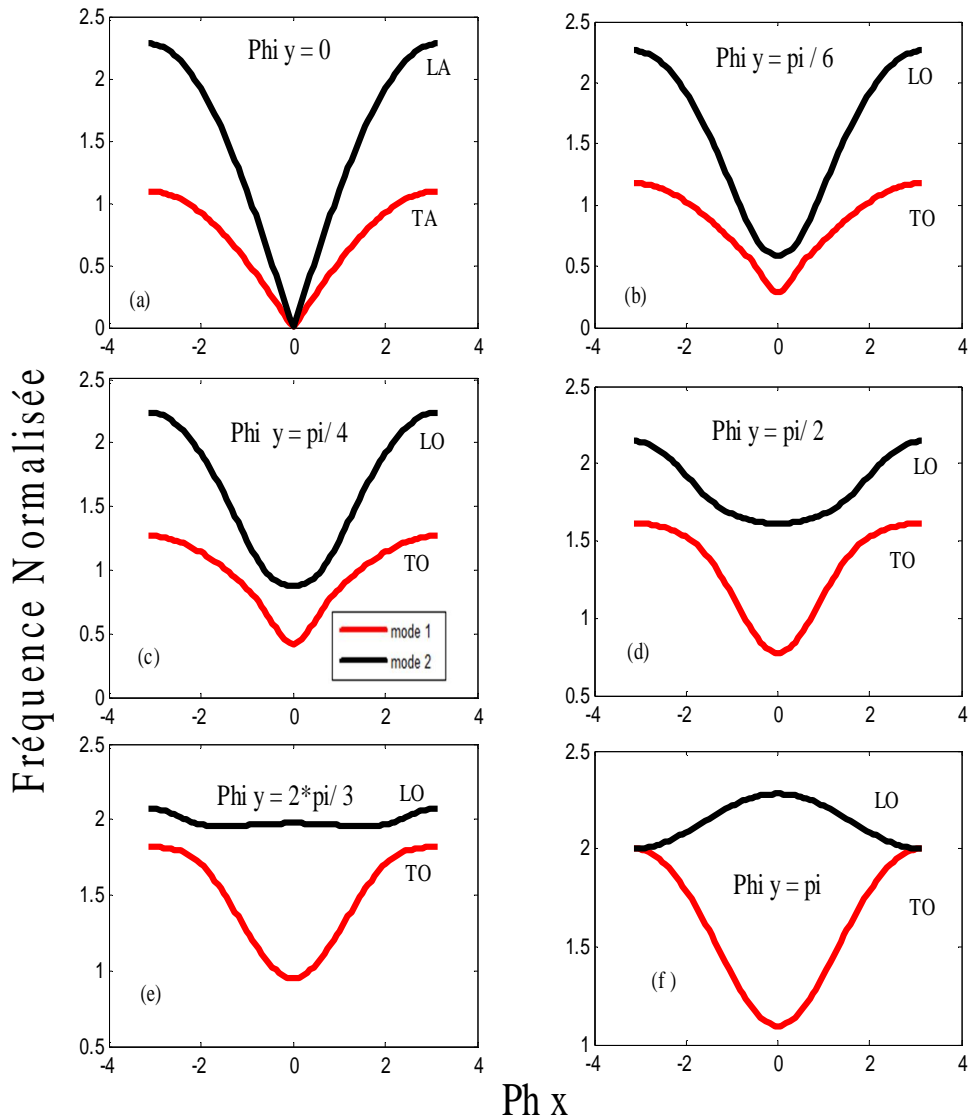


Figure II. 2: Dispersion des modes propageant du guide d'onde parfait pour différentes valeurs des valeur φ_y ; mode 1 ; en couleur rouge, mode 2 ; en couleur noire

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.

II.2.1 Courbes de dispersion pour des différentes valeurs de φ_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 φ_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 φ_y ces modes deviennent optiques ($\Omega \neq 0$ quand $\varphi_x = 0$). Les figures II.2.a et II.2.f indiquent aussi que les deux branches sont dégénérées pour $\varphi_y = 0$ et π , 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 φ_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.f 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 φ_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 $\Delta\Omega = 1.45$ (fig .2.a) à $\Delta\Omega = 0$ (fig.2.e) 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. $[0, 2.45]$ (fig .II.2.a). 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 (fig .II.2.f).

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 (fig .II.2.a); 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 (fig .II.2.f).

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 (1) et à un mode longitudinal (2) ; la numérotation se fait de bas en haut ; il y a lieu de signaler que ce choix est arbitraire.

II.2.2 Courbes de dispersions pour 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 , elles sont représentées sur la figures II.3 (φ_x , φ_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 $r = 0.1$: $\Omega_1 \in [0, 0.6325]$ et $\Omega_2 \in [0, 0.098]$.

$$r = 0.9 : \Omega_1 \in [0, 1.896] \text{ et } \Omega_2 \in [0, 2.755].$$

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

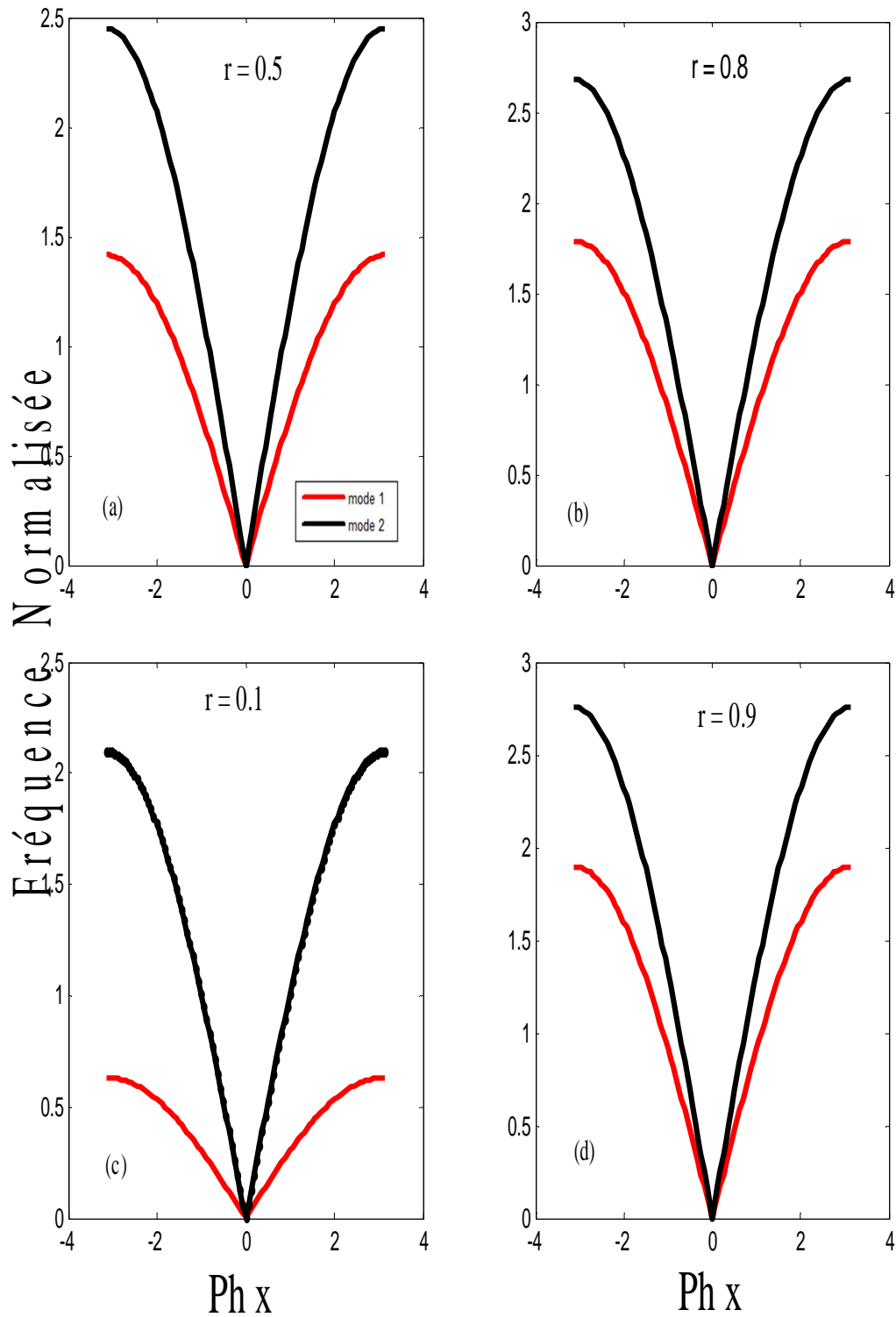


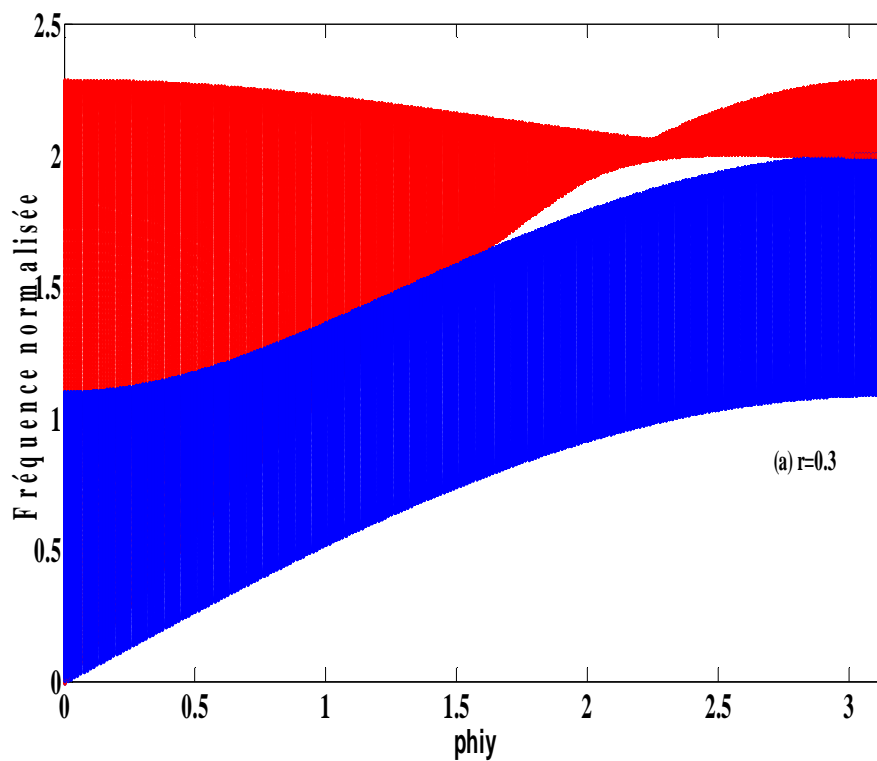
Figure II .3 : Courbes de dispersion du guide d'ondes parfait dans la première zone de Brillouin des deux modes pour différentes valeurs de r .

II.2.3 Les bandes passantes et interdites

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

La résolution numérique du système d'équation (II 9) 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 r 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).



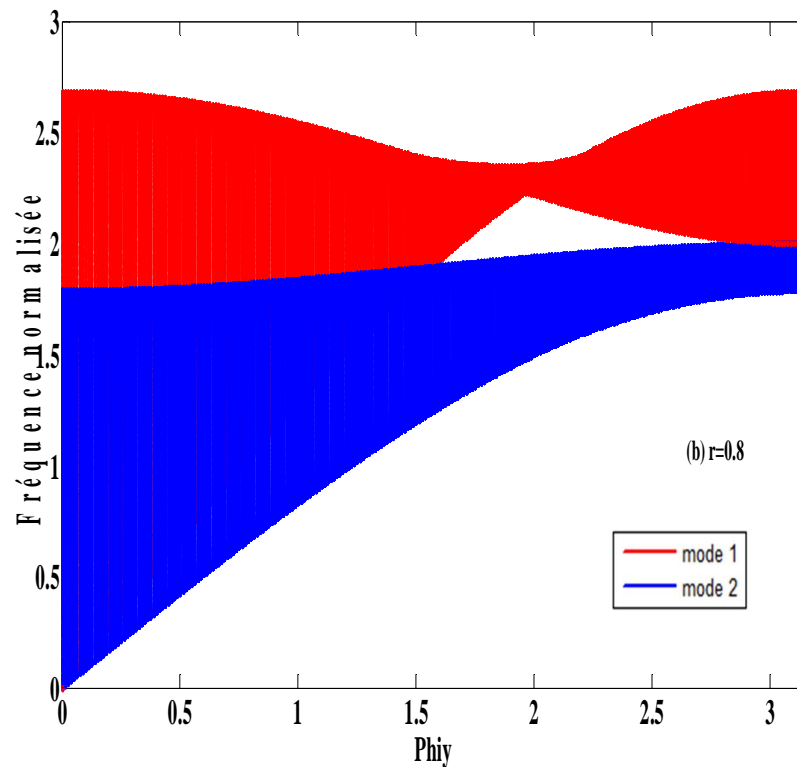


Figure II.4 : Bandes passantes de volume pour $r = 0.3$ en (a) et $r = 0.8$ en (b)

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 (fig.II.5.a) et longitudinal 2 (fig.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.

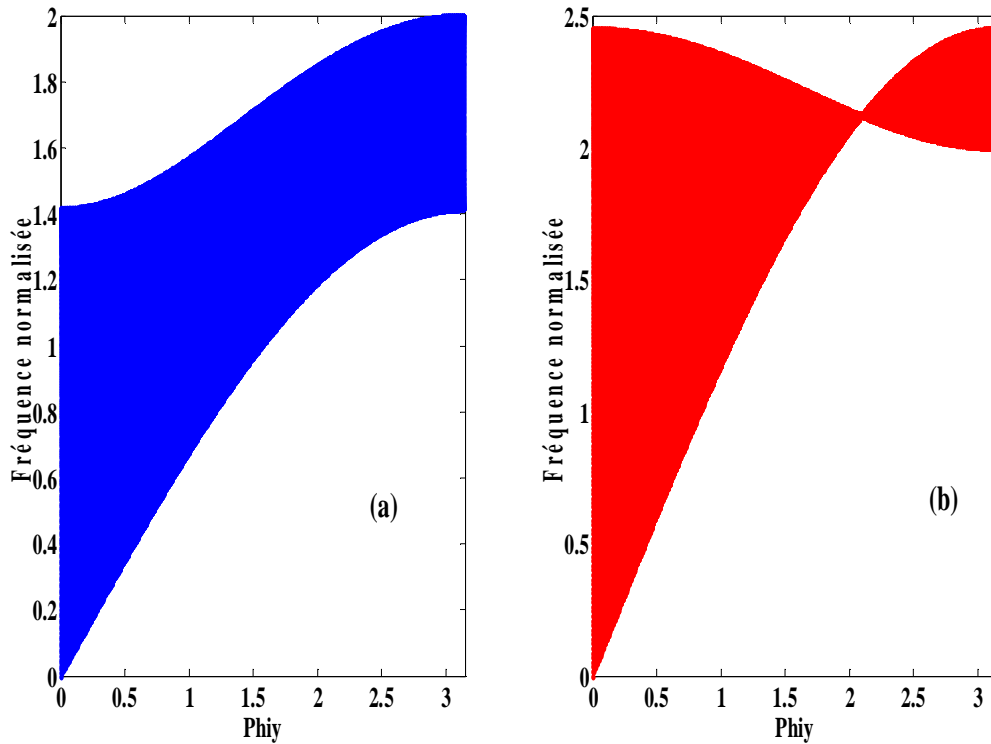


Figure II.5 : Bande propageante des modes transversal en (a) et longitudinal en (b) pour la valeur de r fixe ($r = 0.5$).

II.3 Modes évanescents

II.3.1 Calcul des facteurs de phase

Pour décrire le phénomène de diffusion des modes de vibration en présence des défauts, nous avons besoin non seulement d'une analyse détaillée des modes de propagation $|\xi| = 1$, mais aussi des modes évanescents du système pour lesquels $|\xi| < 1$. En effet lors d'un tel processus, ce n'est pas le vecteur d'onde \vec{q} qui est conservé mais la fréquence. En d'autres termes, les défauts couplent les différents modes à fréquence constantes. Il faut donc inverser le problème et prendre Ω comme variable indépendante [35]. On doit considérer non seulement les modes propageants mais tenir compte aussi des modes évanescents du système, donc pour chaque fréquence Ω donnée, on doit prendre toutes les solutions $|Z| \leq 1$. Pour cela deux méthodes de calcul peuvent être utilisées. Les solutions s'obtiennent en utilisant la méthode du déterminant où la méthode d'augmentation de base. Dans ce travail nous utilisons la première méthode.

II.3.1.1 La méthode de déterminant

La méthode consiste à déterminer les racines caractéristiques du système d'équation linéaire (II.11), pour le quel une solution non triviale requiert que son déterminant soit nul. Il peut alors s'exprimer par le polynôme caractéristique de degré quatre en Z suivant :

$$\sum_{n=0}^4 A_n(\Omega, \varphi_y, r) z^n = 0 \quad (\text{II } 14)$$

Ce qui donne l'équation suivante :

$$A_0 + A_1 z + A_2 z^2 + A_3 z^3 + A_4 z^4 = 0 \quad (\text{II } 14 \text{ a})$$

La symétrie du problème en volume et la nature hermitienne de la matrice dynamique impose que si z est solution z^{-1} l'est aussi. A_n sont des fonctions des paramètres du système Ω , φ_y et r .

La résolution numérique du polynôme nous donne des solutions z dépendant de la fréquence Ω et des paramètres du système. Les solutions physiquement acceptables doivent satisfaire l'inégalité suivante : $|z| \leq 1$, ce qui correspond à la propagation ou à l'évanescence des modes vibrationnels du plan infini [28 ,29].

II.3.1.2 Les facteurs de phase obtenus

Les comportements fonctionnels des modes propres longitudinal et transversal représentés dans l'espace $\Omega (Z)$ sont donnés par la figure II.6. Elle Représente les projections des deux courbes de la figure II.a sur le plan complexe Z . Les solutions propageantes se rapportent toujours aux courbes qui suivent le cercle d'équation $|Re (z)|^2 + |Im (z) |^2 = 1$, c'est-à-dire les solutions dont le module de Z est égal à l'unité. En revanche, les solutions évanescences correspondent aux courbes contenues à l'intérieur du cercle.

