



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



FACULTE DES SCIENCES ET SCIENCES APPLIQUEES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

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

OPTION

*Physique des Matériaux*

**THEME**

**Etude de la diffusion des phonons par un  
défaut dans un guide d'ondes plan  
bidimensionnel.**

Présenté par :

**Mme:** BENHAMED NOUR EL HOUDA

**Mme :** ZIANE SAADIA

**Date de soutenance :**

/10/2018

**Devant le jury :**

**Président :** Dr. **KHELFANE** Hocine

**M.C.B**

**Université de Bouira**

**Rapporteur:** Dr. **ZERIRGUI** Djamel

**M.C.B**

**Université de Bouira**

**Examineur 1:** Mr. **BENAMARA** Salem

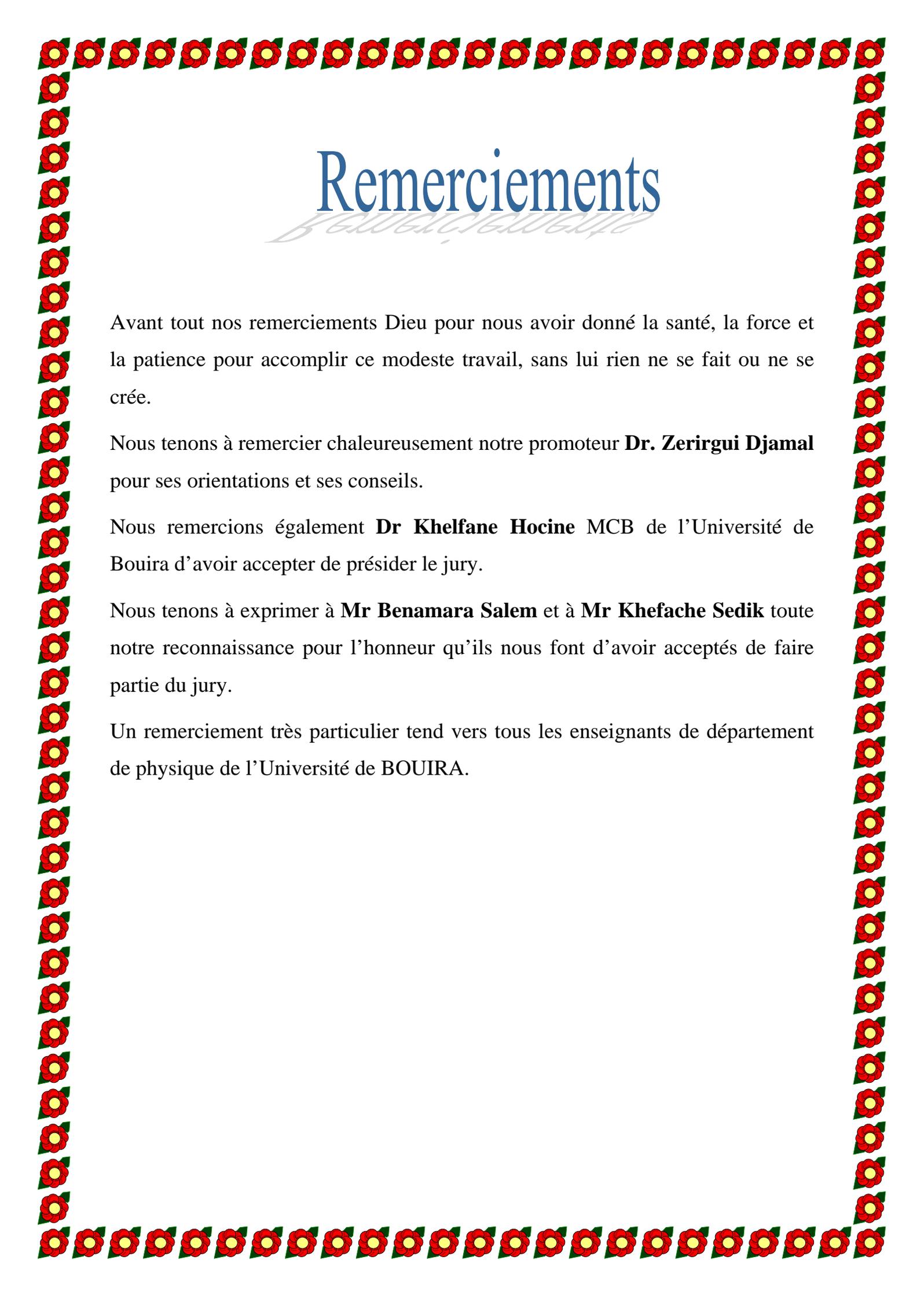
**M.A.A**

**Université de Bouira**

**Examineur 2:** Mr. **KHEFACHE** Sedik

**M.A.A**

**Université de Bouira**



# Remerciements

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

Nous tenons à remercier chaleureusement notre promoteur **Dr. Zerirgui Djamal** pour ses orientations et ses conseils.

Nous remercions également **Dr Khelfane Hocine** MCB de l'Université de Bouira d'avoir accepté de présider le jury.

Nous tenons à exprimer à **Mr Benamara Salem** et à **Mr Khefache Sedik** toute notre reconnaissance pour l'honneur qu'ils nous font d'avoir acceptés de faire partie du jury.

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

# Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

- ✚ À ma très chère maman **Rabiha** pour tous les sacrifices, les efforts et le soutien qu'elle a consenti pour moi et à qui je souhaite la bonne santé et qu'**ALLAH** la garde pour moi.
- ✚ A mon très cher papa **Hamid** pour tous ces efforts, les conseils et le soutien qu'il m'a apporté durant toutes mes années d'études.
- ✚ A mes deux chères sœurs **Rania** et **Mouna**.
- ✚ A mes frères **Djalal** et **Mahdi**.
- ✚ A mon marié **Walid**.
- ✚ A toute la ma famille sans exception.
- ✚ A toute mes connaissances et amis au niveau de Département de physique.
- ✚ A tous mes camarades et mes amies : **Hind, Nadia, Selma, Chahera, Khadija, Hadjer, Karima, Fériale, Zinabe et Houda**.
- ✚ Je ne peux achever cette dédicace sans citer mon binôme **Saadia**.