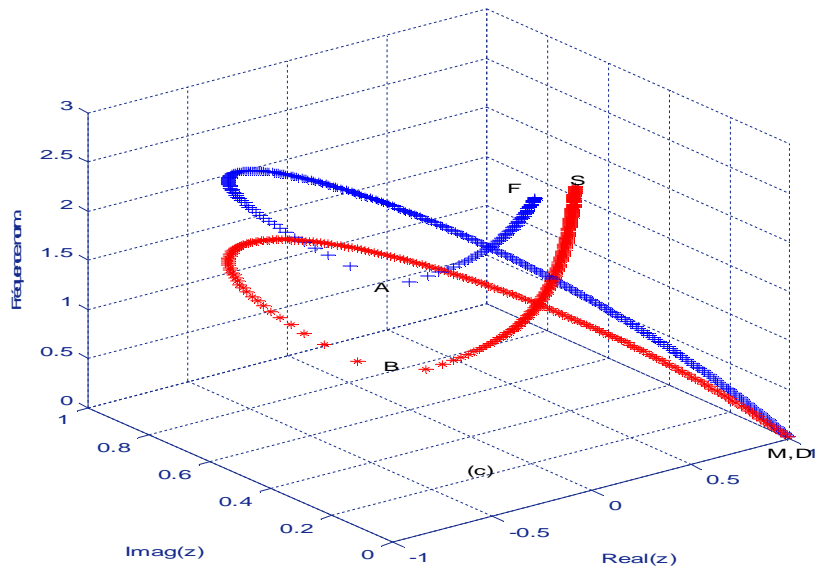


Figure II.6 : Variation des facteurs de phase en fonction de fréquence Ω

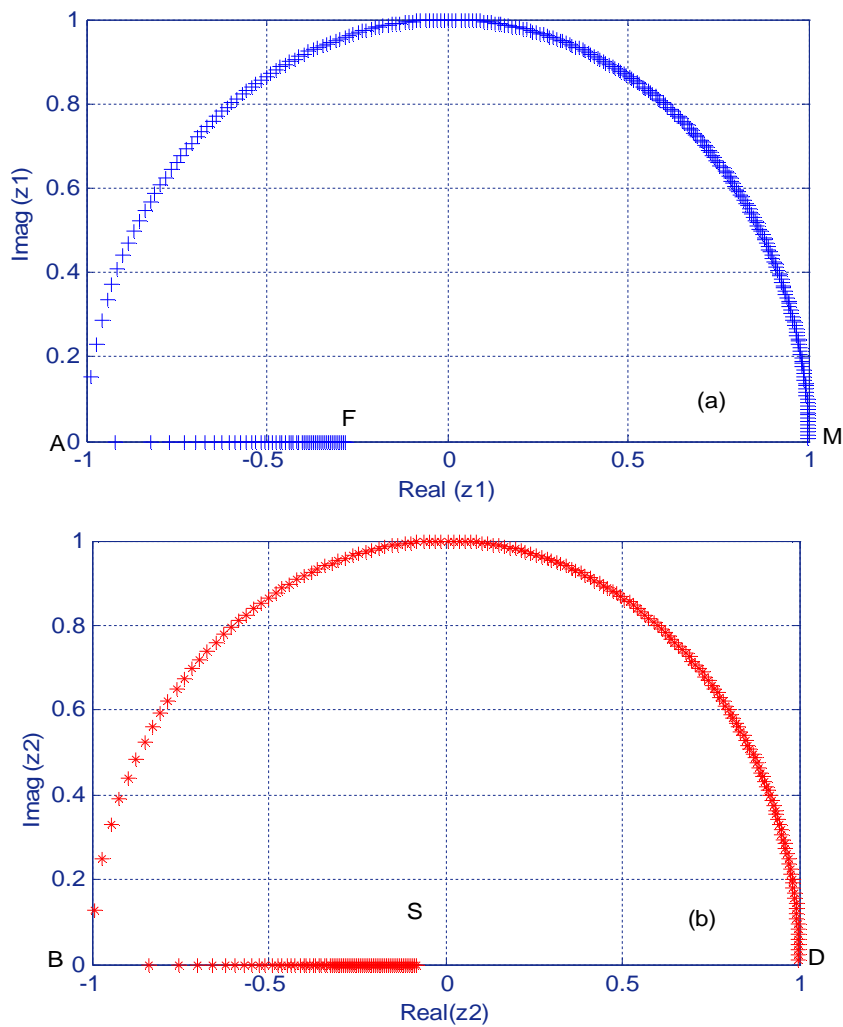


Figure II.7: Comportement fonctionnel de (z) pour $\varphi_y = 0$, en bleu mode 1, en rouge mode 2

Nous constatons que l'évanescence du champ vibrationnel commence au point A ($Re(z) = -0.9191, Im(z) = 0$) pour le premier mode (figure II.7.a) et au point B ($Re(z) = -0.91921, Im(z) = 0.1257$) pour le second (figure II.7.b), ce qui correspond respectivement aux fréquences $\Omega = 2.61$ et $\Omega = 1.67$ visibles sur la figure II.6.c.

A $\varphi_y = 0$, la représentation spatiale $\Omega(z)$ indique que les deux modes sont dégénérés au point $M (z = 1, \Omega = 0)$ (figure II.6). Au fur et à mesure que Ω croît, les deux modes suivent les deux branches acoustiques existantes, le premier jusqu'à $\Omega = 2.61$ et le deuxième jusqu'à $\Omega = 1.67$. Au delà de ces valeurs, ils deviennent tous les deux évanescents.

Afin de faciliter la comparaison entre les deux représentations (φ_x) (fig.II.2) et (Z), (fig.II.7 et fig.II.8), nous avons marqué sur les différentes courbes les mêmes points particuliers. Les branches AM et BD des figures II.7 représentent les parties propagantes des deux modes, en accord avec les courbes de dispersion de la figure II.2.a. Alors que AF et BS se rapportent à leur partie évanescence comme confirmé sur les figures II.7.a et II.7.b. Naturellement, ces deux branches ne peuvent se retrouver dans les courbes de dispersion puisque ces dernières correspondent à des modes propagants.

A titre d'exemple, les deux points M et D (fig.II.6) sont repérés par les coordonnées spatiales ($Re(Z) = 1, Im(Z) = 0, \Omega = 0$) qui correspondent aux coordonnées coplanaires ($\varphi_x = 0, \Omega = 0$) sur la figure II.2.a.

Sur la figure II.8, nous montrons l'évolution des courbes $\Omega(z)$ pour quelques valeurs caractéristiques de la phase φ_y . Considérons d'abord le mode transversal 1 (courbe en trait continu de la figure II.8). Par exemple, pour la valeur $\varphi_y = \pi/6$, il est immédiatement évanescence aux basses fréquences $\Omega < 0.37$ (branche QM); au point $M(\Omega \approx 0.37, Re(Z_1) = -0.9971, Im(Z_1) = 0.0764)$, il devient propagant et suit par conséquent le cercle de rayon unité de la branche optique jusqu'au point $A(\Omega \approx 1.46, Re(Z_1) = -0.9976, Im(Z_1) = 0.06887)$, puis redevient évanescence sur le reste de l'intervalle (branche AF). Quant au mode longitudinal 2 (figure II.8.1), il se propage entre les points $D(\Omega \approx 0.62, Re(Z_1) = -0.8934, Im(Z_1) = 0)$ et $B(\Omega \approx 1.46, Re(Z_1) = -0.9976, Im(Z_1) = 0.06887)$.

Le facteur de phase z est toujours réel et que son module diminue ensuite quand la composante φ_y augmente. Enfin, tous les résultants obtenus par la dispersion (φ_x) sont en parfait accord avec ceux donnés par la représentation spatiale $\Omega(z)$.

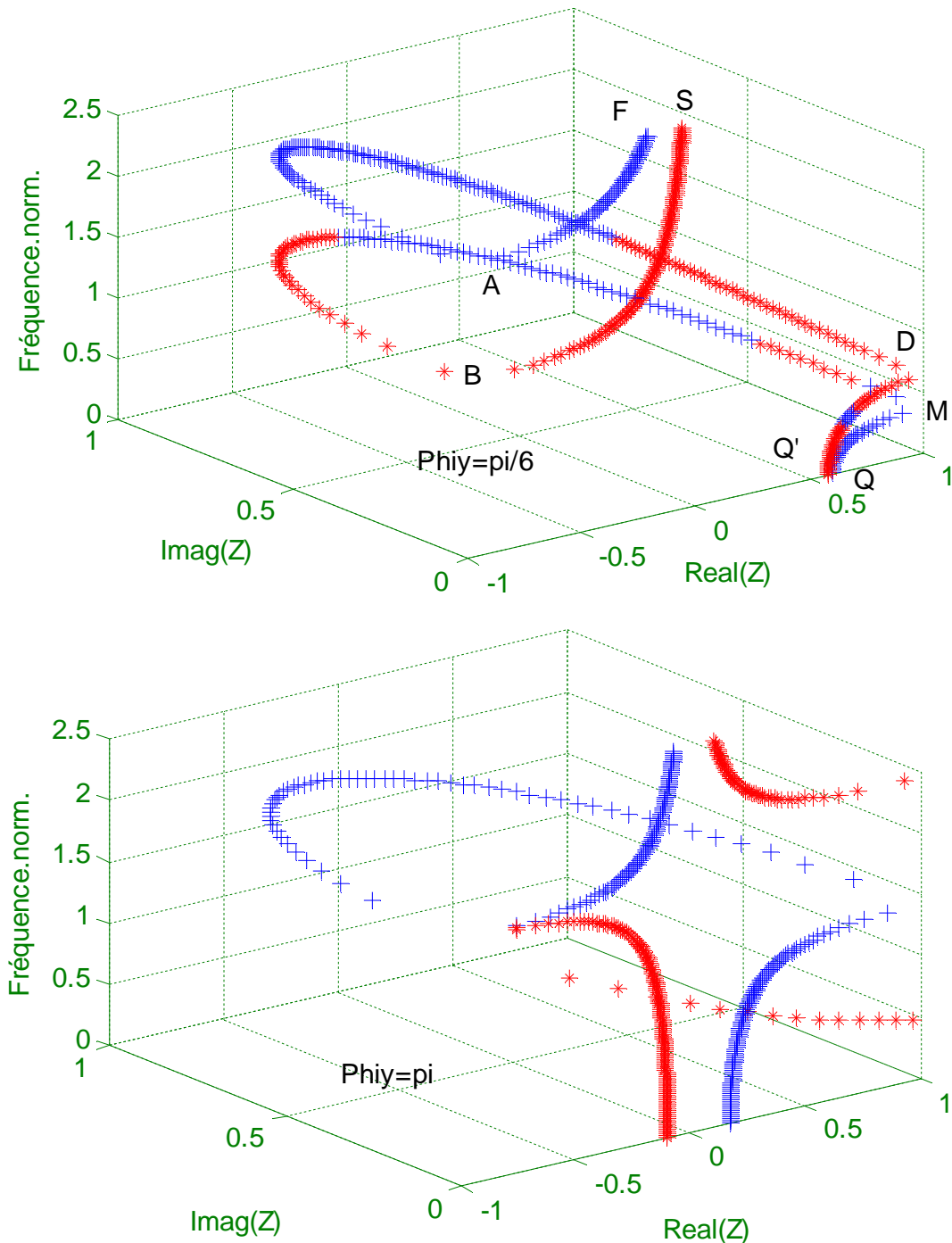


Figure II.8 : Comportements fonctionnels $\Omega(Z)$ pour $\varphi_y = \pi/6$ et $\varphi_y = \pi$ respectivement.

Il est aussi important d'étudier l'évolution des modules des facteurs de phase en fonction de la fréquence ou du vecteur d'onde dans le but de délimiter avec précision la plage de propagation ($|Z|=1$) relative à chacun des modes. La figure(II.9) montre cette variation. L'allure de ces courbes demeure globalement la même, que $|Z|$ soit tracé en fonction de la fréquence normalisée ou en fonction du vecteur d'onde.

Nous constatons que pour $\varphi_y = 0$, le mode transversal 1 est propageant dans l'intervalle des fréquences $[0, 1.41]$ alors que le mode longitudinal 2 se propage dans toute la plage de fréquence $[0, 3.14]$. Ces résultats sont en parfait accord avec ceux de la figure II.6 et confirment par la même occasion, ceux donnés par le tracé des bandes propageantes de la figure II.5. Les points caractéristiques M, A, D, B, F, Q, S et Q' sont aussi reportés sur la figure II.9 toujours dans le souci de faciliter la comparaison avec les différentes figures II.2, II.7 et II.8

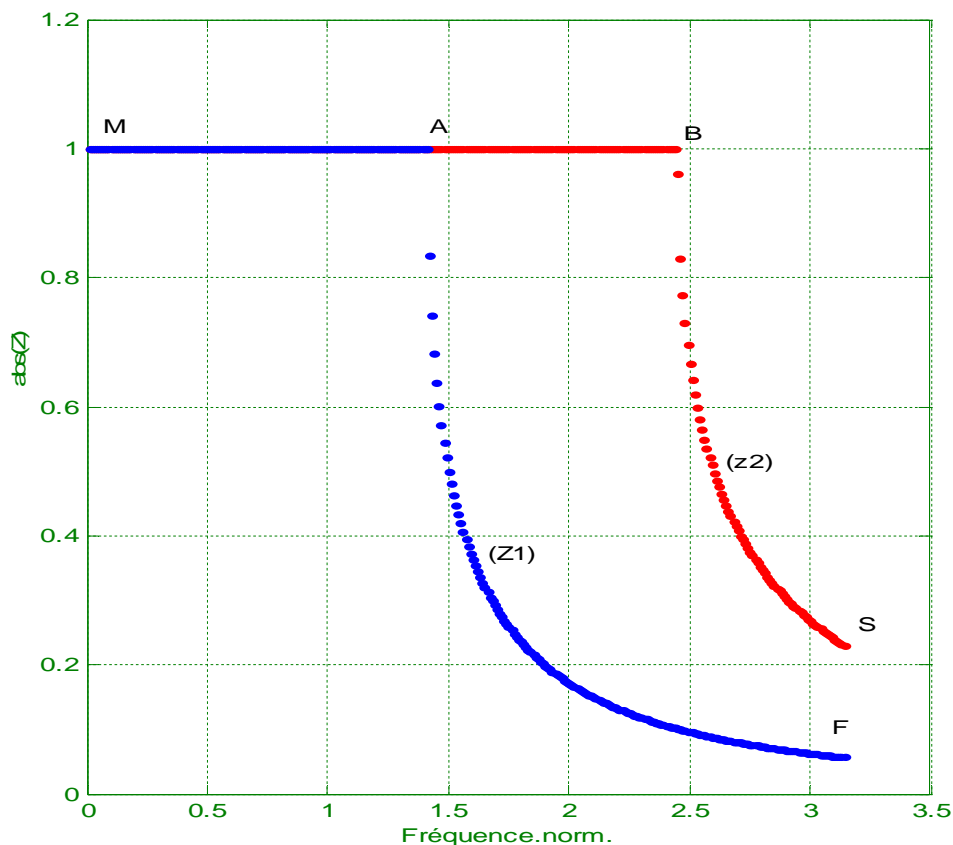


Figure II.9 : Variation de module des facteurs de phase z en fonction de la fréquence normalisée Ω .

Sur la figure II.10, nous montrons l'évolution des modules des facteurs de phase en fonction de la fréquence normalisée pour différentes valeurs de φ_y et pour la valeur de $r = 0.5$. Nous considérons les mêmes valeurs que celles utilisées dans le cas de la représentation spatiale (z) afin de faciliter la comparaison des résultats. Comme pour les courbes de dispersion, nous remarquons que la plage des fréquences propageantes diminue pour les deux modes quand la valeur de φ_y augmente. En même temps, cette augmentation de l'angle d'incidence φ_y provoque un déplacement vers les hautes fréquences des plages de propagation. Ces dernières seront caractérisées alors par des phonons très énergétiques.

Pour $\varphi_y = \pi$, par exemple, les fréquences propageantes se situent entre 1.4 et 2 pour le mode 2, et entre 2 et 2.45 pour le mode 1, d'autre part, en conformité avec les résultats donnée par les figures II.2.f et II.7 (pour $\varphi_y = \pi$).

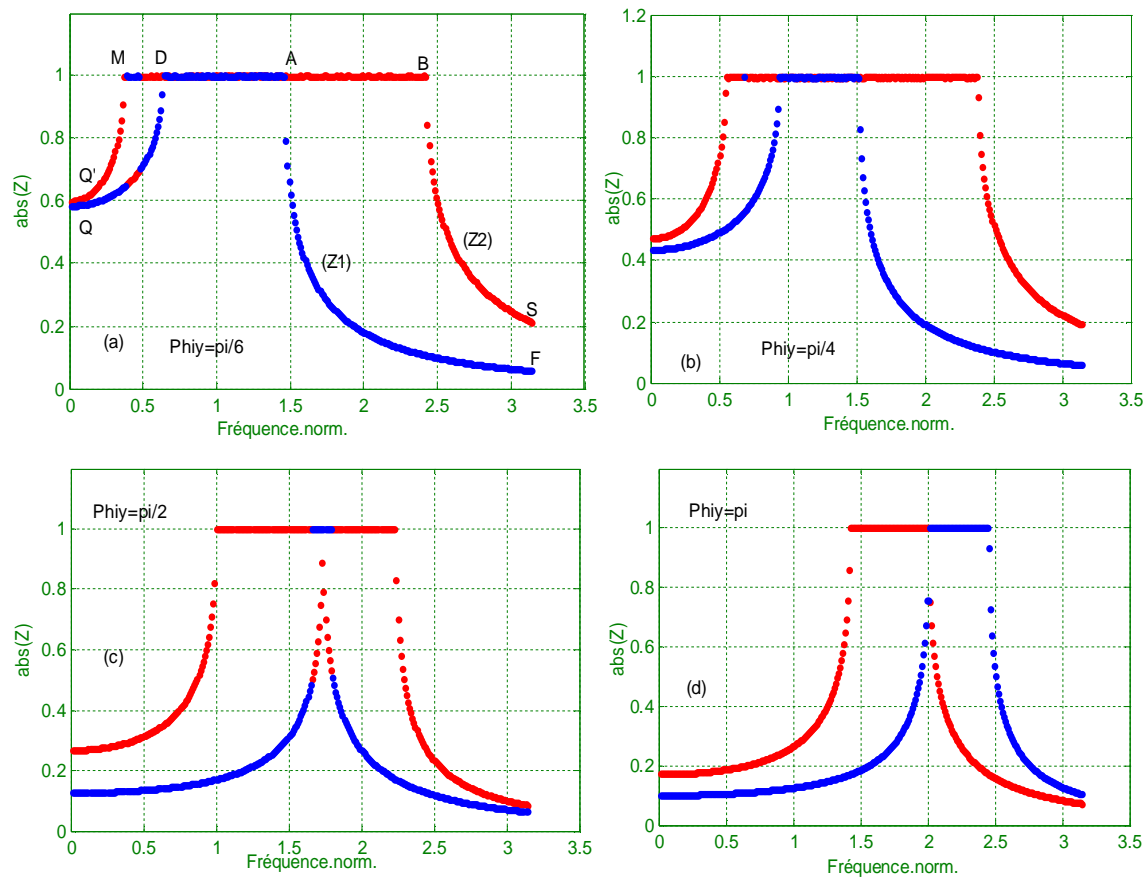


Figure II. 10 : Facteurs de phase en fonction de la fréquence normalisée Ω pour les différents valeurs de φ_y .

II.4 Calcul des vitesses de groupe

Lorsque le module du vecteur d'onde \vec{q} est de l'ordre de $1/a$, a étant le paramètre de réseau, la structure discontinue du plan intervient et $\Omega(\vec{q})$ croît moins vite avec q . Le milieu est alors dispersif et un paquet d'onde se déplace à la vitesse de groupe $V_g \neq \frac{\Omega(\vec{q})}{q}$.

Le rapport $\frac{\Omega(\vec{q})}{q}$ représente la vitesse de phase. Rappelons que cette dernière est toujours constante et indépendante de \vec{q} .

Par définition, la vitesse de groupe d'un paquet d'onde est la vitesse à laquelle est transportée l'énergie ou l'information dans le milieu. Elle est définie pour des vecteurs d'ondes \vec{q} réels par l'expression suivante :

$$V_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} \quad \text{soit } \vec{V}_g = \overrightarrow{\text{grad}}_q (\Omega) \quad (\text{II 15})$$

Dans le cas où q est différent d'un réel, nous imposons $V_g = 0$.

Pour déterminer cette vitesse, deux méthodes différentes peuvent être utilisées ; **la méthode des différences finies** et **la méthode perturbative** toutes deux exigent, d'ailleurs, la résolution du problème du guide d'onde parfait dans le sens :

$$D(\vec{q}) \cdot \vec{u} = -\Omega^2(\vec{q}) \cdot \vec{u} \quad (\text{II 16})$$

A \vec{q} fixe, nous trouvons deux valeurs propres de la fréquence $\Omega_v(\vec{q})$ avec les vecteurs propres correspondantes. Nous dans nos calculs, nous opterons plutôt pour la deuxième qui est plus élégante et probablement plus précise que la première parce qu'elle comporte une étape analytique en plus. Dans le paragraphe suivant nous rappelons l'essentiel de cette méthode [24].

III .1 Calcul par la méthode perturbative

Cette nouvelle approche, dite perturbative, consiste à utiliser la similitude formelle entre l'équation $D(\vec{q}) \cdot \vec{u} = -\Omega^2(\vec{q}) \cdot \vec{u}$ et l'équation de Schrödinger stationnaire $H\Psi = E\Psi$ portant sur les perturbations indépendantes du temps en Mécanique Quantique.

Supposons connus tous les éléments de l'équation :

$$D(\vec{q}_0) \cdot \vec{u}(\vec{q}_0) = -\Omega^2(\vec{q}_0) \cdot \vec{u}(\vec{q}_0) \quad (\text{II 17})$$

Le rôle de la perturbation est joué par un accroissement infinitésimal $\Delta \vec{q}$ tel que :

$$\vec{q} = \vec{q}_0 + \Delta \vec{q} \quad (\text{II } 18)$$

En nous limitant au premier ordre, nous pouvons considérer que le vecteur propre est constant

$$\vec{u}(\vec{q}) = \vec{u}(\vec{q}_0)$$

Par contre
$$D(\vec{q}) = D(\vec{q}_0) + \Delta \vec{q} \frac{\partial D}{\partial q} \quad (\text{II } 19)$$

$$\Omega^2(\vec{q}) = \Omega^2(\vec{q}_0) + \Delta \vec{q} \frac{\partial \Omega^2}{\partial q}$$

En tenant compte de ces approximations, la dérivée de l'équation $D(\vec{q}) \cdot \vec{u} = -\Omega^2(\vec{q}) \cdot \vec{u}$ permet de trouver la relation entre la dérivée de D et celle de Ω :

$$\frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} = - \frac{\partial \Omega^2}{\partial q} \vec{u} \quad (\text{II } 20)$$

Qui peut s'écrire sous la forme : $\vec{u}^t \frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} = - \frac{\partial \Omega^2}{\partial q} \vec{u}^t \vec{u}$ où \vec{u}^t est la transposée de \vec{u}

$$\Rightarrow \frac{\partial \Omega}{\partial q} = - \frac{1}{2\Omega} \vec{u}^t \frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} \quad (\text{II } 21)$$

La dérivée analytique $\frac{\partial D}{\partial q}$ se calcule à partir de l'équation (II 10)

$$\frac{\partial D}{\partial q} = \begin{bmatrix} i(1 + r_2 \cos(\varphi_y)) + \left(z - \frac{1}{z}\right) & -r_2 \sin(\varphi_y) \left(z + \frac{1}{z}\right) \\ -r_2 \sin(\varphi_y) \left(z + \frac{1}{z}\right) & ir_2 \cos(\varphi_y) \left(z - \frac{1}{z}\right) \end{bmatrix} \quad (\text{II } 22)$$

d'où,
$$V_g = - \frac{1}{2\Omega} \vec{u}^t \frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} \quad (\text{II } 23)$$

L'évolution des vitesses de groupe en fonction de la fréquence Ω , pour $\varphi_y = 0$, sont représentées sur la figure (II.11) pour les deux modes. Les courbes des deux évoluent globalement avec la même allure pour les deux modes. Conformément aux courbes de dispersion (fig .II.2.a), la vitesse de groupe est maximum à la fréquence $\Omega = 0$, c'est-à-dire là où la pente de la courbe de dispersion est maximum. Elle s'annule à la limite de zone quand la courbe de dispersion devient parallèle à l'axe φ_x .

Notons, d'autre part, que l'étendue de chacune des plages où la vitesse $V_g \neq 0$ se rapporte bien à celle des modes propageants. Ces résultats sont conformes à ceux obtenus par la bande passante (fig.II.5) et par les courbes de dispersion (fig.II.2). Notons enfin que les vitesses de groupe n'ont de sens que pour les intervalles de fréquences propageantes, c'est-à-dire quand le module du facteur de phase z est égal à l'unité, et nulle pour les autres valeurs.

La confirmation est donnée par les courbes des modules de Z en fonction de la fréquence représentées dans les figures II.10 et II.11.

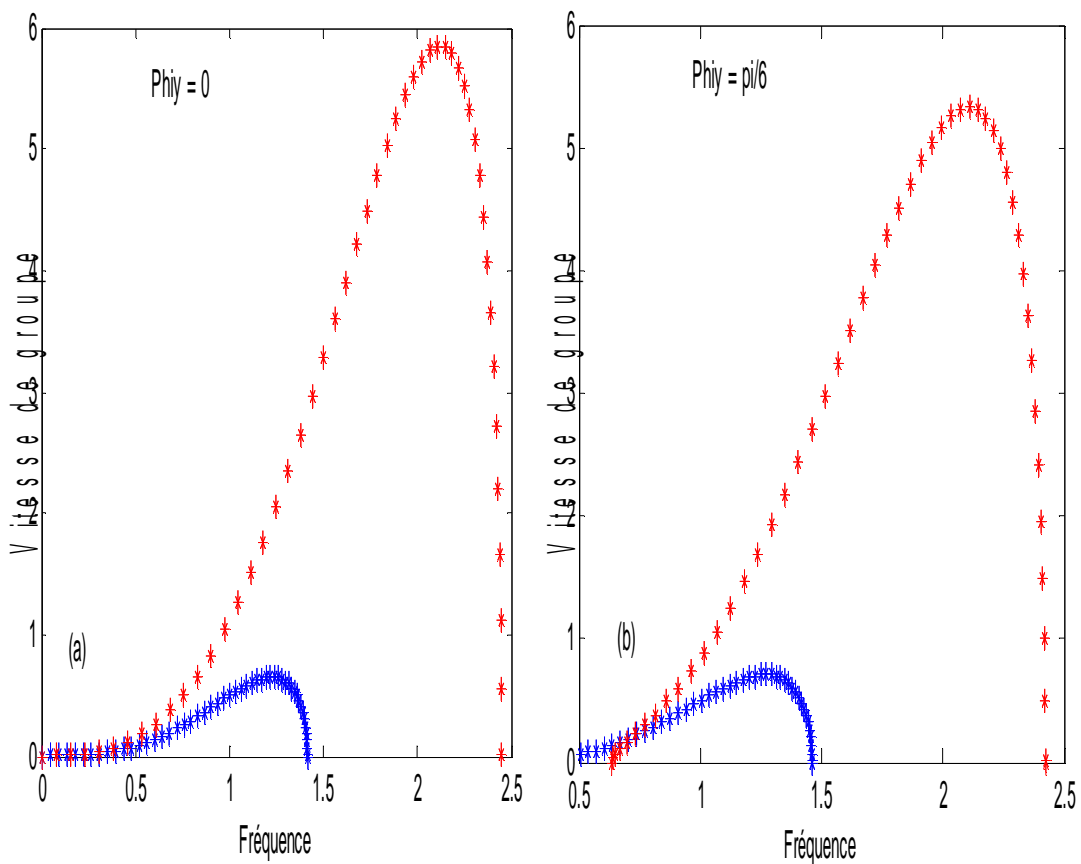


Figure II .11 : Vitesses de groupe pour $\varphi_y = 0$ et $\varphi_y = \pi /6$ des deux modes 1 et 2 en fonction de la fréquence Ω .

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié la dynamique vibrationnelle d'un guide d'onde parfait de type cubique simple 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, les facteurs de phase et les vitesses de groupe pour les différentes valeurs de φ_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 diffusion.

CHAPITRE III

Diffusion d'ondes élastiques par des défauts

INTRODUCTION

Les études concernant les systèmes de basses dimensions sont un domaine de recherche en pleine expansion sur le double plan théorique et expérimental, ainsi des chercheurs s'investissent davantage dans ce domaine. Il y a essentiellement deux motivations principales pour l'intérêt accordé à ces systèmes mésoscopiques désordonnés, la première est leurs applications de plus en plus croissante et nombreuses comme composants dans la technologie de pointe : la micro-électronique, l'aéronautique et l'optoélectronique. La seconde est le développement des formalismes appropriés pour décrire l'effet des défauts sur les propriétés de localisation et de diffusion [24].

Actuellement, pour décrire l'impact des défauts de structure sur les propriétés de localisation et de diffusion, plusieurs méthodes théoriques et expérimentales [25] sont proposées.

Le présent chapitre est consacré à l'étude de l'effet d'un défaut sur les propriétés de diffusion d'ondes élastiques dans les systèmes de basses dimensions. Cette étude sera menée dans le cadre de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins [24].

La méthode de calcul utilisée 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 de basses dimensions. En étudiant le phénomène de diffusion d'ondes élastiques [25,27].

La méthode de raccordement sera appliquée sur les trois types de défauts, dont le premier cas est un défaut résultant de la juxtaposition de deux structures cubique simple de masses différentes M_1 et M_2 respectivement. Le deuxième cas est une chaîne d'atome de masses M_2 inséré dans un plan de structure cubique simple de masse M_1 dans une direction cartésienne. Le troisième cas ressemble au deuxième cas mais on ajoutant une autre chaîne d'atomes.

III.1 Description des modèles

III.1.1 Le premier cas : diffusion d'ondes élastiques par 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 de masses M_1 et M_2 respectivement, qui sont reliés l'un à l'autre par des constantes additionnelles. Le système est représenté dans la (figure.3.1).

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. Une région de défaut avec des atomes M_1 (couleur move) et M_2 (couleur rouge), de deux régions de volume à gauche et à droite de la région de défaut avec des atomes M_1 (à gauche) et M_2 (à droite) suffisamment éloignée du défaut ayant les propriétés du système semi-infini, qui représentent les zones parfaites. Enfin, il y a deux régions de raccordement qui sont définies par les sites atomiques intermédiaires entre la région de défaut et la région de volume. L'étude dynamique de volume pour le système parfait a été faite au chapitre 2. Notre étude est réalisée dans le cadre de l'approximation harmonique limité aux premiers et seconds voisins.

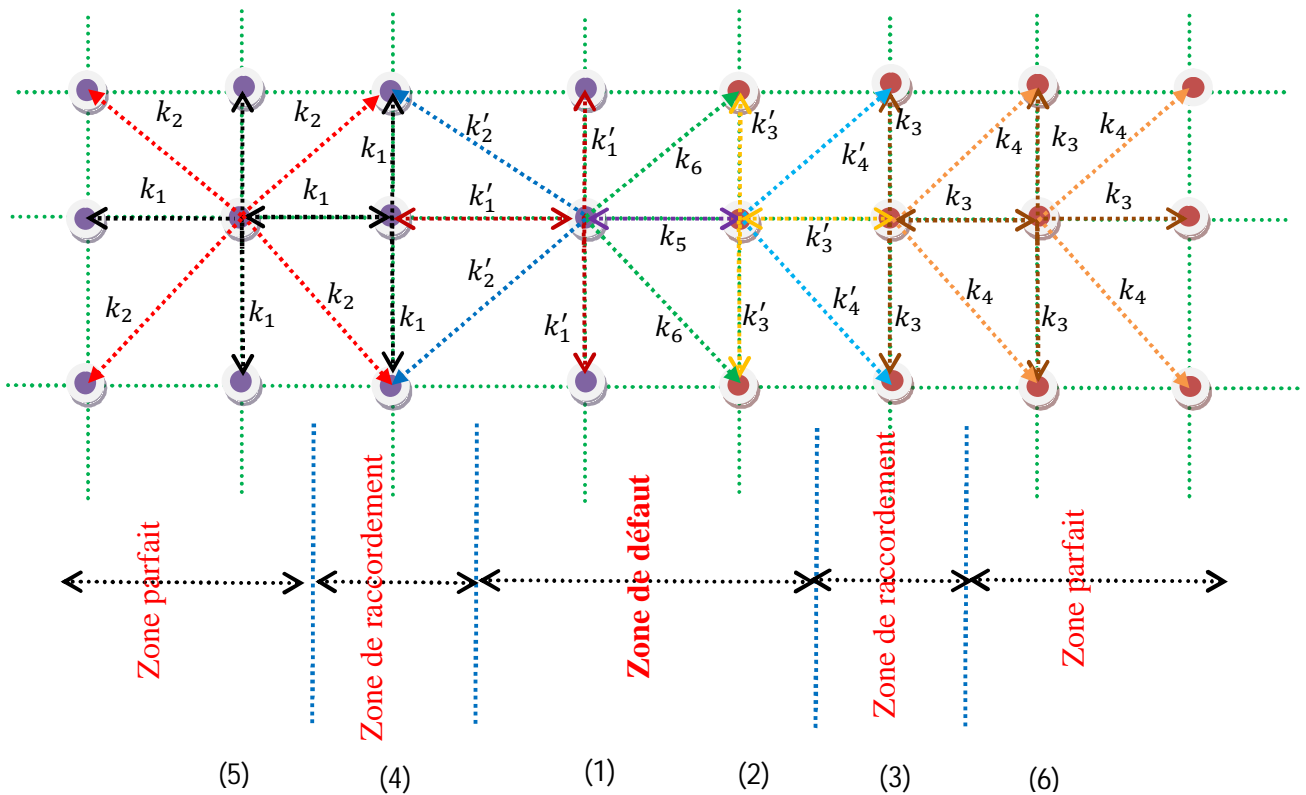


Figure III.1 : Schéma d'un modèle d'un système interface

III.1.2 Le deuxième cas : diffusion d'ondes élastiques par un défaut étendu

Le deuxième système à étudier est un réseau cristallin plan formé d'atomes de masses M_1 qui peuvent se déplacer dans deux directions, et dans lequel on insère une chaîne d'atomes de masses M_2 parallèle à l'axe Oy qui divise ce plan en deux plans semi-infinis. La figure.3.2 schématise le modèle sur laquelle sont représentées les différentes régions d'étude composant le système (les mêmes régions dans le premier cas).

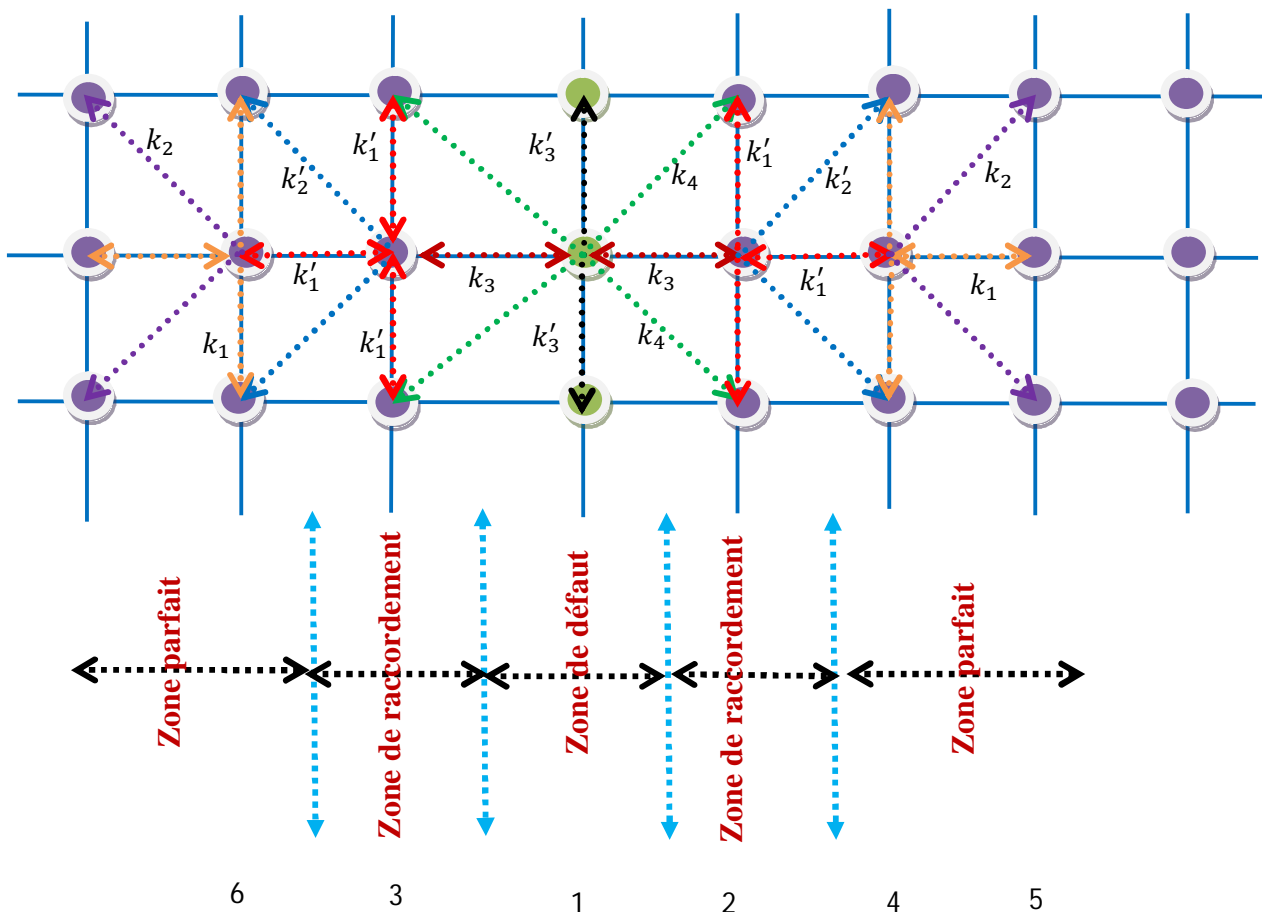


Figure III.2 : Schéma d'un modèle par un défaut étendu

III.1.3 Le troisième cas : diffusion d'ondes élastiques par une chaîne diatomique