Nour el houda

# Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

- ✚ À ma très chère maman **Yamina** pour tous les sacrifices, les efforts et le soutien qu'elle a consenti pour moi et à qui je souhaite la bonne santé et qu'**ALLAH** la garde pour moi.
- ✚ A mon très cher papa **Boualem** pour tous ces efforts, les conseils et le soutien qu'il m'a apporté durant toutes mes années d'études.
- ✚ A mes chères sœurs **Daouia, Hanane, Sarah, chahinez.**
- ✚ A mes frères **Mohamed Wail, Souhaib.**
- ✚ A mon marié **Hakim.**
- ✚ A toute la ma famille sans exception.
- ✚ A toute mes connaissances et amis au niveau de Département de physique.
- ✚ A tous mes camarades et mes amies : **Hind, Nadia, Houda, Khadija, Hadjer, Karima, CHahra .**
- ✚ Je ne peux achever cette dédicace sans citer mon binôme **Nour el houda.**

Saadia

## TABLE DE MATIERE

<b>Introduction générale</b> .....	2
<b>Chapitre I : Introduction à l'étude des surfaces</b>	
I.1 Introduction.....	4
I.2 Petit rappel sur la cristallographie.....	4
I .2.1 Structure cristalline.....	4
I.3 Concepts et notions de base des surfaces.....	5
I .3.1 Le concept de cellule élémentaire de surface.....	5
I .3.2 Réseau à deux dimensions ( $\vec{c} = \vec{0}$ ) ou concept de cellule élémentaire de surface.....	5
I.3.3 Notations utilisées pour les structures de surface.....	6
I.3.3.1 Notation matricielle .....	6
I.3.3.2 Notation de <i>Wood'S</i> .....	8
I.4 Première zone de Brillouin et direction de symétrie.....	8
I.4.1 Zone de Brillouin.....	8
I.4.2 Cas de la surface (100) d'un réseau cubique simple .....	9
I.5 Effets des impuretés sur les vibrations du réseau.....	10
I.5.1 Modes localisés .....	11
I.5.2 Modes normaux de vibration de surface .....	11
I.5.3. Modes localisés de vibration de surface .....	11
I.6 Quelques techniques expérimentales pour l'analyse des surfaces.....	12
I.6.1. La spectroscopie d'électrons Auger (S.E.A).....	12
I.6.2. Microscopie électronique a balayage – MEB.....	13
I.6.3. La spectrométrie photoélectronique X (SPX).....	13
I.7 Conclusion.....	15
<b>Chapitre II : Modélisation de la dynamique vibrationnelle d'un réseau parfait</b>	
II.1. Introduction.....	16
II.2- Description du modèle .....	17
II.3- Dynamique vibrationnelle dans les régions de volume.....	18
II.3.1- Les équations de mouvement .....	18

II.3.2- La matrice dynamique – équations propres .....	19
II.3.3-Courbe de dispersion .....	22
II.3.3.1- courbes de dispersion pour les différentes valeurs de $\varphi_y$ .....	24
II.3.3.2-Courbes de dispersions pour différentes valeurs de $r$ .....	26
II.4- Calcul des facteurs de phase .....	26
II.4.1- La Méthode de déterminant .....	26
II.4.2- Tri des valeurs propres obtenues.....	26
II.4.3- Facteur de phase obtenu. ....	27
II.5 - Calcul des vitesses de groupe.....	33
II.6- Conclusion.....	36
<b>Chapitre III : Diffusion d’ondes élastiques par un défaut interstitiel</b>	
III.1- Introduction .....	37
III.2- Description de modèle.....	38
III.3- La méthode de raccordement.....	39
III.4- Principe de la méthode .....	39
III.5- La matrice dynamique du système <sup>47</sup> .....	40
III.6- La matrice de raccordement .....	41
III.7- Etude de la diffusion .....	42
III.7.1- Calcul des coefficients de transmission et de réflexion .....	43
III.7.2- Calcul de la conductance phononique.....	45
III.7.3- Résultats et discussion .....	45
III.7.3.1 Coefficients de transmission et de réflexion.....	45
III.7.3.2 Conductance phononique.....	47
III.8- Conclusion .....	59
<b>Conclusion générale</b> .....	60
<b>Bibliographie</b> .....	61

## Introduction Générale

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

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

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

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

Le but est de relever l'impact de défauts atomiques sur la dynamique des systèmes bidimensionnels. Nous nous intéressons particulièrement, à un seul type de défaut atomique: le système à étudier est un réseau cristallin plan formé d'atome de masse  $M_1$  qui peuvent se déplacer dans deux directions, et dans lequel on insère une chaîne d'atome de masse  $M_2$  parallèle à l'axe  $Oy$ , qui divise ce plan en deux plans semi-infinis où les coordonnées de l'atome de défaut est  $(\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2})$ .

Dans le premier chapitre de ce mémoire nous avons introduit quelques notions pour étude des surfaces.

Nous commencerons par un petit rappel sur la cristallographie, par la suite nous verrons des concepts et notion de base des surfaces, puis nous intéresserons aux caractéristiques

des modes des vibrations des atomes, ainsi que les effets des impuretés sur les vibrations de réseau.

Enfin nous terminerons avec quelques techniques expérimentales pour l'analyse des surfaces .

Le second chapitre traite la modélisation de la dynamique vibrationnelle d'un réseau parfait. Nous définirons les courbes de dispersion phononiques, leurs modes propagants et évanescents et nous introduirons les vitesses de groupe indispensables pour l'étude de la diffusion.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude de la diffusion des phonons par un défaut de structure. La première partie présente notre modèle à étudier, où nous avons appliqué la méthode de raccordement pour déterminer la matrice dynamique de système ainsi que la matrice de raccordement.

Dans la deuxième partie nous allons étudier l'état de propagation d'ondes élastiques et l'évolution des courbes des coefficients de transmission et de réflexion ainsi que celles de la conductance phononique avec la discussion des résultats obtenus.

Nous terminerons ce travail par une conclusion générale dans laquelle, nous résumons l'essentiel de nos résultats et quelques perspectives pour ce travail.

## I.1 Introduction

Les surfaces solides 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 [1,2]. La compréhension des propriétés diverses de ces dernières passe par une connaissance de leurs structures, c'est-à-dire de l'arrangement ordonné ou non des atomes en surface [3]. La surface d'un matériau doit donc être considérée comme un milieu quasi bidimensionnel avec une extension spatiale très limitée dans la direction normale.

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 interface entre les différentes formes de la matière [4].

## I.2 Petit rappel sur la cristallographie

### I.2.1 Structure cristalline

Un système parfait est 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  $\overrightarrow{OM} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$  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. Donc l'état cristallin correspond à un arrangement compact et périodique des atomes du solide.