Le troisième modèle est un réseau cristallin plan formé d'atomes de masses M_1 qui peuvent se déplacer dans deux directions cartésiennes dans lequel on insère une double chaîne adjacentes d'atomes de masses M_2 parallèle à l'axe Oy qui divise ce plan en deux plans semi-infinis, les distances entre les masses des deux chaînes adjacentes sont considérées égales

suivant les deux directions cartésiennes x et y du plan. Le modèle est représenté sur Figure III.3

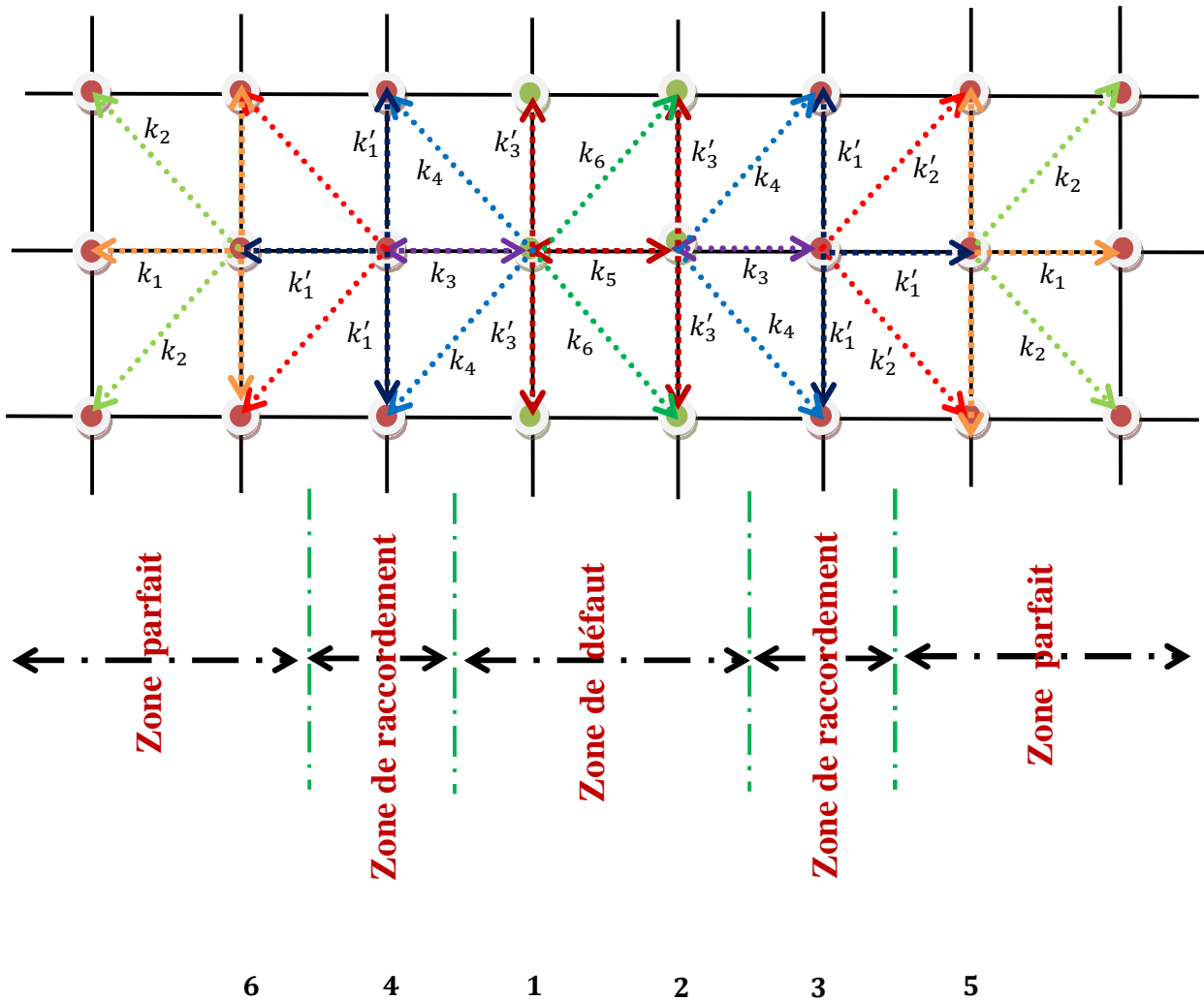


Figure III.3 : Schéma d'un modèle par une chaîne diatomique

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

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

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

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

III.2 Matrice dynamique du système

La matrice dynamique D des différents systèmes, trouve son origine dans l'écriture des équations du mouvement des atomes de 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 D est une matrice rectangulaire D formée de n lignes et m colonnes. Elle contient plus d'inconnues que d'équations. Elle peut se s'écrire sous forme :

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

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 :

i. Premier cas :

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

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

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

ii. Deuxième cas :

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

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

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

iii. Troisième cas :

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

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

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

III.3 Matrice de raccordement

L'objectif de cette partie, dans le cadre de notre modèle, est d'établir les relations de raccordement entre les déplacements vibrationnels des atomes appartenant au domaine de défaut et les champs vibrationnels des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits. La connaissance simultanée des facteurs de phase ($z, 1/z$), déterminés à partir de la matrice dynamique en volume (système parfait), 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 $\{T\}$, 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 ces déplacements vibrationnels de la manière suivante [20,1, 2] :

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

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

$$u_{\alpha}(n, m, k) = \sum_{v'=1}^4 [Z(v')]^{-l} T p(\alpha, v') \quad \text{pour } l > 1 \quad (\text{III } 6)$$

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

Le vecteur $|u\rangle$ des déplacements atomiques des sites de la maille élémentaire de la zone de défaut (voir les figures (3.1, 3.2, 3.3) peut se décomposer en deux parties :

La première est la partie irréductible notée $|irr\rangle$, elle est constituée par les amplitudes de vibration des n vecteurs de déplacement irréductibles formant la région du défaut. Quant à la seconde est la partie de raccordement, qui est notée $|rac\rangle$, elle est formée par les amplitudes de vibration associées aux m vecteurs de déplacement raccordés, ceci pour les deux bases $|R\rangle$ et $|T\rangle$. Ainsi, on écrit [25-22, 11] :

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

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

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

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

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 :

$$R_1 = \begin{bmatrix} z(1,1).p(1,1) & z(1,2).p(1,2) \\ z(2,1).p(2,1) & z(2,2).p(2,2) \end{bmatrix} \quad R_2 = \begin{bmatrix} z(1,1).p'(1,1) & z(1,2).p'(1,2) \\ z(2,1).p'(2,1) & z(2,2).p'(2,2) \end{bmatrix}$$

$$R_3 = \begin{bmatrix} z^2(1,1).p(1,1) & z^2(1,2).p(1,2) \\ z^2(2,1).p(2,1) & z^2(2,2).p(2,2) \end{bmatrix} \quad R_4 = \begin{bmatrix} z^2(1,1).p'(1,1) & z^2(1,2).p'(1,2) \\ z^2(2,1).p'(2,1) & z^2(2,2).p'(2,2) \end{bmatrix}$$

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 de la

matrice de raccordement D_R comme suit :

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

Avec :

$$\dim [D_R] = (m \times n) \quad (\text{III } 11)$$

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

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

Soit :

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

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

i. Premier cas :

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

Dimensions de chacune des matrices R_1, R_2, R_3 et R_4 sont (2×2)

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

ii. Deuxième cas :

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

Dimensions de chacune des matrices R_1, R_2, R_3 et R_4 sont (2×2)

$$\dim [D_s] = (18 \times 18)$$

iii. Troisième cas :

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

Dimensions de chacune des matrices R_1, R_2, R_3 et R_4 sont (2×2)

$$\dim [D_s] = (14 \times 14)$$

III.4 Etude de la diffusion

Considérons le cas d'un mode propageant i ($|Z_i = 1|$) provenant du guide d'ondes parfait gauche (G) et allant vers le guide d'ondes parfait droit (D) en passant par la zone perturbée. L'onde résultante diffusée par le défaut se décompose en deux parties ; l'une est transmise au système semi-infini du côté droit, l'autre est réfléchie sur le système semi-infini du côté gauche, ce qui donne naissance à un champ vibrationnel de déplacement dans les deux demi – espaces.

La composante cartésienne α du champ de déplacements d'un atome situé en dehors de la région de défaut (E) peut être exprimée en utilisant la méthode de raccordement [31-32, 30]. Les déplacements atomiques dans les trois directions cartésiennes d'un site atomique appartenant à la structure (G) du côté gauche peuvent s'exprimer comme la superposition de l'onde incidente avec les modes propres de vibration du guide d'ondes parfait gauche à la même fréquence :

$$u'_\alpha(n, m, k) = [Z(\bar{\nu})]^n \cdot p(\alpha, i') + \sum_i R_{ii'} \cdot [Z(\nu)]^{-n} \cdot \bar{p}(\alpha,) \quad \text{avec } n < 0 \quad (\text{III 14})$$

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

$$u_\alpha(n, m, k) = \sum_i T_{ij} \cdot [Z(\nu)]^{+n} \cdot \bar{p}(\alpha,) \quad \text{avec } n > 0 \quad (\text{III 15})$$

La quantité $R_{ii'}$, comme nous le verrons plus loin est à relier avec les coefficients de réflexion d'un mode incident i selon les modes $i = 1 \dots 2$ du système parfait (G) pour une fréquence donnée. De même, la quantité T_{ij} est associée avec les coefficients de transmissions du mode incident i selon les modes propres $j = 1 \dots 2$ à droit (D). Les coefficients $(\alpha,)$ et $p'(\alpha,)$ représentent les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres des matrices de volume [24].

Les coefficients de réflexion et de transmission R et T sont respectivement calculés pour un mode propageant i , sachant que i et j décrivent des modes qui peuvent être propageant ou évanescents dans la fenêtre des fréquences dans laquelle i est propageant [20]. Comme nous l'avons signalé auparavant, les quantités $T_{v\bar{v}}$ et $R_{v\bar{v}}$ introduites dans les équations précédentes, permettent d'obtenir toutes les grandeurs intéressantes [33-34]. Parmi ces grandeurs, on peut citer les coefficients de réflexions et de transmission.

III.4.1 Calcul des coefficients de transmission et de réflexion

Les coefficients de réflexion et de transmission $r_{ii'}$ et t_{ij} sont respectivement calculés pour un mode propageant, sachant que i' et j décrivent des modes qui peuvent être propageant ou évanescents dans la fenêtre des fréquences dans laquelle i est propageant [24].

Soit $|RT\rangle$ le vecteur de base pour les coefficients de réflexion et de transmission et $|irr\rangle$ le vecteur formé par les déplacements atomiques des sites irréductibles de la région de défaut. En utilisant les équations (III 12) et (III 13), on peut alors, écrire les équations de mouvements des atomes formant le défaut, et obtenir un système [26] d'équations inhomogènes de la forme suivante :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [D_R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} + |IH\rangle \quad (\text{III 16})$$

Où le vecteur $|IH\rangle$ regroupe les termes inhomogènes décrivant l'onde incidente.

En multipliant l'équation(III.16) par la matrice $[D]$ on obtient alors :

$$[D] |u\rangle = [D] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [D] [D_R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} + [D] |IH\rangle \quad (\text{III 17})$$

Ce qui peut se résumer à :

$$[D] [D_R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [S] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} = - [D] |IH\rangle \quad (\text{III 18})$$

Ou encore

$$\begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} = - [S]^{-1} [D] |IH\rangle \quad (\text{III 19})$$

La solution du système d'équations (III 19) prend compte des déplacements atomiques $|irr\rangle$ de la région de défaut ainsi que des grandeurs $R_{ii'}$ et T_{ij} pour une fréquence incidente Ω . Les coefficients de réflexion $r_{ii'}$ et de transmission t_{ij} peuvent alors être calculées en prenant soin de les normaliser à l'aide des vitesses de groupes, qui assurent la conservation de l'énergie et l'unitarité de la somme des parties réfléchies et transmises [36].

Plus précisément, pour des ondes provenant du côté gauche du défaut selon le mode propre i , le coefficient de réflexion est donné par :

$$r_{ii'} = \frac{v_{i'}}{v_i} |R_{ii'}|^2 \quad (\text{III 20})$$

Et le coefficient de transmission par :

$$t_{ij} = \frac{v_j}{v_i} |T_{ij}|^2 \quad (\text{III 21})$$

Notons que v_i , qui représente la vitesse de groupe du mode propre i , elle est nulle pour les modes évanescents de deux guides d'ondes parfaits. En effet, les modes évanescents sont nécessaires pour une description totale de la dynamique vibrationnelle et pour la diffusion d'ondes cristallographiques bien qu'ils ne contribuent pas au transport énergétique.

Nous pouvons également définir les probabilités de réflexion et de transmission pour un mode propre i donné à la fréquence de diffusion Ω à l'aide des expressions suivantes [34].

$$r_i = \sum_{i'} r_{ii'} \quad (\text{III 22})$$

$$t_j = \sum_j t_{ij} \quad (\text{III 23})$$

La relation d'unitarité, qui veut que la somme des transmissions et des réflexions soit égale à 1 est alors décrite par la relation suivante :

$$S = \sum_i (t_i + r_i) = 1 \quad (\text{III 24})$$

Nous avons systématiquement exploité cette relation pour contrôler nos calculs lors de la simulation.

III.4.2 Calcul de la conductance phononique

Afin de décrire la transmission globale des ondes vibrationnelles par un défaut, il est aussi utile de définir par analogie avec la conductance électronique qui est liée aux phénomènes de diffusion [10], la conductance phononique d'un défaut pour une fréquence σ donnée [6]. Cette conductance notée (Ω) est notamment définie pour une propagation depuis le double plan côté gauche vers le double plan côté droit :

$$(\sigma) = \sum_{ij} t_{ij} \quad (\text{III 25})$$

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

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

La présence du défaut crée donc un écart entre le σ idéal et sa valeur provenant des processus de diffusion élastique sur les défauts, cet écart donne une mesure de la réflexion. La conductance σ permet de regrouper les contributions de tous les modes en une seule courbe, mais elle présente l'inconvénient de perdre toute information sur l'origine détaillée par mode.

En ce sens, il ya perte d'information par rapport aux coefficients [24] de transmission individuels.

III.5 Résultats et discussions

Pour chaque défaut, nous avons analysé la diffusion d'ondes de phonons via les zones contenant les trois inhomogénéités citées, et cela relativement à une onde incidente venant de la gauche des figures (III.1, III.2, III.3), avec une amplitude unité et un déphasage nul $\varphi_y = 0$ pour une valeur fixe de $r = 0.7$. L'analyse a été faite dans les trois cas probables de l'environnement physique dans les zones perturbées. Nous avons choisi les valeurs suivantes : $\lambda = 0.5$ (adoucissement), $\lambda = 1.5$ (durcissement), $\lambda = 1$ (les constantes de forces sont identiques partout où cas homogène), pour les trois systèmes.

Nous avons aussi analysé l'effet de la variation de rapport de masse des atomes de défaut à celle de réseau parfait en prenant les valeurs suivantes : $e = 0.5$ (défaut léger), $e = 1$ (masses identiques), $e = 1.5$ (défaut lourd). Les figures (III.4.1-4, III.5.1-4, III.6.1-4) représentent les résultats numériques obtenus pour les coefficients de réflexion et de transmission en fonction de la fréquence normalisée Ω pour les trois systèmes cités sur les figures (III.1), (III.2) et (III.3), et ce pour les deux modes 1 et 2.

De façon générale, la présence de défaut donne lieu à un décroissement de la probabilité de transmission et un accroissement de la probabilité de réflexion, et la forme de ces courbes sont relativement compliquées. Nous pouvons identifier la structure caractéristique de quelques résonances de Fano, résultant d'un couplage cohérent entre les états localisés de défaut et des modes propageants du guide d'onde, ainsi que de nombreuses oscillations de Fabry-Pérot dans les spectres de transmission des deux modes transversal et longitudinal, issues des interférences entre les multitudes ondes diffusées.

Néanmoins, les spectres de transmissions obtenus sont représentatifs et illustrent, de ce fait, le comportement typique d'un guide d'onde plan perturbé par des défauts. La présence de défaut engendre une augmentation de résistance au passage de l'onde.

Pour des fréquences de vibration Ω voisines de zéro, le coefficient de transmission $t \rightarrow 1$ indépendamment de la perturbation. En effet, l'énergie de propagation est insuffisante pour exciter les atomes perturbateurs, tout se passe comme si le défaut n'existait pas. Cependant, vers les hautes fréquences où l'énergie de propagation est élevée, les atomes de

défaut sont excités et la probabilité de transmission est fortement affectée. Elle diminue de façon appréciable pour devenir nulle à la limite de zone.

Dans les paragraphes suivants, nous nous concentrons sur la variation de λ en considérant toujours $\lambda = 0.5$ (adoucissement) $\lambda = 1$ (cas homogène) et $\lambda = 1.5$ (durcissement).

L'adoucissement ($\lambda = 0.5$) ou le durcissement ($\lambda = 1.5$) des constantes de force de réseau parfait intervient directement entre les atomes des sites (0,0), (1,0), (-1,0), (1,1), (-1,1), (1,-1), (-1,-1), (0,1) et (0,-1) du réseau cristallin afin de préserver l'harmonie du guide d'onde par rapport aux directions ox et oy .

L'évolution des spectres de transmission du mode longitudinal et transversal est reportée sur les figures (III.4-6.III-4) pour le cas des trois valeurs différentes de λ . Ils montrent des changements notables lorsque λ augmente. En effet, les ressorts se trouvent dans un plan parallèle et perpendiculaire à la direction de propagation de ces modes, par conséquent ils peuvent les affecter de manière perceptible.