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

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

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 [5].

Considérons un réseau tridimensionnel semi-infini, constitué d'atomes  $\ell$  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  $\vec{T}_\ell$  :

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

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.3 Concepts et notions de base des surfaces

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

#### I.3.1 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.3.2 Réseau à deux dimensions ( $\vec{c} = \vec{0}$ ) ou 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.

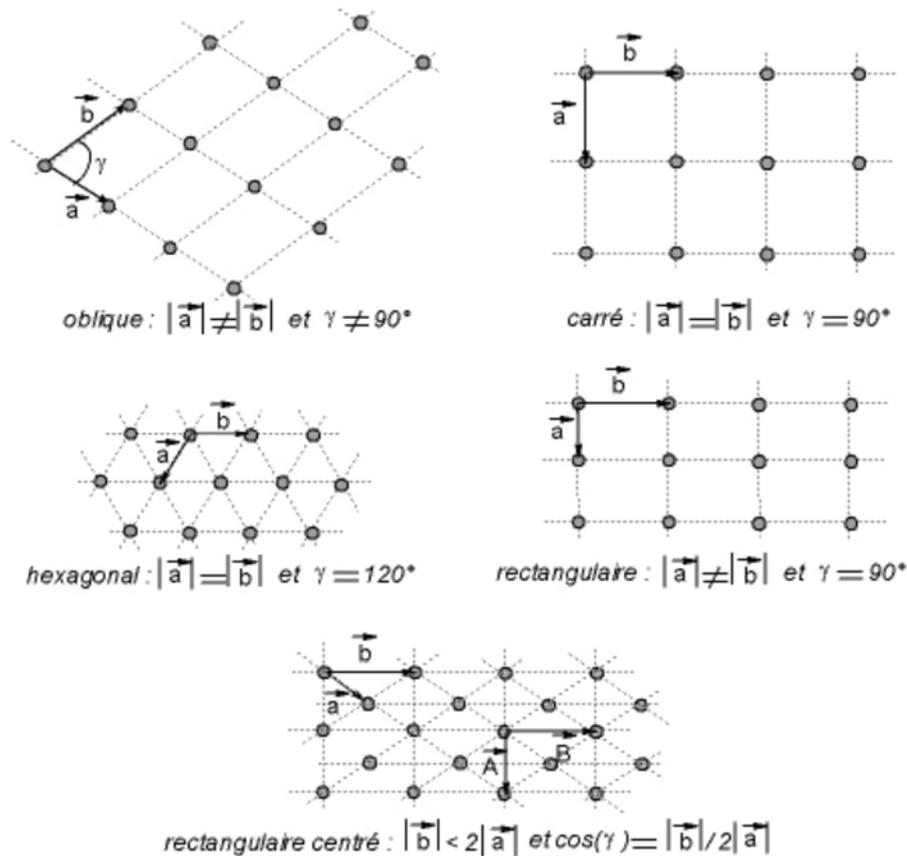


Figure I.1 : Les 5 réseaux de Bravais à 2D [9]

### I.3.3 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 [6].

#### I.3.3.1 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* [7], 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  $(\vec{a}, \vec{b})$ .

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

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

$$\begin{pmatrix} \vec{a}_s \\ \vec{b}_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \end{pmatrix}\quad (\text{I. 13})$$

Et la structure de surface est alors spécifiée par la matrice

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}\quad (\text{I. 14})$$

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 :

$$S(hkl) - M - A \quad (\text{I. 13})$$

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.

### I.3.3.2 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 [7,8]. 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 :

$$\begin{aligned} \vec{a}_s &= m \vec{a} \\ \vec{b}_s &= n \vec{b} \end{aligned} \quad (\text{I. 14})$$

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

$$S(hkl) - (m \times n) R \varphi^0 - A \quad (\text{I. 15})$$

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

## I.4 Première zone de Brillouin et direction de symétrie

### I.4.1. 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 Wigner-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  $i$ 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  $i$ ème sites voisins et d'autre part les plans bissecteurs des zones de Brillouin inférieures [9].

I.4.2 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 :

$$\vec{a} \begin{pmatrix} a/2 \\ a/2 \end{pmatrix} ; \quad \vec{b} \begin{pmatrix} -a/2 \\ a/2 \end{pmatrix} \tag{I. 8}$$

- 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 :

$$\vec{A}^* \cdot \vec{a} = 2\pi \quad \text{et} \quad \vec{a} \cdot \vec{B}^* = 0 \tag{I. 9}$$

$$\vec{B}^* \cdot \vec{b} = 2\pi \quad \text{et} \quad \vec{b} \cdot \vec{A}^* = 0$$

Un simple calcul permet d'avoir les résultats suivants :

$$\begin{aligned} \vec{A}^* & \begin{pmatrix} 2\pi/a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} \\ \vec{B}^* & \begin{pmatrix} -2\pi/a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{I. 10}$$

Avec

$$\begin{aligned} \|\vec{A}^*\| & = 2\sqrt{2} \pi/a \\ \|\vec{B}^*\| & = 2\sqrt{2} \pi/a \end{aligned} \tag{I. 11}$$

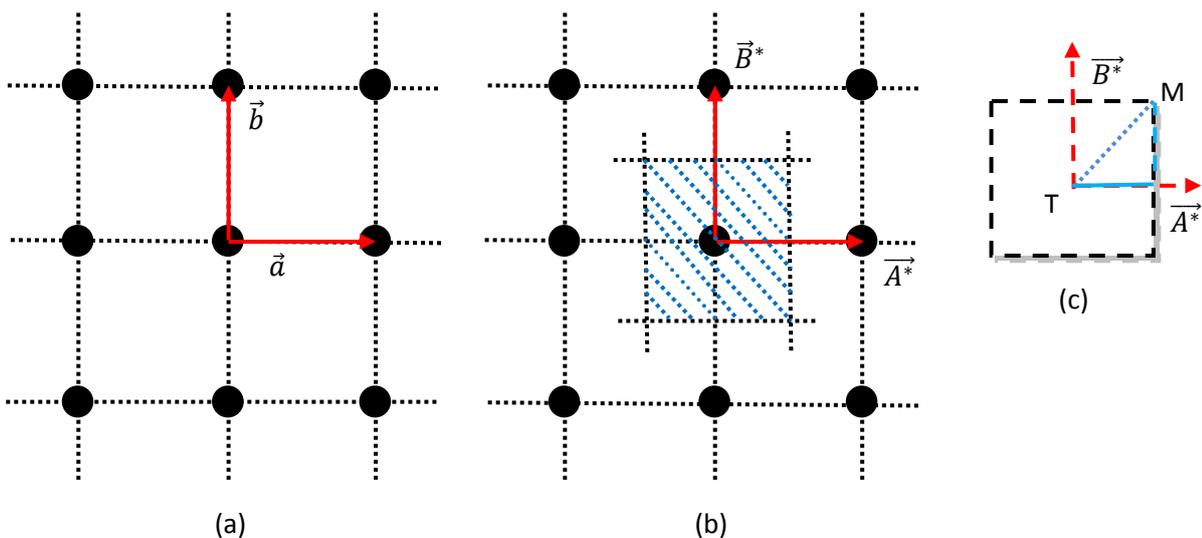


Figure I.2 : Représentation des réseaux direct en (a) et réciproque en (b) ainsi que la première zone de Brillouin en (c) de la surface (100).

### I.5. Effets des impuretés sur les vibrations du réseau

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

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

Dans un mode résonnant, l'amplitude de vibration ne décroît pas exponentiellement en fonction de la distance à l'impureté comme dans un mode localisé. Par contre, les amplitudes de vibration de tous les atomes du cristal, en fonction de la fréquence, passent par un maximum aigu à la fréquence du mode résonnant. Si, dans un mode résonnant, l'atome d'impureté vibre effectivement comme dans le cas d'impuretés isotopiques lourdes, initialement envisagé par Broiit et Visscher [10], la plus grande augmentation d'amplitude de vibration a lieu pour l'impureté elle-même. Dans ce cas, la fréquence et la largeur du pic de résonance décroissent tandis que son intensité croît, quand la masse de l'impureté augmente. D'un autre côté, dans un mode résonnant où l'atome d'impureté demeure immobile, l'effet de résonance se fait sentir surtout sur ses proches voisins. Dans ce cas, la fréquence et l'intensité de la résonance sont régies par les changements des forces de couplage entre l'impureté et ses proches voisins ; la résonance est d'autant plus forte que le relâchement des forces de couplage est plus grand.

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

**I.5.1. Modes localisés**

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

Les effets d'imperfections sur les modes de réseau ont fait depuis longtemps l'objet de nombreuses études théoriques [11,12]. Les résultats sont généralement connus sous le nom de « Théorème de Rayleigh ».

**I.5.2. Modes normaux de vibration de surface**

A la surface d'un cristal, les conditions aux limites imposent à un certain nombre de constantes de forces d'être nulles. Ce fait diminue la rigidité du réseau et par là abaisse aussi les fréquences des modes normaux. Cette perturbation a pour effet en outre d'éjecter de l'ensemble continu de fréquences permises une fréquence dans la zone de fréquences interdites. Les fréquences se trouvant ainsi en dehors de l'ensemble de fréquences permises sont appelées des modes de surface ; leur amplitude est maximum à la surface et décroît exponentiellement à mesure que l'on s'avance dans le réseau.

Wallis [13] a énoncé un critère général pour l'existence de modes de surface : la masse totale des atomes légers doit être inférieure à la masse globale des atomes lourds. Le nombre de modes de surface est égal au nombre de sites à la surface du réseau occupés par des atomes légers.

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

**I.5.3. Modes localisés de vibration de surface**

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

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

## I.6. Quelques techniques expérimentales pour l'analyse des surfaces

Plusieurs méthodes d'analyse de surfaces sont disponibles et qui permettent de sonder la surface des matériaux à différentes échelles. Le choix de la méthode d'analyse est déterminé par plusieurs paramètres comme le type d'information, la résolution et le type de matériau à analyser. Ces méthodes permettent de caractériser entre autre ; la morphologie de la surface : dimension et orientation des grains, mesure de l'épaisseur de différentes couches superficielles. La cristallographie de la surface : la structure de la surface peut être caractérisée en termes de caractère amorphe/cristallin, orientation cristallographique et de texture. La composition de la surface et la nature des liaisons chimiques des éléments présents peuvent également être déterminées.

### I.6.1. La spectroscopie d'électrons Auger (S.E.A)

Cette technique (dont l'abréviation commune est *AES* ; *Auger electron spectroscopy*) permet de caractériser les atomes situés à la surface d'un corps cristallin ou amorphe et de préciser la nature de leurs liaisons. Cette technique repose sur l'effet Auger qui a été mis en évidence en 1925 (par le physicien Français Pierre Auger) [14]. Le principe de la méthode repose sur une excitation électronique entraînant l'éjection d'un électron de cœur et la formation d'un ion positif ici nommé : trou.

Elle fournit une analyse chimique des éléments présents à la surface d'un matériau sur une épaisseur allant de 1 à 2.5 nm. Son succès repose sur sa facilité de mise en œuvre et sur l'adéquation existant entre ses possibilités et les renseignements couramment demandés pour une analyse de surface.

Le processus Auger fait intervenir trois niveaux électroniques : un électron d'une orbitale externe occupée vient combler le trou de cœur initialement créé et le gain d'énergie provoque l'émission d'un électron provenant d'une troisième orbitale occupée : c'est l'électron Auger (figure II.3). L'énergie cinétique des électrons Auger est comprise entre 20 eV et 2000 eV. Chaque élément du tableau périodique possède une série de transitions Auger qui lui est propre, et peut ainsi être identifié [15].

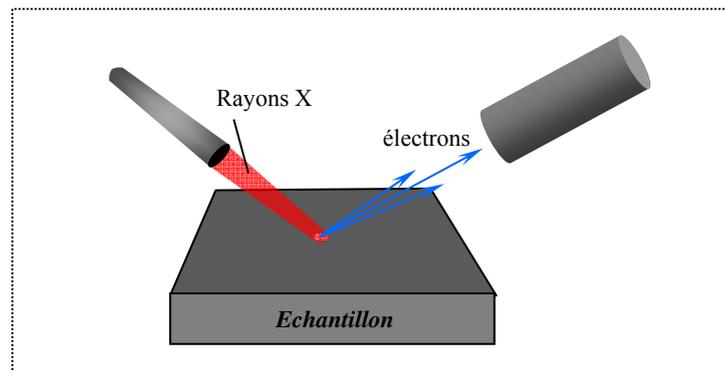
### I.6.2. Microscopie électronique a balayage – MEB

La microscopie électronique à balayage (Scanning Electron Microscopy : *SEM*) a connu son véritable essor entre 1948 et 1965, grâce aux progrès techniques de la télévision et des détecteurs d'électrons et grâce aux recherches d'Oatley et de ses condisciples à Cambridge [16,17]. La MEB permet d'obtenir des images des surfaces de la plupart des matériaux solides. Le grandissement peut aller de celui de la loupe (x10) à celui de microscopes électroniques à transmission fonctionnant à basse énergie (soit 100 keV). Il a aussi la particularité d'offrir une très grande profondeur de champ (plusieurs centaines de micromètres).