La présence de défaut engendre toujours une augmentation de résistance au passage de l'onde dans le guide. Une conséquence frappante de cette opposition à la traversée de l'onde par le défaut se traduit par la manifestation de nombreuses oscillations de Fabry-Pérot et de résonances de structures additionnelles dans le spectre de transmission des deux modes transversal et longitudinal. Ces structures additionnelles sont dues au couplage entre les modes propageants de guide et les états localisés induits par le défaut qui peuvent être comprises comme des résonances de Fano, et les interférences entre les ondes incidentes et réfléchies provoquent des perturbations qui se traduisent par des oscillations qui peuvent s'identifier à celles de Fabry-Pérot. Nous remarquons que le nombre d'oscillateur observé diminue et les bandes de résonance s'élargissent lorsque la valeur de λ augmente,

Notons aussi que l'ensemble de ces résonances se déplace vers les hautes fréquences quand λ augmente. Ce résultat est conforme à la relation qui stipule qu'à une constante élevée correspond une fréquence élevée. Un résultat bien connu de mécanique élémentaire qui indique que la fréquence propre d'un oscillateur harmonique est lié à sa constante k par

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

La variation de la masse des atomes de défaut joue un rôle important dans la diffusion d'ondes vibratoires. En effet, ces états dépendent de la valeur de cette masse et par conséquent les spectres caractéristiques sont affectés. Ainsi, nous avons étudié la transmission et la réflexion du défaut pour différentes masses des atomes de défaut notées M_2 .

Les figures (III.4-6.1-2) montrent les résultats numériques obtenus pour les coefficients de transmission et de réflexion des modes longitudinal et transversal pour une variation de rapport de masse $e = M_2/M_1$. Les spectres sont calculés pour un défaut légère ($e = 0.5$) et un défaut lourd ($e = 1.5$).

D'après ces résultats, les coefficients de transmission et de réflexion des modes longitudinal et transversal sont très sensible à la variation de rapport de masse e . Nous remarquons que les pics de résonance se déplacent vers les basses fréquences lorsque la masse de l'atome de défaut augmente. En effet, en se référant à la définition de la fréquence ω d'un oscillateur harmonique, donnée par la relation précédente, on constate qu'une masse faible correspond bien à une fréquence élevée.

Parallèlement, nous relevons un comportement résonant des deux modes longitudinal et transversal. Quand la masse de défaut augmente, les positions des résonances se déplacent vers les basses fréquences et l'apparition d'autres résonances. Ceci est la conséquence de la diminution de la fréquence des modes localisés induit par le défaut. Par conséquent, les masses élevées s'opposent à la transmission des ondes.

Comme attendu, l'influence du défaut est moins importante en régime acoustique pour les différentes masses des défauts dans les deux modes propres incidents, transversal et longitudinal. En effet, l'énergie de propagation est insuffisante pour exciter les atomes perturbateurs, tout se passe comme si le défaut n'existait pas. Cependant, vers les hautes fréquences où l'énergie de propagation est élevée, les atomes de défaut sont excités et la probabilité de transmission est fortement affectée. Elle diminue de façon appréciable pour devenir nulle à la limite de zone.

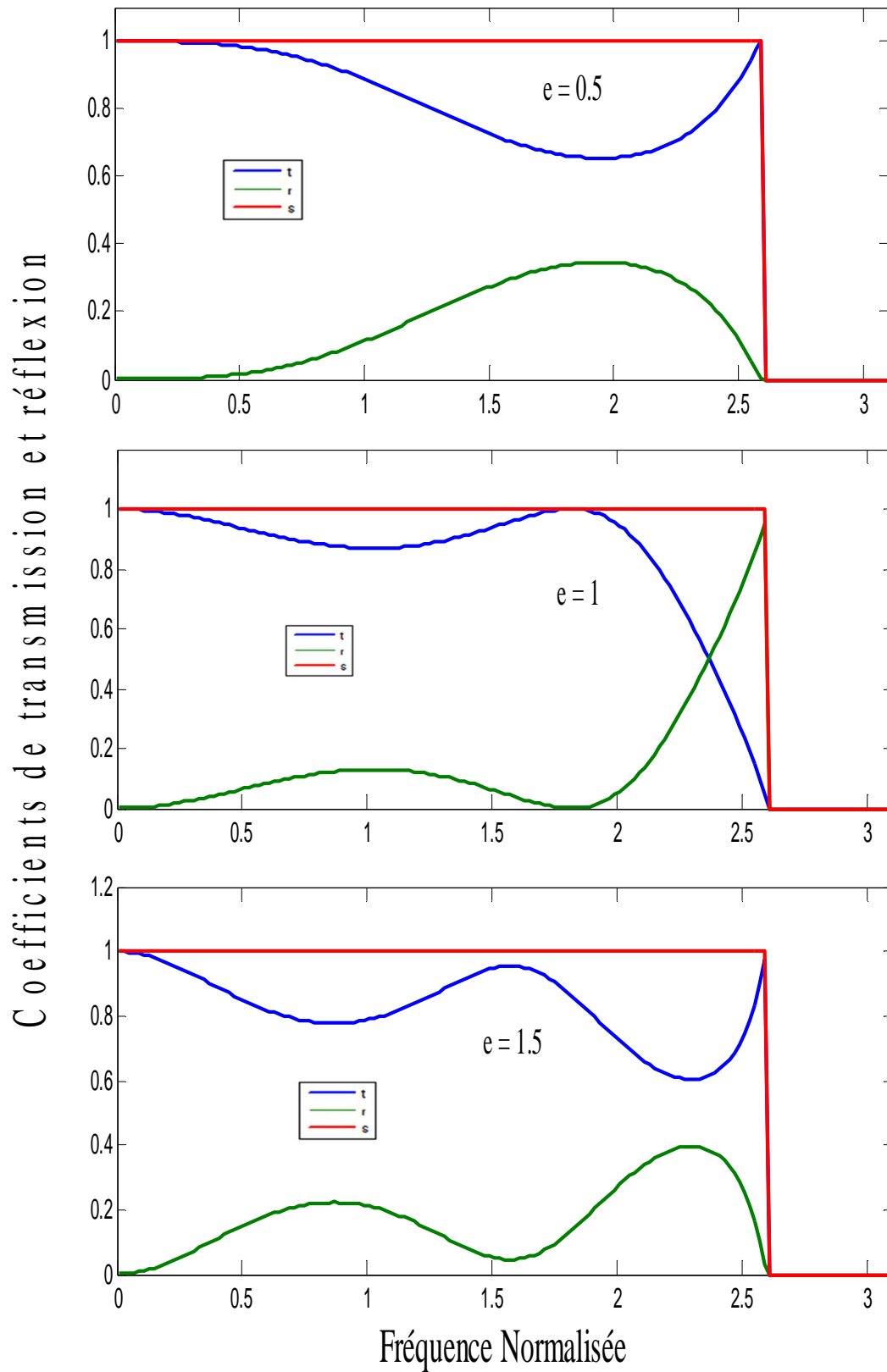


Figure III .4.1 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour différentes valeurs de e

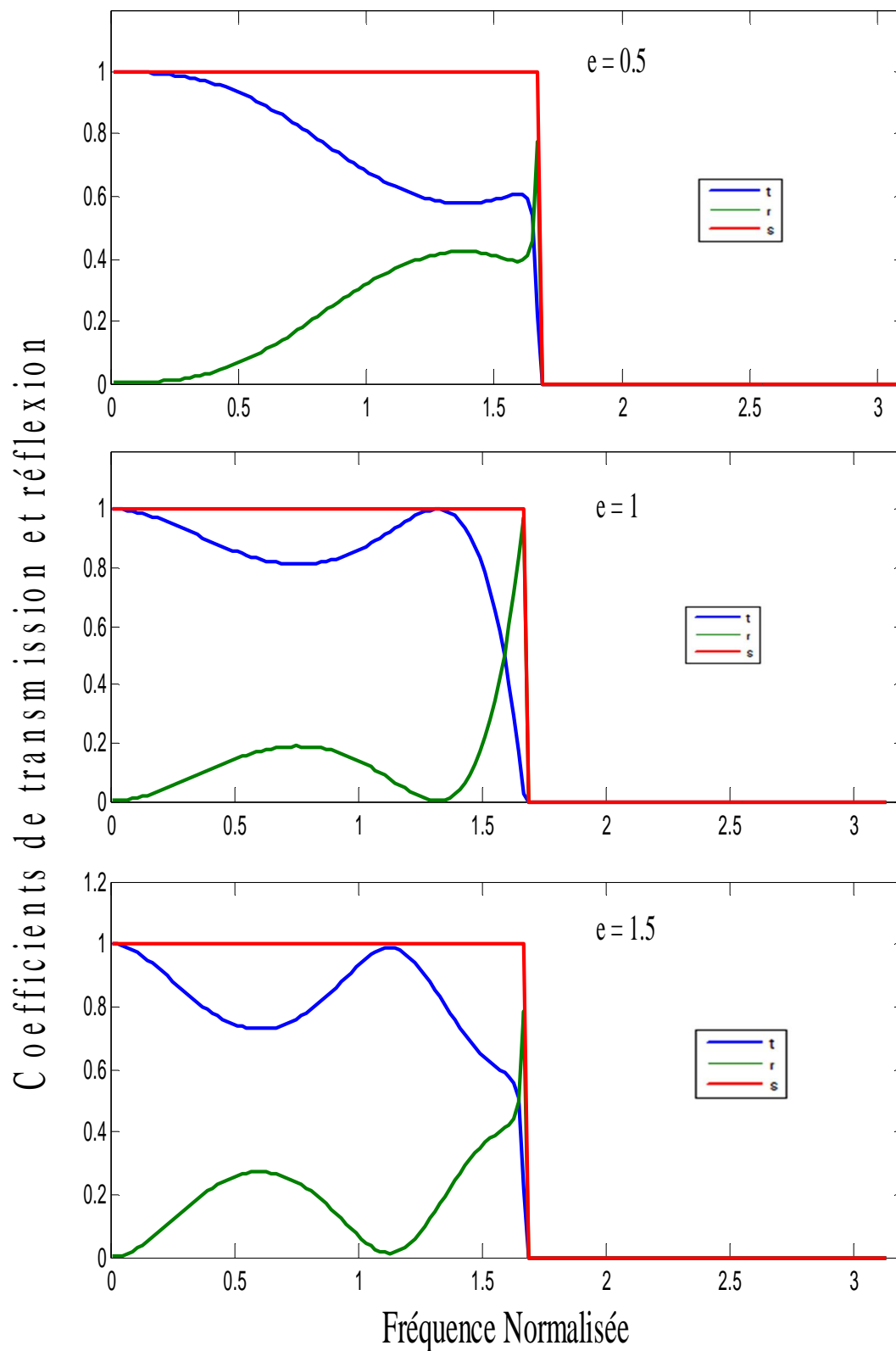


Figure III.4.2 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différentes valeurs de e

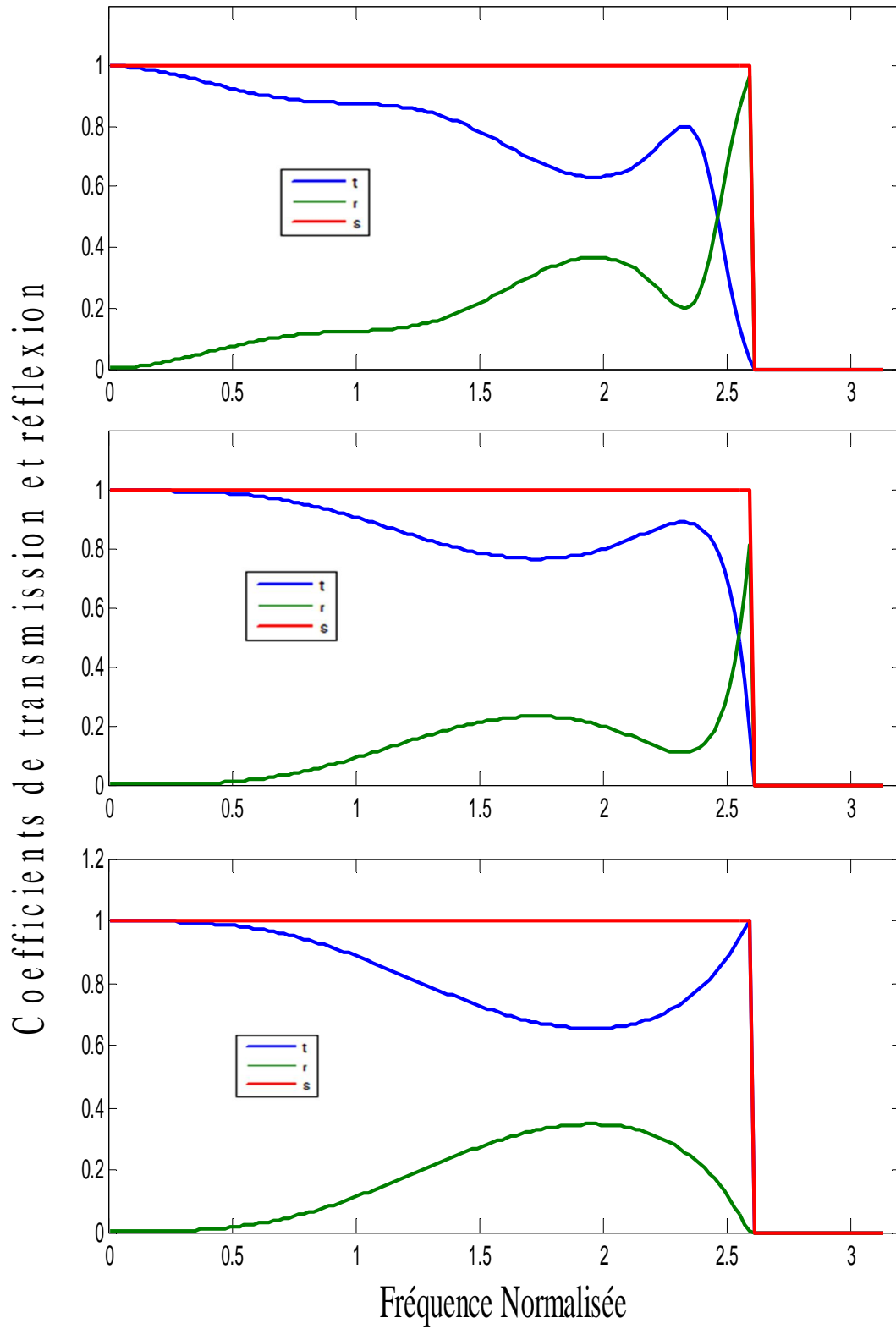


Figure III.4.3: Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour $\lambda = 0.5$, $\lambda = 1$, $\lambda = 1.5$ respectivement

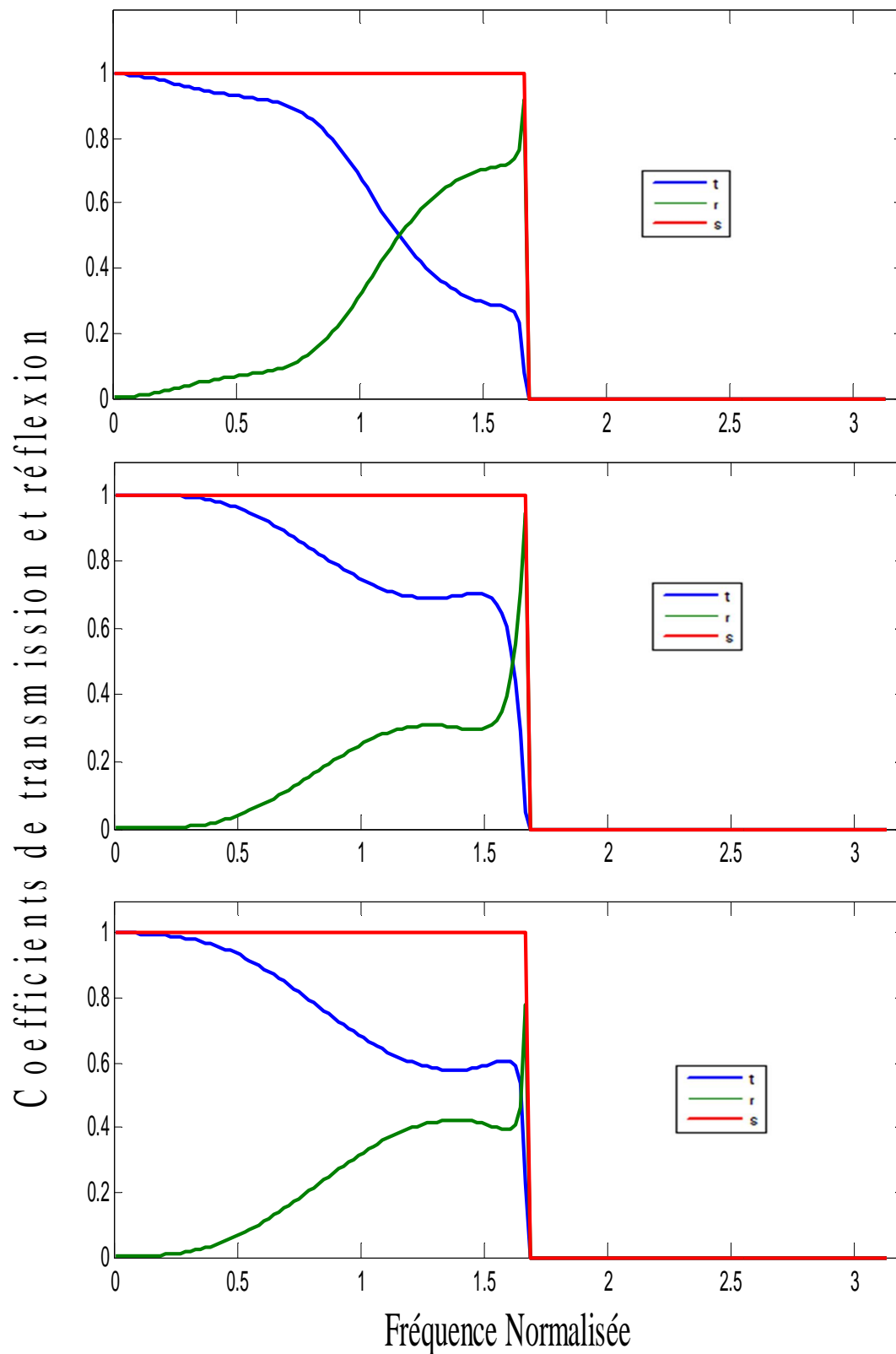


Figure III.4.4 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour $\lambda = 0.5$, $\lambda = 1$, $\lambda = 1.5$ respectivement