Le principe du balayage consiste à explorer la surface de l'échantillon par lignes successives et à transmettre le signal du détecteur à un écran cathodique dont le balayage est exactement synchronisé avec celui du faisceau incident. Les microscopes à balayage utilisent un faisceau très fin qui balaie point par point la surface de l'échantillon. Sous l'impact du faisceau d'électrons accélérés, des électrons rétrodiffusés et des électrons secondaires émis par l'échantillon sont recueillis sélectivement par des détecteurs qui transmettent un signal à un écran cathodique dont le balayage est synchronisé avec le balayage de l'objet.

### I.6.3. La spectrométrie photoélectronique X (SPX)

La spectrométrie photoélectronique X, ou spectrométrie de photoélectrons induits par rayons X (*X-Ray photoelectron spectrometry* : XPS) est une méthode physique d'analyse chimique mise au point à l'université d'Uppsala de Suède en 1958 [18].



**Figure I.3** : Principe de la spectrométrie photoélectronique par rayons X

Le principe de la méthode consiste à irradier l'échantillon à analyser par des rayons X monochromatiques qui provoquent l'ionisation de ses atomes par effet photoélectrique.

L'énergie cinétique  $E_c$  de ces photoélectrons est mesurée, ce qui donne le spectre de l'intensité des électrons en fonction de l'énergie mesurée. Chaque photon X incident a la même énergie  $h\nu$ , puisque le faisceau est monochromatique ( $h$  étant la constante de Planck et  $\nu$  la fréquence de l'onde lumineuse incidente). Lors de l'interaction avec l'atome, une partie de cette énergie sert à rompre la liaison, c'est l'énergie de liaison,  $E_L$  ; le reste est transféré à l'électron sous la forme d'énergie cinétique.

Le spectre en énergie cinétique présente donc des pics, et l'on peut déterminer l'énergie de liaison correspondant à chaque pic par la relation d'Einstein :

$$E_L = h\nu - E_c$$

avec :

$E_L$  = Énergie de liaison [J]

$E_c$  = Énergie cinétique électronique [J]

$h$  = Constante de Planck [J. s]

$\nu$  = Fréquence de radiation [ $s^{-1}$ ]

L'intérêt de la technique est de donner des renseignements sur les états électroniques, par exemple dans les alliages ou sur les interactions métal-support. La détermination de l'état chimique des éléments dans des oxydes mixtes ou la détermination du taux de sulfuration de métaux et la mise en évidence de phases sulfures dans des catalyseurs d'hydrodésulfuration font aussi partie des études courantes aux laboratoires de recherches.

Enfin, d'autres méthodes et techniques expérimentales destinées pour l'analyse des surfaces existent. Le tableau 01 ci-dessous regroupe ces différentes techniques ainsi que celles que nous avons déjà citées, classées en fonction de la nature des sondes et du mode de détection

Sonde	Photons	Électrons	Particules	XRD Champs
<b>Photons</b>	IR-FTIR SERS XRD XRF	EPMA BIS	SDL(ions) LAMMA(ions)	
<b>Électrons</b>	XPS-ESCA SEXAFS UPS XANES	AES EELS LEED MEB RHEED		
<b>Particules</b> <b>Ions</b> <b>Neutrons</b> <b>Atomes</b>			ISS(ions) NAA(neutrons) RBS(ions) SIMS(ions) Diffract. D'He	AP
<b>Champs de force</b> <b>Electrique</b> <b>Magnétique</b>			LEED	AFM STM MFM

**Tableau 01** : Méthodes d'analyse des surfaces classées en fonction de la nature des sondes et du mode de détection.

## I.7-Conclusion

Les surfaces des matériaux solides sont devenues aujourd'hui d'un grand intérêt technologique qui est à l'origine d'une recherche toujours plus poussée pour obtenir des composants avec des propriétés physiques très bien contrôlées sur des dimensions de plus en plus réduites. Les surfaces répondent particulièrement bien à cette recherche, car elles constituées d'une quantité de matière bien moins importante que le matériau massif.

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 présenté les Effets des impuretés sur les vibrations du réseau et nous avons terminé ce chapitre en décrivant quelques techniques d'analyse des surfaces.



## II.1- Introduction

La dynamique vibrationnelle est un domaine très vaste qui regroupe l'ensemble des phénomènes statiques et dynamique 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 solides cristallin, sont placés de manière très ordonnées, ce sont les forces interatomiques qui leurs confèrent leur arrangement spécifique. Ces forces jouent les mêmes rôles que les ressorts dans un système « masse-ressort »[\[19\]](#).

Ces atomes dans les cristaux s'organisaient pour former des structures cristallines bien définies. Si on se place à 0 K, les atomes sont fixes dans leur position d'équilibre. Étant donné que cet atome est relié aux autres par les forces électrostatiques qui agissent entre eux, les autres atomes du cristal se mettront eux aussi à vibrer. Ces vibrations ont des conséquences directes sur les propriétés des solides (chaleur spécifique, fusion, conductivité thermique).

Dans ce chapitre nous allons étudier la dynamique vibrationnel d'un guide d'onde parfait quasi-bidimensionnel et établiront la matrice dynamique, qui nous permettra de calculer les courbes de dispersion, les bandes passants et interdites, qui définissent les modes vibrationnels d'une surface ordonnée.

## II.2- Description du modèle

Le modèle que nous avons choisi d'étudier est purement classique. Le système modèle est un plan carré infini formé d'atomes identiques que peuvent se déplacer dans deux directions, 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 les raisons de simplification, la distance interatomique sera toujours égale à l'unité ( $a = 1$ ).