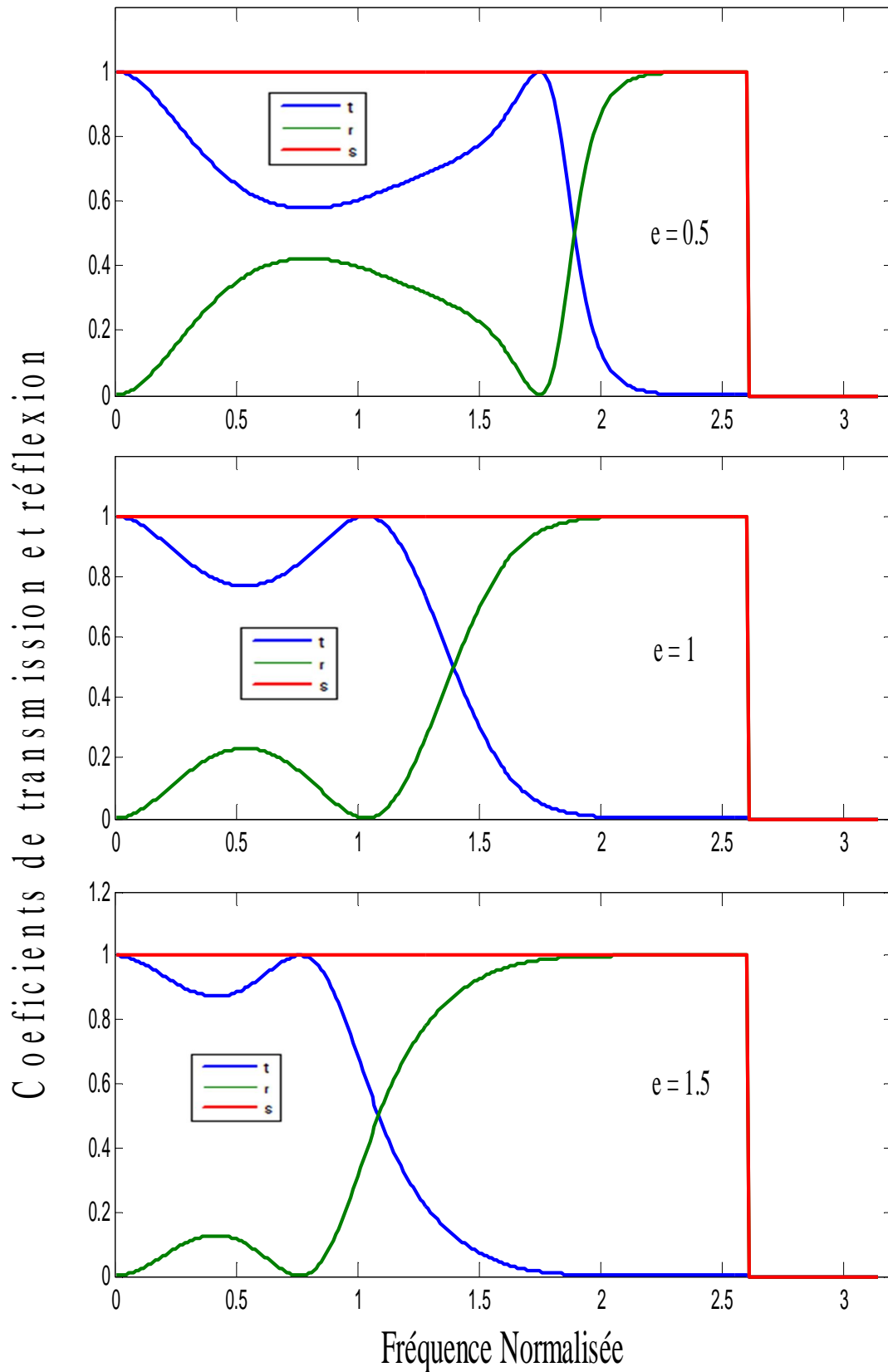


Figure III.5.1 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour les différents valeurs de e

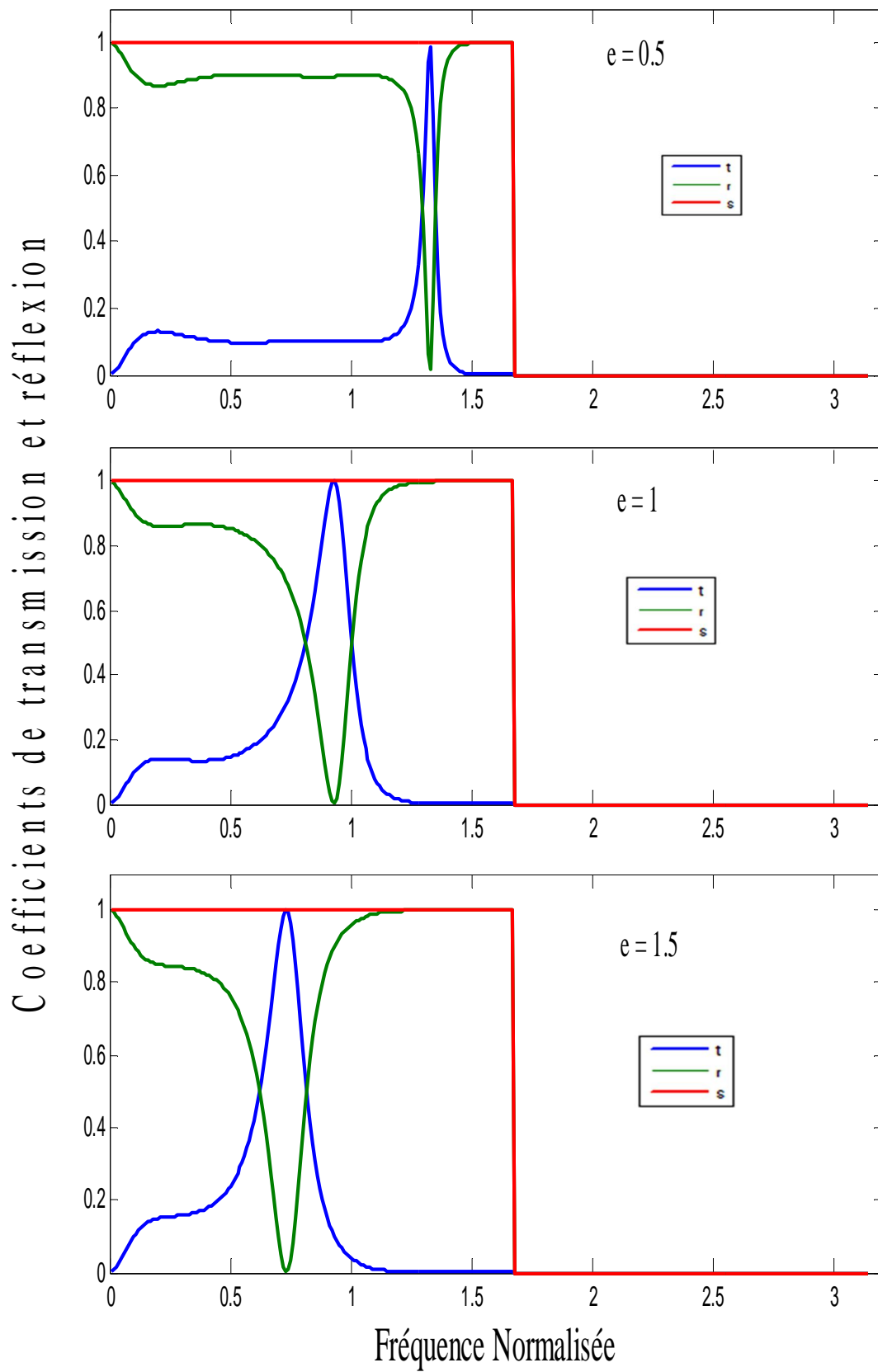


Figure III.5.2 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différents valeurs de e

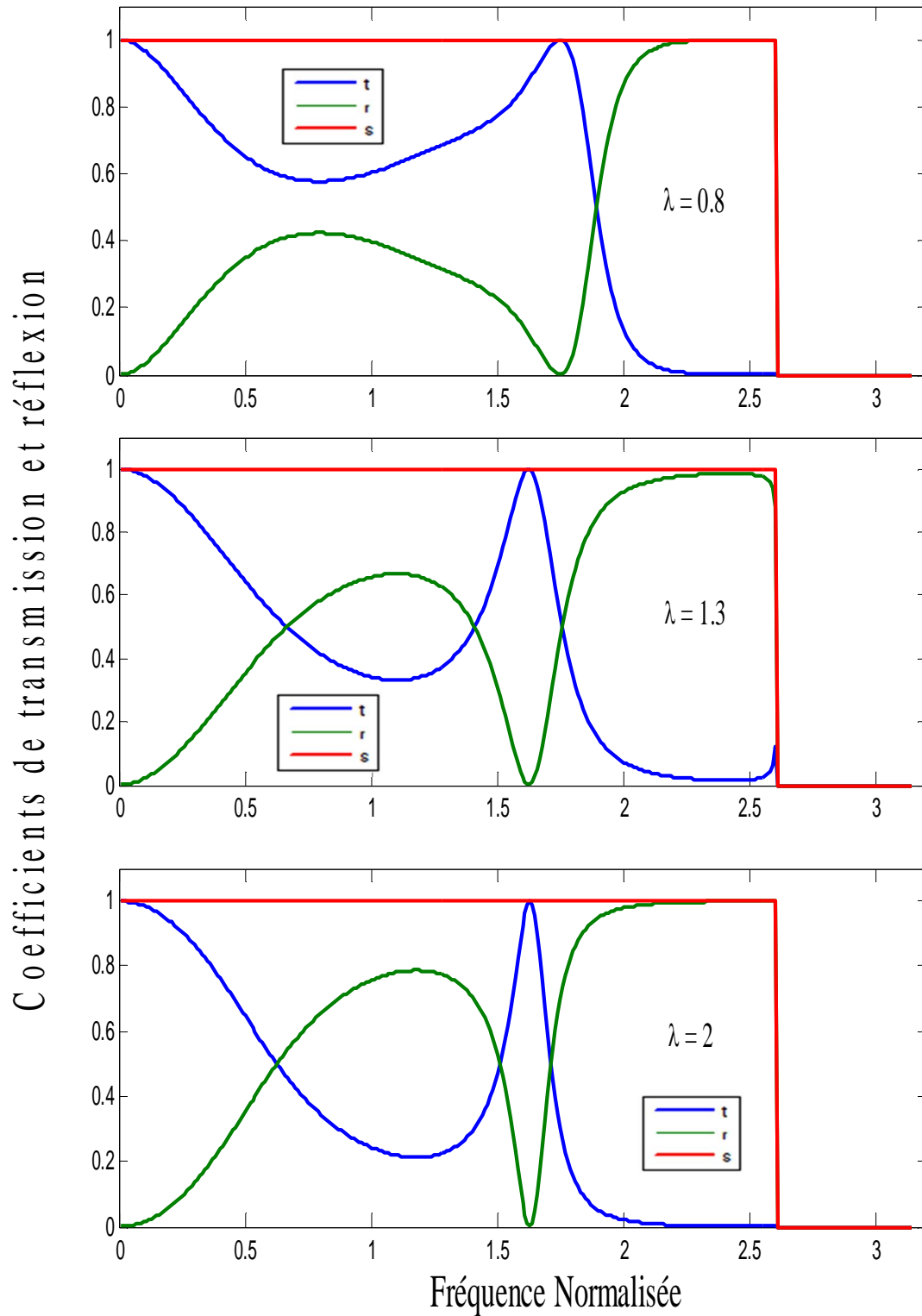


Figure III.5.3: Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour $\lambda = 0.8$, $\lambda = 1.3$, $\lambda = 2$ respectivement.

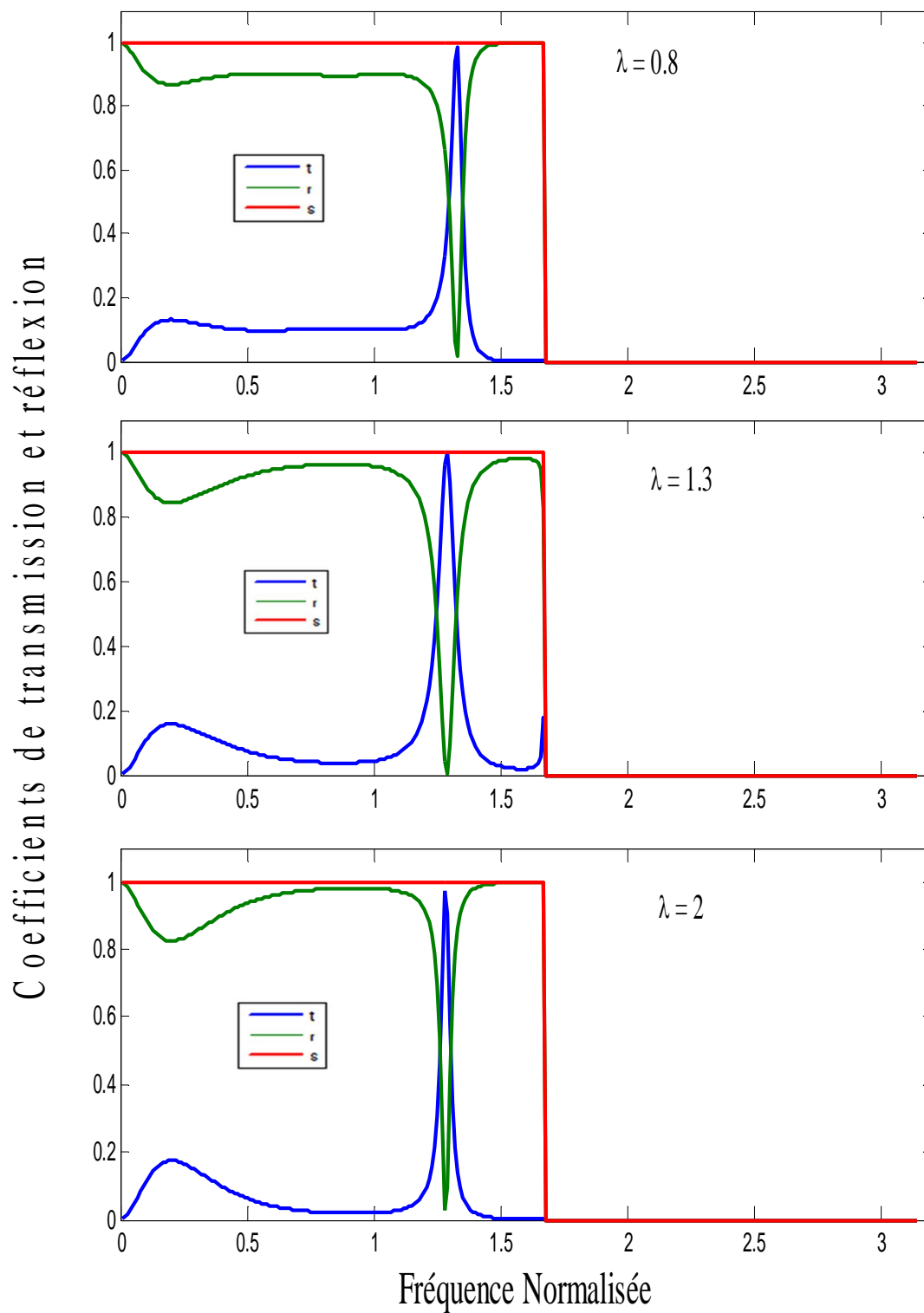


Figure III.5.4 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour $\lambda = 0.8$, $\lambda = 1.3$, $\lambda = 2$ respectivement.

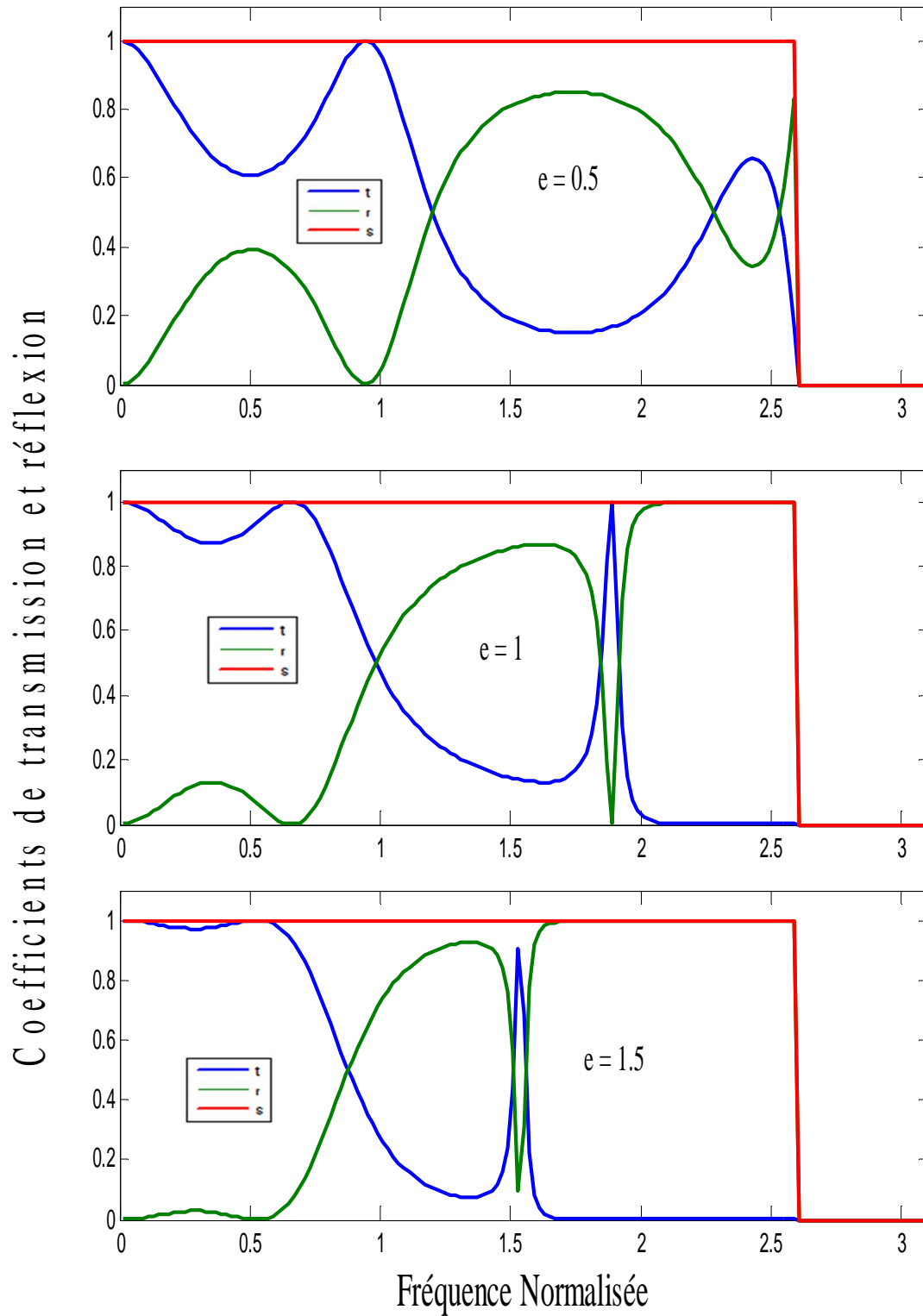


Figure III.6.1 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour les différents valeurs de e .

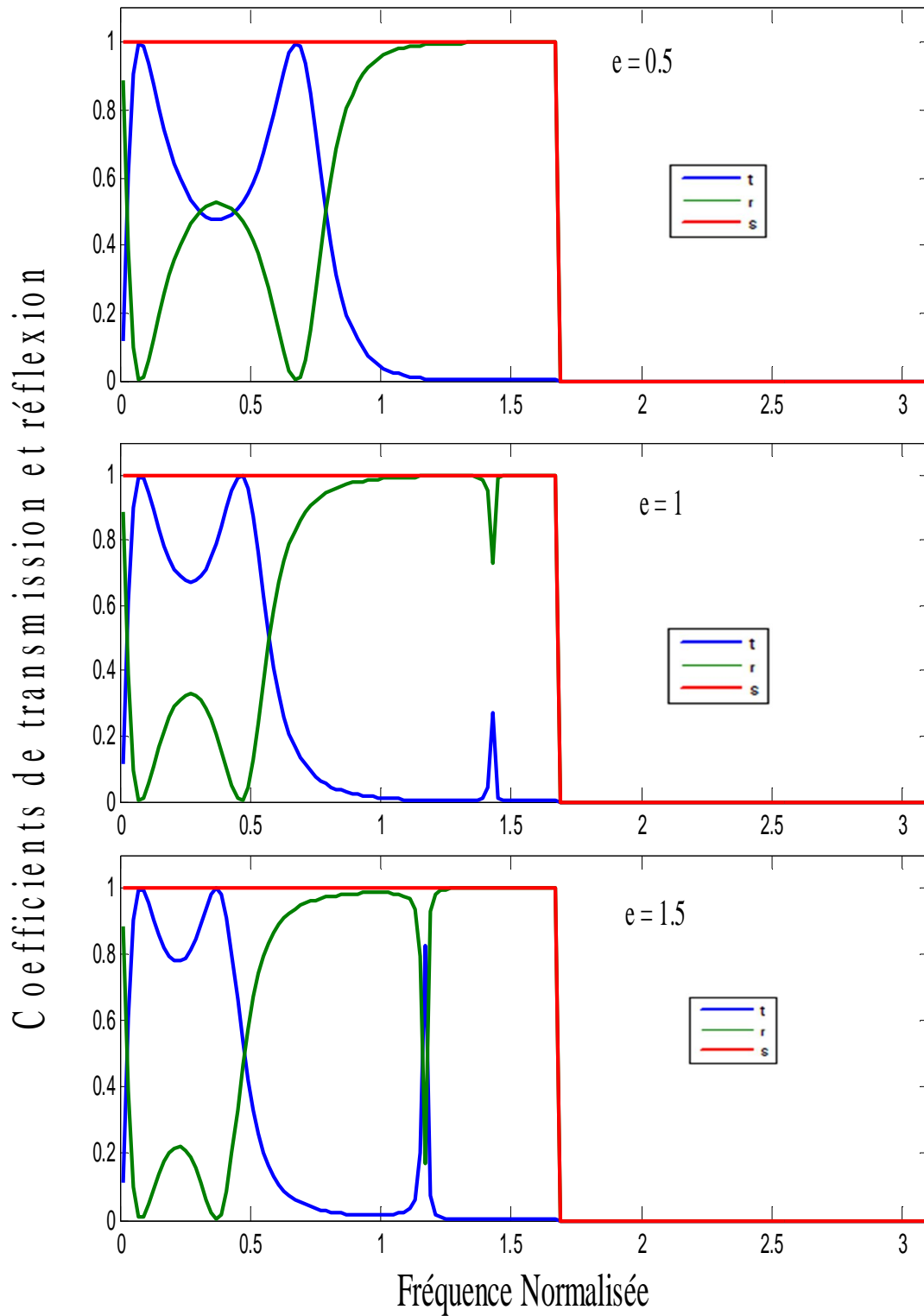


Figure III.6.2 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différents valeurs de e .

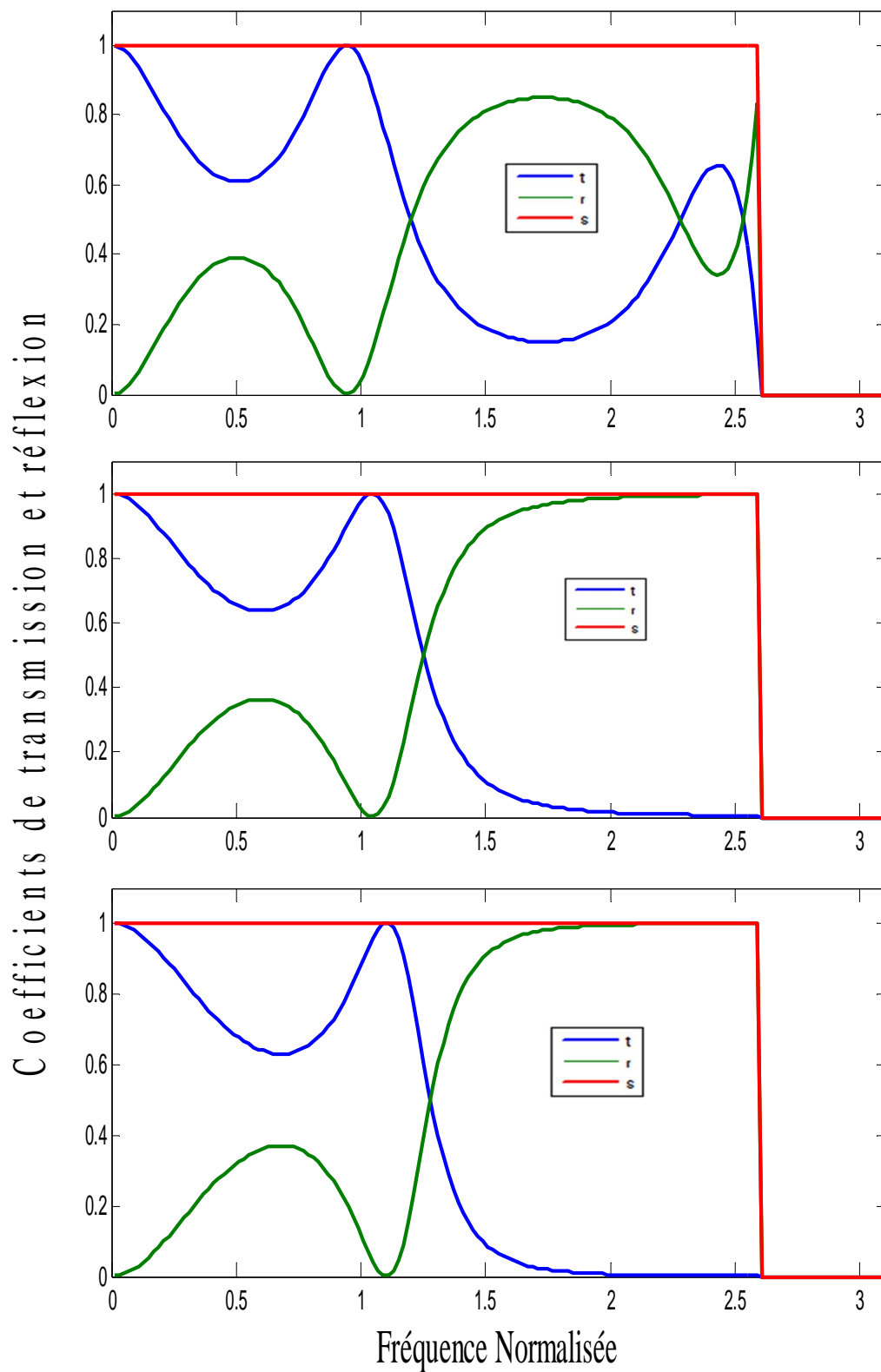


Figure III.6.3: Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour $\lambda = 0.5$, $\lambda = 1$, $\lambda = 1.5$ respectivement.

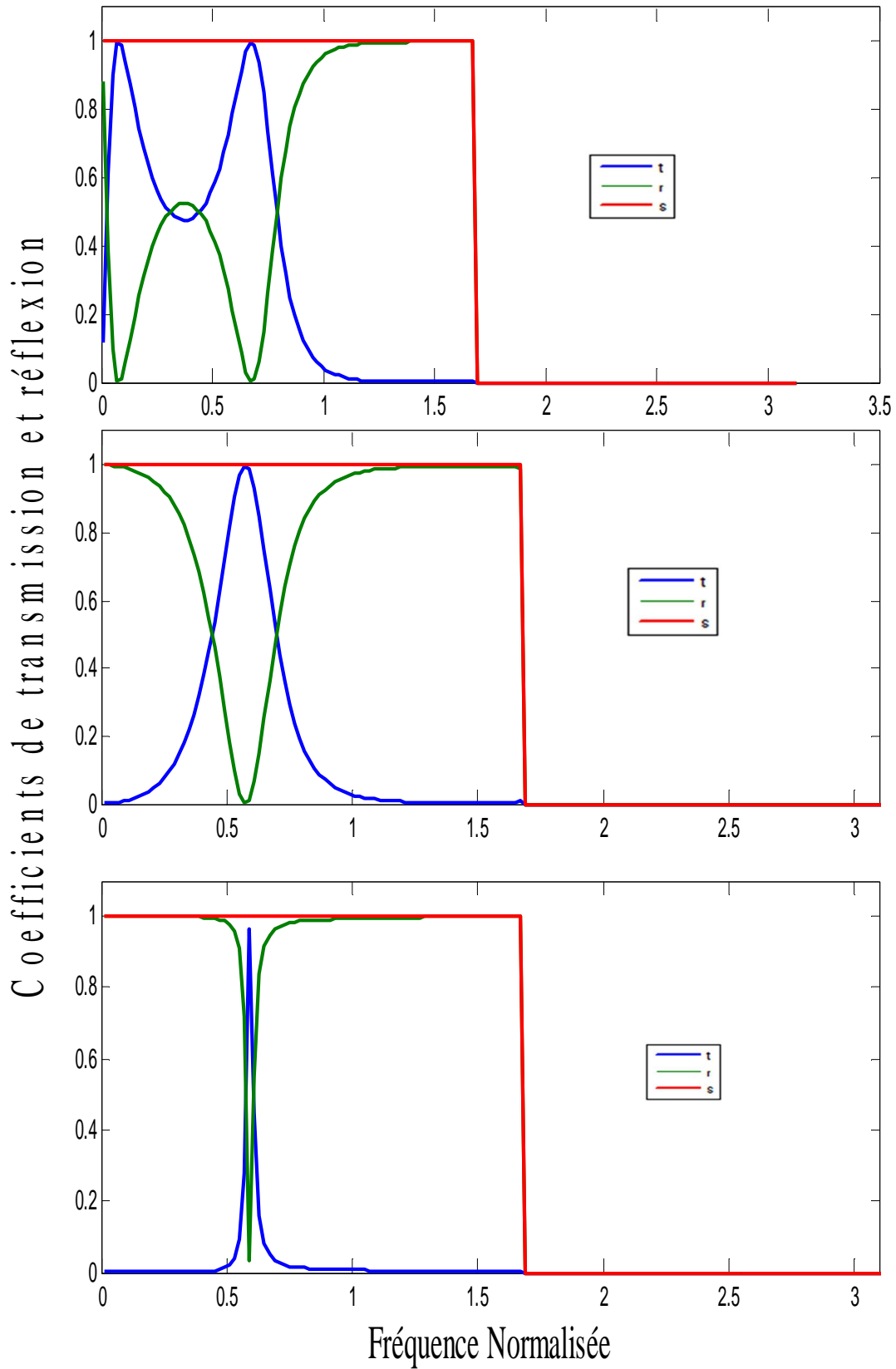


Figure III.6.4: Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour $\lambda = 0.5$, $\lambda = 0.5$, $\lambda = 0.5$ respectivement.

Conclusion

En conclusion, dans ce chapitre, nous avons étudié l'influence de trois types de défauts sur les propriétés de diffusion élastique de phonons dans un guide d'onde quasi-bidimensionnel. Notre approche numérique, basée sur le principe de Landauer-Büttiker, s'appuie sur la méthode de raccordement combinée aux fonctions de Green pour calculer les coefficients de transmission et de réflexion en fonction de fréquence normalisée pour les deux modes.

L'introduction d'une perturbation dans un système parfait entraîne essentiellement la perte de la symétrie de la structure. Cette brisure de symétrie affecte peu les effets des parties de volume loin de défaut. Par contre, elle modifie considérablement les propriétés mécaniques et vibrationnelles par la création d'états localisés et par une diffusion de phonons à la surface du matériau.

La modification des paramètres (masse et constante de force) influe considérablement sur les propriétés mécaniques et thermiques de l'échantillon étudié. En effet, d'une part la décroissance des probabilités de transmission, par conséquent de la conductance du système, altère le transport d'énergie par le guide d'onde perturbé. D'autre part, le défaut crée des états liés localisés dans son voisinage ; l'interaction de ces derniers avec le continuum de vibration donne naissance à des structures résonantes de types Fano qui n'existent aucunement dans le cas d'un réseau parfait.

Par ailleurs, il est montré que ces résonances se déplacent vers les hautes énergies quand la masse des atomes de la molécule diminue ou quand la constante de force de liaison augmente. Ceci est en accord avec la définition de la fréquence d'un oscillateur harmonique isolé. De plus, les résonances influent considérablement sur la conductance du réseau cristallin à des fréquences bien déterminées.

Conclusion

Conclusion générale

Conclusion générale

Nous avons développé une approche théorique qui permet de traiter la diffusion d'ondes de phonons dans les systèmes de basses dimensions présentant des défauts de structure.

L'investigation des ondes diffusées s'est effectuée en résolvant directement l'équation du mouvement des atomes avec des conditions aux limites fixées au préalable. Bien que la méthode présentée dérive de travaux menés sur les guides d'ondes de phonon, le cas des ondes de vibrations est beaucoup plus compliqué, la différence essentielle provient du fait que les fonctions d'ondes dans l'équation de Schrödinger sont des scalaires complexes, alors que les fonctions d'onde vibrationnelles sont décrits, quand à elle par des vecteurs complexes.

L'influence de la géométrie des structures de dimensions réduites sur les phénomènes de transport cohérent des phonons est étudiée en utilisant la technique de raccordement, et ce pour les différentes paramètres de la zone caractérisant le domaine perturbé par rapport aux zones parfaites. La méthode de raccordement s'applique à l'étude de la dynamique des systèmes, quelque soit leur taille, contenant des défauts variés. Par ailleurs, cette technique combinée aux fonctions de Green permet, aussi de calculer les coefficients de transmission et de réflexion. Les résultats obtenus, concernant ces coefficients des systèmes étudiés, sont comparables à ceux qui se rattachent aux phénomènes électroniques des systèmes perturbés de basses dimensions.

Nous avons montré, aussi que la brisure de symétrie, engendrée par l'existence du défaut, laisse une empreinte caractéristique dans les courbes des coefficients de transmission et de réflexion. Les structures les plus remarquables dans les courbes des coefficients de transmission et de réflexion ont la forme de résonances de type Fano, qui sont une conséquence de l'interaction entre un continuum et un mode résonant crée par une inhomogénéité. Ceci a permis de mettre en évidence un certain nombre de phénomènes intéressants tels que l'interaction des états localisés créés par les défauts et les modes propageants du continuum.

Notons aussi que la diffusion d'ondes de phonon est complexe, et cela est dû à la possibilité de couplage entre les différents modes dus aux nanostructures, du fait du caractère vectoriel du champ de déplacement des phonons.

Conclusion générale

Concernant les perspectives offertes par ce travail, nous citons :

L'application de la méthode de raccordement à des températures supérieures à (0K) pour déterminer le transport thermique et la chaleur spécifique dans des systèmes réels de dimensionnalité réduite. il est à espérer que la procédure puisse se développer afin de mieux approcher les grandeurs thermodynamique et ouvrir de nouveaux champs d'application dans d'autres domaines (métallurgie, semi-conducteurs, physique des couches minces et de l'interface).

Références bibliographiques



Références

- [1] R. Landauer, J. Phys : codens Matter 1,8099(1989)
- [2] Y. Meir, S. Wingreen, Phys. Rev. Lett., 68 (1992) 2512
- [3] A. Tekman, P. F. Bagwell, Phys. Rev. B, 48 (1993) 2553
- [4] C. Berthod, F. Gagel, K. Maschke, Phys. Rev. B, 50 (1994) 18299.
- [5] P. Rai - Chaudhry (Editor), Handbook of Microlithography, Micromachining and Microfabrication (SPIE) 1996.
- [6] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, A. Khater, Phys. Rev. B,55 (1997) 1707
- [7] M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, Eur. Phys. J. B,15 (2000) 435
- [8] E. H. Lieb, D. C. Mattis, ed. 1966, Mathematical Physics in one dimension (New York: Academic).
- [9] S. Amoudache, Mémoire de Magister, Université de Houari Boumediene (2005)
- [10] Thèse de Doctorat .Rabah Chadli. Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou
- [11] Mémoire de Magister. Rabhi Rachid. Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou (2004)
- [12] Structure de surface des solide, par charge de recherche docteur Jean-Marc
- [13] Authier(A)-Cristallographie géométrique, A1305
- [14] S. Kheffache, Mémoire de Magister, Propagation d'ondes élastique dans les cristaux phononique bidimensionnels. Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou(2011)
- [15] R.L.Park, andH.H.Madden, Surf .Sci.**11**,188(1968)
- [16] P.R.Watson,M.A.V.Hove, Hermmman , National Institute of Standards and Technology Database **42**,(2001)
- [17]L.N. Rosenzweig, Uchenye Zapiski Hark.Gosudarst.Univ.Trudy Fiz. Mat. Otdel. **2**, 19 (1950)
- [18] E.A.Wood:J.Appl.Phys.**35**, 1306(1964)
- [19] I.M.Lifshitz,andL .N.Rosenzweig,Izvest.Akad.Nank.S.S.S.R.Série Fiz.12,667(1948)
- [20] J. Szefteland A .Khater,J.Phys.C:Solide.State.Phys. **20**, 4725(1987)