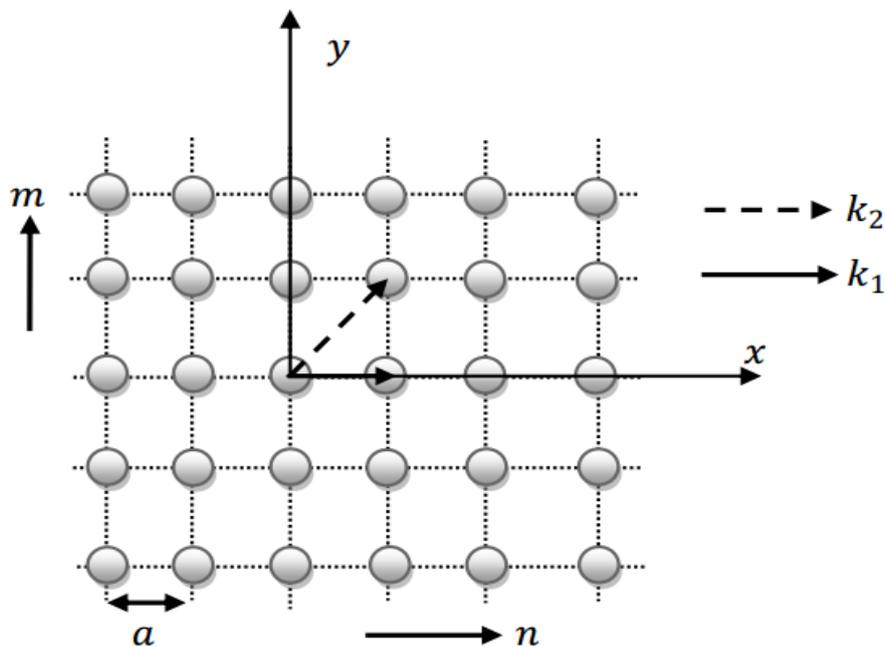


Figure II .1 : Représentation du guide d'onde parfait.

### II.3- Dynamique vibrationnelle dans les régions de volume

#### II.3.1- Les équations du mouvement

L'équation du mouvement d'un atome  $l$  dans un volume en tenant compte des premiers et seconds voisins s'écrit comme suit :

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

$\alpha$  et  $\beta$  représentent des directions cartésiennes.  $m(l)$  indique la masse de l'atome du site ( $l$ ),  $u_\alpha(l, \omega)$  le déplacement suivant la direction  $\alpha$ ,  $r_\alpha$  représente la composante cartésienne du vecteur position joignant les sites ( $l$ ) et ( $l'$ ),  $r$  le module du vecteur position,  $K(l, l')$  la constante de force entre les atomes ( $l$ ) et ( $l'$ ), et  $\omega$  est la fréquence de vibration de l'atome considéré.

Les projections de l'équation (II.1) suivant chacune des directions cartésiennes Considérées permettent de trouve 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

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

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

$$\begin{aligned} \omega^2 m u_x(m, n) = & - k_1(u_x(m, n) - u_x(m+1, n)) - k_1(u_x(m, n) - u_x(m-1, n)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - u_x(m+1, n+1)) - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - u_x(m+1, n-1)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - u_x(m-1, n+1)) - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - u_x(m-1, n-1)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - u_y(m+1, n+1)) + \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - u_y(m+1, n-1)) \\ & + \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - u_y(m-1, n+1)) - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - u_y(m-1, n-1)) \end{aligned} \quad (\text{II.2.à})$$

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

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

Après développement, devient :

$$\begin{aligned} \omega^2 m u_y(m, n) = & -k_1(u_y(m, n) - u_y(n+1)) - k_1(u_y(m, n) - u_y(n-1)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - u_x(m+1, n+1)) + \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - u_x(m+1, n-1)) \\ & + \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - u_x(m-1, n+1)) - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - u_x(m-1, n-1)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - u_y(m+1, n+1)) - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - u_y(m+1, n-1)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - u_y(m-1, n+1)) - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - u_y(m-1, n-1)) \end{aligned} \quad (\text{II.2.b'})$$

**II.3.2- 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 :

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

Ou  $\vec{q}$  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 [20,21] pour les ondes propageantes des équations(II.3) nous avons :

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

$q_x$ : 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:

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

$$\text{Où } \varphi_y = q_y \alpha = q_y r_y$$

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

Caractérisant les ondes plans des relations (II.6) et (II.7), les équations du mouvement (II.2.a) et (II.2.b) du système se transforment, respectivement, en :

Suivant (ox) :

$$\begin{aligned} \omega^2 m u_x(m, n) = & -k_1(u_x(m, n) - z u_x(m, n)) - k_1(u_x(m, n) - z^{-1} u_x(m, n)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - z e^{i\varphi_y} u_x(m, n)) - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - z e^{-i\varphi_y} u_x(m, n)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - z^{-1} e^{i\varphi_y} u_x(m, n)) - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - z^{-1} e^{-i\varphi_y} u_x(m, n)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - z e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) + \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - z e^{-i\varphi_y} u_y(m, n)) \\ & + \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - z^{-1} e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - z^{-1} e^{-i\varphi_y} u_y(m, n)) \end{aligned} \quad (\text{II.8.a})$$

Suivant (oy) :

$$\begin{aligned} \omega^2 m u_y(m, n) = & -k_1(u_y(m, n) - e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) - k_1(u_y(m, n) - e^{-i\varphi_y} u_y(m, n)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - z e^{i\varphi_y} u_x(m, n)) + \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - z e^{-i\varphi_y} u_x(m, n)) \\ & + \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - z^{-1} e^{i\varphi_y} u_x(m, n)) - \frac{k_2}{2}(u_x(m, n) - z^{-1} e^{-i\varphi_y} u_x(m, n)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - z e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - z e^{-i\varphi_y} u_y(m, n)) \\ & - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - z^{-1} e^{i\varphi_y} u_y(m, n)) - \frac{k_2}{2}(u_y(m, n) - z^{-1} e^{-i\varphi_y} u_y(m, n)) \end{aligned} \quad (\text{II.8.b})$$

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) :

$$[\Omega^2 - 2 - 2r + (z + z^{-1})(1 + \cos(\varphi_y))] u_x(m, n) + [(z - z^{-1})i r \sin(\varphi_y)] u_y(m, n) = 0 \quad (II.8)$$

Suivant (oy) :

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

Ou  $\Omega = \left(\frac{\omega^2 m}{k_1}\right)^{1/2} = \frac{\omega}{\omega_0}$  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 :

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

I : représente la matrice identité

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

$D(\varphi_y, z, r)$  : est la matrice dynamique du réseau parfait

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

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

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

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

$$\text{Det} [\Omega^2 I - D(\varphi_y, z, r)] = 0 \quad (II.11)$$

### II.3.3-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  $\Omega_v$ , ainsi que les vecteurs propres  $\vec{u}_v$  correspondants. Les modes propageants du guide d'onde plan correspondent aux solutions  $|Z| = 1$ . Ils sont habituellement donnés en fonction de  $\varphi_x$ . La fonction d'onde  $\varphi_x = r_x q_x = q_x$  représente la composante du vecteur d'onde suivant la direction  $x$  dans le réseau réciproque du fait que la direction interatomique  $a$  est égale à l'unité. En fait, les composantes  $(\varphi_x, \varphi_y)$  du vecteur d'onde déterminent l'angle d'incidence de l'onde propageante relativement aux directions  $x$  et  $y$ .

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

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

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

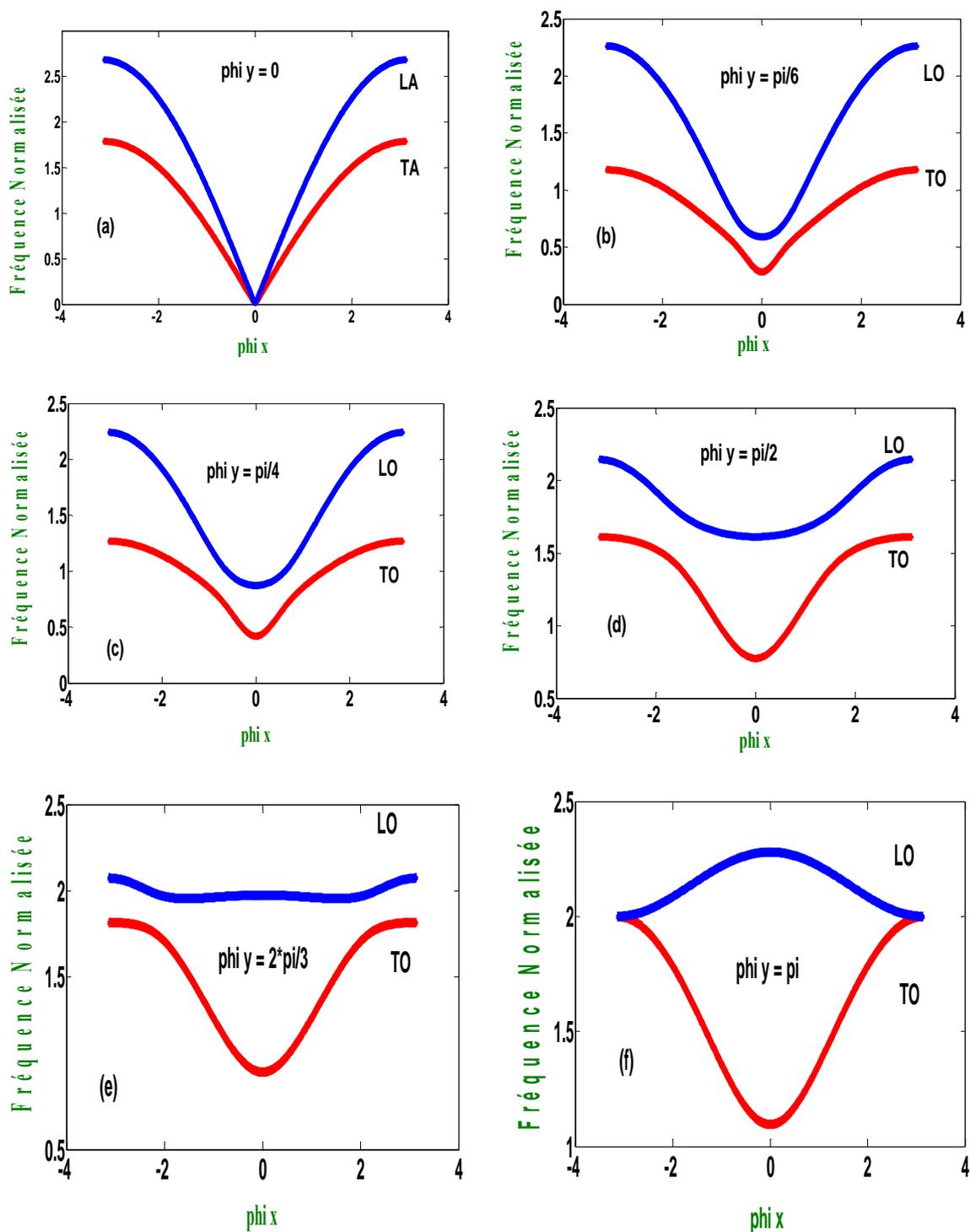


Figure II. 2: Dispersion des modes propageant du guide d'onde parfait pour différentes valeurs des valeur  $\phi_y$  ; mode 1 ; en couleur rouge, mode 2 ; en couleur bleu.

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.3.3.1- courbes de dispersion pour les différentes valeurs de $\varphi_y$

Les résultats numériques sont obtenus pour  $r = 0,3$  et pour différentes valeurs de  $\varphi_y$ .

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

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

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

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

### II.3.3.2- 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  $r$  ( $\varphi_x$ ,  $\varphi_y$  ont des valeurs fixes pour les valeurs de  $r$ ).

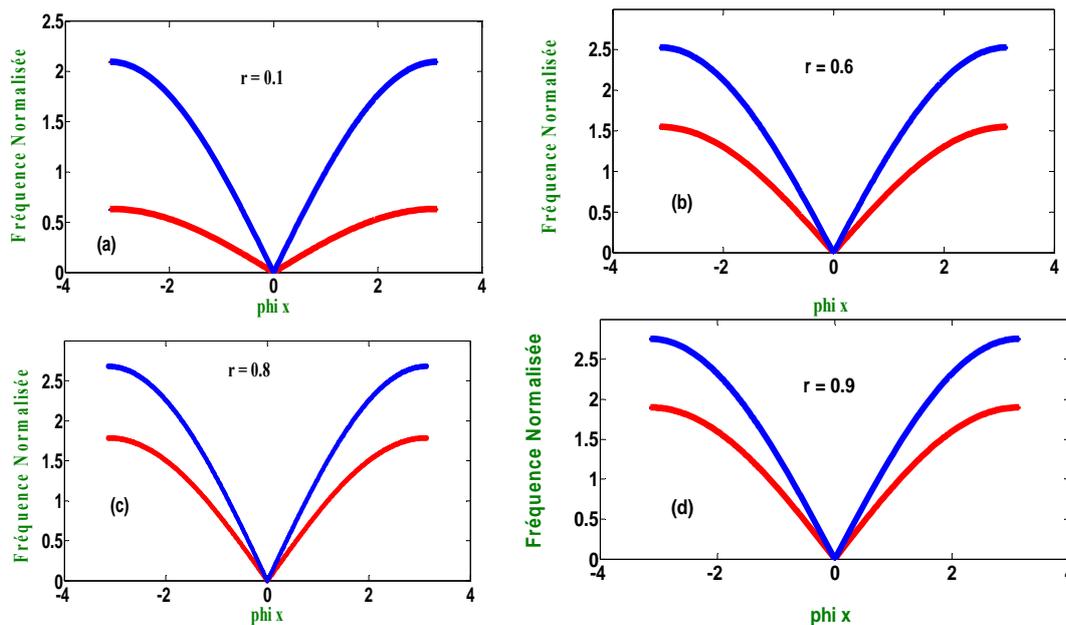
Nous observons que :

Si on augmente la valeur de  $r$  la plage de propagation pour les deux modes augmente.