- [21] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, S. d'Addato and N. Auby, *J. Phys. C: Solide. State. Phys.* **21**, 2113(1988)
- [22] B. Bourahla, Thèse de Doctorat. Rabah Chadli. Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou
- [23] Modélisation des transistors bipolaires intégrés
- [24] A. Samira, Mémoire de Magister, Excitation Phononiques dans les système de basses dimensions, Université Des Sciences et de la Technologie « Houari Boumediene »(2005)
- [25] O. Nafa, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi-Ouzou(2010)
- [26] F. Gagel, et K. Maschke, *Phys. Rev*, B52, 2013 (1993).
- [27] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, P. A. Deymier, Ph. Lambin, et Dobrzynski, *Phys. Rev. B*, Vol. 65, 174308 (2002)
- [28] A. Kather. O. Rafil. Y. Labaye et Y. Pennec. *Solid State Communication*. Vol. 87. N1, 53 (1993).
- [29] O. Rafil, A. Lalaoui, M. Tamine, A. Khelifi, *surf .Rev Letter* 9, 1387 (2002)
- [30] M. Belhadi, R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil, J. Hardy. *Phys. chem News* 8.23 (2002).
- [31] S. Irene, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou(2001)
- [32] M. Abou. Ghantous and A. Khater. *Eur .Phys.J.B* 12,335(1999)
- [34] A. Fellay. Travail Pratique de Diplome d'ingénieur Physicien. Ecole Polytechnique Fédérale de Lausane, (1995)
- [35] M. Belhadi. Thèse de doctorat d'état, Univ.M.Mammeri de Tizi Ouzou(2000)
- [36] A. Virlovet, A. Khater, H. Aouchiche, O. Rafil et K. Mascke *Phys. Rev. B* 59, 4933 (1999)

Liste des figures :

Figure I.1 : montrons les 5 réseaux de Bravais à 2D	9
Figure I.2 : Représentation des réseaux direct en (a) et réciproque en (b) ainsi que la première zone de Brillouin en (c) de la surface (100)	12
Figure I.3 : Représentation schématique d'un solide cristallin semi-infini qui les trois régions : de défaut, de raccordement, et de volume	15
Figure I.4 : Représentation schématique les différents zones sem-infinis parfaits par la méthode de raccordement	16
Figure II.1 : Représentation du guide d'onde parfait	22
Figure II.2 : Dispersion des modes propageant d'onde parfait pour différentes valeurs des valeurs φ_y	28
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 r	31
Figure II.4:Bandes passantes de volume en (a) et (b) pour différentes valeurs r.....	33
Figure II.5 : Bande propageante des modes transversal en (a) et longitudinal en (b) pour la valeur de r fixe	34
Figure II.6 : Variation des facteurs de phase en fonction de fréquence Ω	36
Figure II.7 : Comportement fonctionnel de facteur de phase	36
Figure II.8 : Comportements fonctionnels $\Omega(Z)$	38
Figure II.9 :Variation du facteur de phase Z en fonction de la fréquence normalisée	39
Figure II.10 : Facteurs de phase en fonction Z de la fréquence normalisée Ω pour les différents valeurs d'angle incidente φ_y	40
Figure II.11 : Vitesse de groupe les différentes valeurs d'angle incidentes pour les deux modes	43

Figure.3.1 : Schéma d'un modèle d'un système interface.....	46
Figure. 3.2 : Schéma d'un modèle par un défaut étendu.....	47
Figure 3.3 : Schéma d'un modèle par une chaine diatomique	48
Figure III.4.1 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour différents valeurs de e	58
Figure III.4.2 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différents valeurs de e	59
Figure III.4.3 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour $\lambda=0.5, \lambda=1, \lambda=1.5$ respectivement	60
Figure III.4.4 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour $\lambda=0.5, \lambda=1, \lambda=1.5$ respectivement	61
Figure III.5.1 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour les différents valeurs de e	62
Figure III.5.2 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différents valeurs de e	63
Figure III.5.3 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour $\lambda=0.5, \lambda=1, \lambda=1.5$ respectivement.....	64
Figure III.5.4 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 diffusion pour $\lambda=0.5, \lambda=1, \lambda=1.5$	65
Figure III.6.1 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour les différents valeurs de e	66
Figure III.6.2 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différents valeurs de e	67
Figure III.6.3 : Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 1 pour $\lambda=0.5, \lambda=1, \lambda=1.5$ respectivement.....	68

Figure III.6.4: Courbes des coefficients de réflexion et de transmission de mode 2 pour $\lambda = 0.5, \lambda=1, \lambda=1.5$ respectivement.....69

Annexes

Les matrices

Matrice de atome M_1 et M_2 pour 4 atomes :

Tous les autres éléments qui ne sont pas donnés sont nuls.

$$d(1,1) = \Omega^2 - \alpha_1 - \lambda - \alpha_2 - \lambda r \quad d(1,3) = \alpha_1 + \alpha_2 (\cos(\varphi_y)) \quad d(1,4) = \alpha_2 (i \sin(\varphi_y))$$

$$d(1,7) = \lambda + \lambda r (\cos(\varphi_y)) \quad d(1,8) = -\lambda r (i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(2,2) = \Omega^2 - 2\lambda - \alpha_2 - \lambda r + \lambda(2\cos(\varphi_y)) \quad d(2,3) = \alpha_2 (i \sin(\varphi_y))$$

$$d(2,4) = \alpha_2 (\cos(\varphi_y)) \quad d(2,7) = -\lambda r (i \sin(\varphi_y)) \quad d(2,8) = \lambda r (\cos(\varphi_y))$$

← →

$$d(3,1) = \alpha_1 + \alpha_2 (\cos(\varphi_y)) \quad d(3,2) = -\alpha_2 (i \sin(\varphi_y)) \quad d(3,3) = \Omega^2 - \gamma - \lambda - \alpha_2 - \lambda \beta - \alpha_1$$

$$d(3,5) = \lambda \gamma + \lambda \beta (\cos(\varphi_y)) \quad d(3,6) = \lambda \beta (i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(4,1) = -\alpha_2 (i \sin(\varphi_y)) \quad d(4,2) = \alpha_2 (\cos(\varphi_y))$$

$$d(4,4) = \Omega^2 - 2\gamma - \lambda - \alpha_2 - \lambda \beta - \lambda \gamma (2\cos(\varphi_y)) \quad d(4,5) = \lambda \beta (i \sin(\varphi_y))$$

$$d(4,6) = \lambda \beta (\cos(\varphi_y))$$

← →

$$d(5,3) = \lambda \gamma + \lambda \beta (\cos(\varphi_y)) \quad d(5,4) = -\lambda \beta (i \sin(\varphi_y))$$

$$d(5,5) = \Omega^2 - \gamma - \lambda - \gamma - \lambda \beta - \beta \quad d(5,9) = \gamma + \beta (\cos(\varphi_y)) \quad d(5,10) = \beta (i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(6,3) = -\lambda \beta (i \sin(\varphi_y)) \quad d(6,4) = \lambda \beta (\cos(\varphi_y))$$

$$d(6,6) = \Omega^2 - 2\gamma + \gamma (2\cos(\varphi_y)) - \lambda \beta - \beta \quad d(6,9) = \beta (i \sin(\varphi_y))$$

$$d(6,10) = \beta (\cos(\varphi_y))$$

← →

$$d(7,1) = \lambda + \lambda r (\cos(\varphi_y)) \quad d(7,2) = \lambda r (i \sin(\varphi_y)) \quad d(7,7) = \Omega^2 - \lambda - 1 - \lambda r - r$$

$$d(7,11) = 1 + r (\cos(\varphi_y)) \quad d(7,12) = -r (i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(8,1) = \lambda r (i \sin(\varphi_y)) \quad d(8,2) = \lambda r (\cos(\varphi_y))$$

$$d(8,8) = \Omega^2 - 2 - \lambda r - r + (2\cos(\varphi_y)) \quad d(8,11) = -r (i \sin(\varphi_y)) \quad d(8,12) = r (\cos(\varphi_y))$$

Les matrices

Matrice de premier cas pour 5 atomes :

$$d(1,1) = e \Omega^2 - 2\gamma - 2\beta \quad d(1,3) = \gamma + \beta(\cos(\varphi_y)) \quad d(1,4) = \beta(i \sin(\varphi_y))$$

$$d(1,7) = \gamma + \beta(\cos(\varphi_y)) \quad d(1,8) = -\beta(i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(2,2) = e \Omega^2 - 2\gamma\lambda - 2\beta - \lambda\gamma^*(2\cos(\varphi_y)) \quad d(2,3) = \beta(i \sin(\varphi_y))$$

$$d(2,4) = \beta(\cos(\varphi_y)) \quad d(2,5) = -\beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(2,6) = \beta(\cos(\varphi_y))$$

← →

$$d(3,1) = \gamma + \beta(\cos(\varphi_y)) \quad d(3,2) = -\beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(3,3) = \Omega^2 - \lambda - \gamma - \lambda r - \beta$$

$$d(3,7) = \lambda + \lambda r(\cos(\varphi_y)) \quad d(3,8) = \lambda r(i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(4,1) = -\beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(4,2) = \beta(\cos(\varphi_y))$$

$$d(4,4) = \Omega^2 - 2\lambda + \lambda(2\cos(\varphi_y)) - \lambda r - \beta \quad d(4,7) = \lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(4,8) = \lambda r(\cos(\varphi_y))$$

← →

$$d(5,1) = \gamma + \beta(\cos(\varphi_y)) \quad d(5,2) = \beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(5,5) = \Omega^2 - \lambda - \gamma - \lambda r - \beta$$

$$d(5,9) = \lambda + \lambda r(\cos(\varphi_y)) \quad d(5,10) = \lambda r(i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(6,1) = \beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(6,2) = \beta(\cos(\varphi_y))$$

$$d(6,6) = \Omega^2 - 2\lambda + \lambda(2\cos(\varphi_y)) - \lambda r - \beta$$

$$d(6,9) = \lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(6,10) = \lambda r(\cos(\varphi_y))$$

← →

$$d(7,3) = \lambda + \lambda r(\cos(\varphi_y)) \quad d(7,4) = -\lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(7,7) = \Omega^2 - 1 - r - \lambda - \lambda r$$

$$d(7,11) = 1 + r(\cos(\varphi_y)) \quad d(7,12) = r(i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(8,3) = -\lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(8,4) = \lambda r(\cos(\varphi_y)) \quad d(8,8) = \Omega^2 - 2 + (2\cos(\varphi_y)) - \lambda r - r$$

$$d(8,11) = r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(8,12) = r(\cos(\varphi_y))$$

← →

$$d(9,5) = \lambda + \lambda r(\cos(\varphi_y)) \quad d(9,6) = -\lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(9,9) = \Omega^2 - 1 - r - \lambda - \lambda r$$

Les matrices

$$d(9,13) = r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(9,14) = -r(i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(10,5) = -\lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(10,6) = \lambda r(\cos(\varphi_y)) \quad d(10,10) = \Omega^2 - 2 + (2\cos(\varphi_y)) - 2r$$

$$d(10,13) = -r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(10,14) = r(\cos(\varphi_y))$$



Les matrices

Matrice de deuxième cas pour 6 atomes :

$$d(1,1) = e \Omega^2 - 2\alpha_1 - \alpha_2 - \gamma - \beta \quad d(1,3) = \alpha_1 + \alpha_2^*(\cos(\varphi_y)) \quad d(1,4) = \alpha_2^*(i \sin(\varphi_y))$$

$$d(1,7) = \gamma + \beta^*(\cos(\varphi_y)) \quad d(1,8) = -\beta(i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(2,2) = e \Omega^2 - 2\alpha_1 + \alpha_1^*(2\cos(\varphi_y)) - \beta - \alpha_2 \quad d(2,3) = \alpha_2^*(i \sin(\varphi_y))$$

$$d(2,4) = \alpha_2^*(\cos(\varphi_y)) \quad d(2,7) = -\beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(2,8) = \beta^*(\cos(\varphi_y))$$

◀ ▶

$$d(3,1) = \alpha_1 + \alpha_2^*(\cos(\varphi_y)) \quad d(3,2) = -\alpha_2^*(i \sin(\varphi_y)) \quad d(3,3) = e \Omega^2 - 2\alpha_1 - \alpha_2 - \gamma - \beta$$

$$d(3,5) = \gamma + \beta^*(\cos(\varphi_y)) \quad d(3,6) = \beta(i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(4,1) = -\alpha_2^*(i \sin(\varphi_y)) \quad d(4,2) = \alpha_2^*(\cos(\varphi_y))$$

$$d(4,4) = e \Omega^2 - 2\alpha_1 + \alpha_1^*(2\cos(\varphi_y)) - \beta - \alpha_2 \quad d(4,5) = \beta(i \sin(\varphi_y))$$

$$d(4,6) = \beta^*(\cos(\varphi_y))$$

◀ ▶

$$d(5,3) = \gamma + \beta^*(\cos(\varphi_y)) \quad d(5,4) = -\beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(5,5) = e \Omega^2 - \lambda - \gamma - \beta - \lambda r$$

$$d(5,9) = \lambda + \lambda r (\cos(\varphi_y)) \quad d(5,10) = \lambda r (i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(6,3) = -\beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(6,4) = \beta^*(\cos(\varphi_y))$$

$$d(6,6) = \Omega^2 - 2\lambda + \lambda^*(2\cos(\varphi_y)) - \lambda r - \beta \quad d(6,9) = \lambda r (i \sin(\varphi_y))$$

$$d(6,10) = \lambda r (\cos(\varphi_y))$$

◀ ▶

$$d(7,1) = \gamma + \beta^*(\cos(\varphi_y)) \quad d(7,2) = \beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(7,7) = e \Omega^2 - \lambda - \gamma - \beta - \lambda r$$

$$d(7,11) = \lambda + \lambda r (\cos(\varphi_y)) \quad d(7,12) = -\lambda r (i \sin(\varphi_y))$$

.....

$$d(8,1) = \beta(i \sin(\varphi_y)) \quad d(8,2) = \beta^*(\cos(\varphi_y))$$

$$d(8,8) = \Omega^2 - 2\lambda + \lambda^*(2\cos(\varphi_y)) - \lambda r - \beta \quad d(8,11) = -\lambda r (i \sin(\varphi_y))$$

Les matrices

$$d(8,12) = \lambda r(\cos(\varphi_y))$$



$$d(9,5) = \lambda + \lambda r(\cos(\varphi_y)) \quad d(9,6) = -\lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(9,9) = \Omega^2 - \lambda - 1 - r - \lambda r$$

$$d(9,13) = 1 + r(\cos(\varphi_y)) \quad d(9,14) = r(i \sin(\varphi_y))$$



$$d(10,5) = -\lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(10,6) = \lambda r(\cos(\varphi_y))$$

$$d(10,10) = \Omega^2 - 2 + (2\cos(\varphi_y)) - r - \lambda r \quad d(10,13) = r(i \sin(\varphi_y))$$

$$d(10,14) = r(\cos(\varphi_y))$$



$$d(11,7) = \lambda + \lambda r(\cos(\varphi_y)) \quad d(11,8) = \lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(11,11) = \Omega^2 - \lambda - 1 - r - \lambda r$$

$$d(11,15) = 1 + r(\cos(\varphi_y)) \quad d(11,16) = -r(i \sin(\varphi_y))$$



$$d(12,7) = \lambda r(i \sin(\varphi_y)) \quad d(12,8) = \lambda r(\cos(\varphi_y))$$

$$d(12,12) = \Omega^2 - 2 + (2\cos(\varphi_y)) - r - \lambda r \quad d(12,15) = -r(i \sin(\varphi_y))$$

$$d(10,14) = r(\cos(\varphi_y))$$



Résumé

L'objectif principal de ce mémoire est de contribuer à une compréhension de certains effets dus à la présence des défauts nanostructuraux dans des guides d'ondes cristallographiques quasi-bidimensionnels 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, une initiation aux calculs de la dispersion des phonons pour un guide d'onde parfait à deux dimensions dans le cadre de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins. La méthode de raccordement est utilisée pour l'analyse des ondes vibratoires diffusées par un défaut de surface d'une structure cristalline. Les spectres de transmission et de réflexion obtenus sont analysés en fonction de la fréquence des deux modes propres de vibration du réseau parfait. L'évolution de ces spectres en fonction de la masse de défaut et des constantes de forces est discutée. Les états localisés induits par le défaut interagissent avec le continuum de vibration du guide d'ondes parfait et créent des résonances de Fano. Ces dernières sont étudiées en fonction de la masse de défaut et des constantes de force. Par ailleurs, il est montré que l'évolution des fréquences de résonances en fonction des paramètres suscités est compatible avec la fréquence d'un oscillateur harmonique isolé.

Summary

The principal objective of this memory is to contribute to a comprehension of certain effects due to the presence of the nanostructural defects in guides of crystallographic waves quasi-two-dimensional of low dimensions which break the symmetry of translation in the normal direction with the defect. This study will be undertaken within the framework of the harmonic approximation of the central forces and the interaction between first and second neighbors. From the model structures, this work concerns the development and the application of the analytical methods and digital simulation.

We have studied the dynamic properties of the perfect network, an initiation with calculations of the dispersion of the phonons for a perfect guide of wave to two dimensions within the framework of the harmonic approximation of the central forces and the interaction between first and second neighbors. The matching method is used to analyze the vibrationnal waves diffused by a surface defect of the crystal structure. Obtained transmission and reflection spectra are analyzed according to the frequency of the two eigenmodes of the perfect lattice. The evolution of these spectra, along with the defect mass and the strength constants, is largely discussed. The localized states induced by the defect interact with the vibrationnal continuum of the perfect waveguide and create Fano resonances, which are analyzed according to the mass of the defect and the strength constants. In addition, it is shown that the evolution of the resonance frequencies, with respect to the precedent parameters, is compatible with the frequency definition of an isolated harmonic oscillator.

ملخص:

الهدف الرئيسي من هذا البحث هو فهم بعض الآثار المسببة بحضور عيوب الجسيمات الجد صغيرة (نانوستركتور) في دليل علم التبلور ذو الأبعاد الصغيرة الذي يكسر التناظر بالإزاحة في اتجاه عادي إلى الخطأ، هذه الدراسة تسير في إطار التجاور المتجانس للقوى المتوسطة والتحركات الداخلية بين الجزئيات المتجاورة الأولى والتالية من خلال الهيكلة النموذجية، هذا العمل يؤدي إلى تطور وتطبيق طرق تحليلية والتظاهر بالرقمية.

لقد درسنا الملكية الديناميكية للشبكة المثالية كمدخل لحسابات التوزيعات الذرية من أجل الدليل الجزئي المثالي إلى ثنائي الأبعاد في إطار التجاور المتجانس للقوى الوسطى والتحركات الداخلية بين الجزئيتين المتجاورتين الأولى والتالية، الطريقة الترابطية استعملناها من أجل تحليل الاهتزازات وانتشارها من طرف خطأ المساحة التركيبية الكريستالية.

أطياف نقل الحركة ورد الفعل الناتج حلوا مع عمل تردد الأسلوبين لإهتزازات الشبكة المثالية. تطور هذه الأطياف من هذا العمل بالكتلة الخطأ وجليد القوى نوقشت، الحالات الملاحظة مستقراً من أخطاء مع مجموعة إتصالية لتردد الدليل الجزئي المثالي تنتج رنين.

هذه الأخيرة درست بعمل كتلة الخطأ و مثابرة للقوى. في موضع اخر تظهر تطور ترددات الرنين من وظيفة الإعدادات المتناغمة مع الترددات للمسرع المثالي المنفرد.