Par exemple pour  $r = 0.1$  :  $\Omega_1 \in [0, 0.6325]$  et  $\Omega_2 \in [0, 0.098]$ .

$r = 0.9$  :  $\Omega_1 \in [0, 1.896]$  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  $r$  : mode 1 : en couleur rouge, mode 2 : en couleur bleu.

**II.4- Calcul des facteurs de phase**

**II.4.1- 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 :

$$\sum_{n=0}^4 A_n (\Omega, \varphi_y, r) z^n \tag{II.12}$$

Ce qui donne l'équation suivante :

$$A_0 + A_1 z + A_2 z^2 + A_3 z^3 + A_4 z^4 = 0 \tag{II.12.a}$$

La symétrie du problème en volume et la nature hermitienne de la matrice dynamique impose que si z est solution z<sup>-1</sup> l'est aussi. A<sub>n</sub> Sont des fonctions des paramètres du système Ω , φ<sub>y</sub> 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| ≤ 1, ce qui correspond à la propagation ou à l'évanescence des modes vibrationnels du plan infini.

**II.4.2- Tri des valeurs propres obtenues**

La résolution du système (II.10) permet d'aboutir à deux couples de valeurs propres z<sub>v</sub> et 1/z<sub>v</sub> En utilisant l'une ou l'autre des deux méthodes évoquées précédemment. Nous pouvons les classer en trois catégories :

$z_\mu$	$(\varphi_x)_\mu$
Réel	Imaginaire
Complexe (norme 1)	Réel
complexe	Complexe

**a-solutions réelles**

Les  $z_\mu$  réels correspondent à des modes atténués ou divergents. Les seules solutions physiques sont les modes atténués. Nous retenons donc les valeurs propres telles que  $|z_\mu| \leq 1$ .

**b-solutions complexe****. Complexes de norme unité**

Ils correspondent à des modes propagations. Ce sont ceux représentés par les courbes de dispersion de la figure II.2. Le critère de sélection est ici arbitraire : nous choisissons une fois pour toutes de garder les modes propageants dans le sens gauche  $\rightarrow$  droite. Pour cela, il faut généralement prendre le facteur  $z_\mu$  correspondant à une valeur de  $(\varphi_x)_\mu$  positive (voir tableau ci-dessus), c'est-à-dire poser la condition  $\text{Im}(z_\nu) > 0$ . Cependant, comme nous l'avons vu plus haut, la vitesse de groupe est négative en certains endroits des courbes de dispersion alors même que  $\varphi_x$  est positive. Dans ce cas, il faut prendre la valeur propre donnée par la condition  $\text{Im}(z_\nu) < 0$  pour avoir un mode se propageant dans le sens souhaité.

**.Complexes de norme différente de 1**

Ces racines sont aussi des modes atténués ou divergents. Nous retiendrons également les valeurs telles que  $|z_\mu| < 1$ .

A la fin de cette procédure de tri, nous avons donc obtenu les valeurs propres  $z_\nu = \mathbf{1.2}$ , et les vecteurs propres correspondants. Plus tard, dans le chapitre 3, nous verrons que les deux solutions propageant et évanescents sont nécessaires pour une description complète de la diffusion en présence de défauts.

**II.4.3- Facteurs de phase obtenus**

Les comportements fonctionnels des modes propres longitudinal et transversal représentés dans l'espace  $\Omega(\mathbf{z})$  sont donnés par la figure II.4. Elle représente les projections des deux courbes de la figure II.4.c sur le plan complexe  $Z$ . Les solutions propageantes se rapportent toujours aux courbes qui suivent le cercle d'équation  $|\text{Re}(z)|^2 + |\text{Im}(z)|^2 = 1$ , c'est-à-dire les solutions dont le module de  $Z$  est égal à l'unité. En revanche, les solutions évanescents correspondent aux courbes contenues à l'intérieur du cercle.

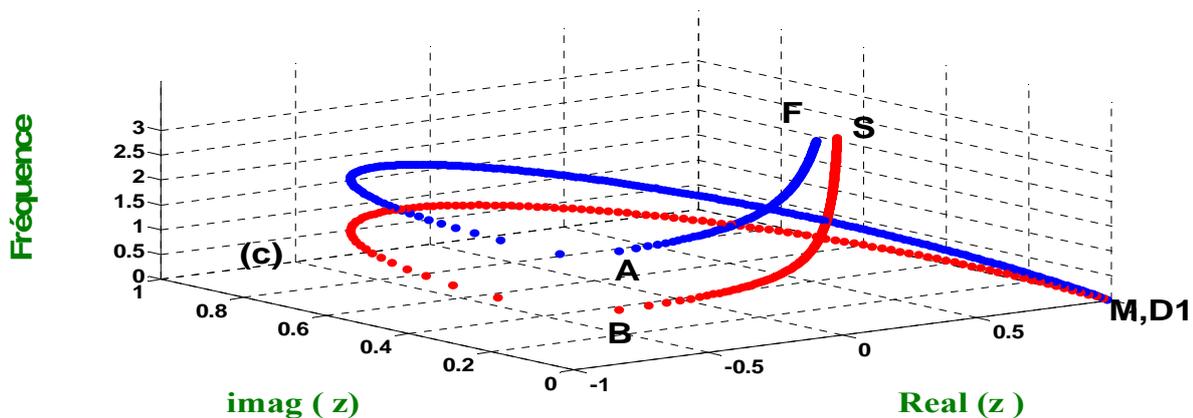


Figure II.4 : variation des facteurs de phase en fonction de fréquence  $\Omega$ .

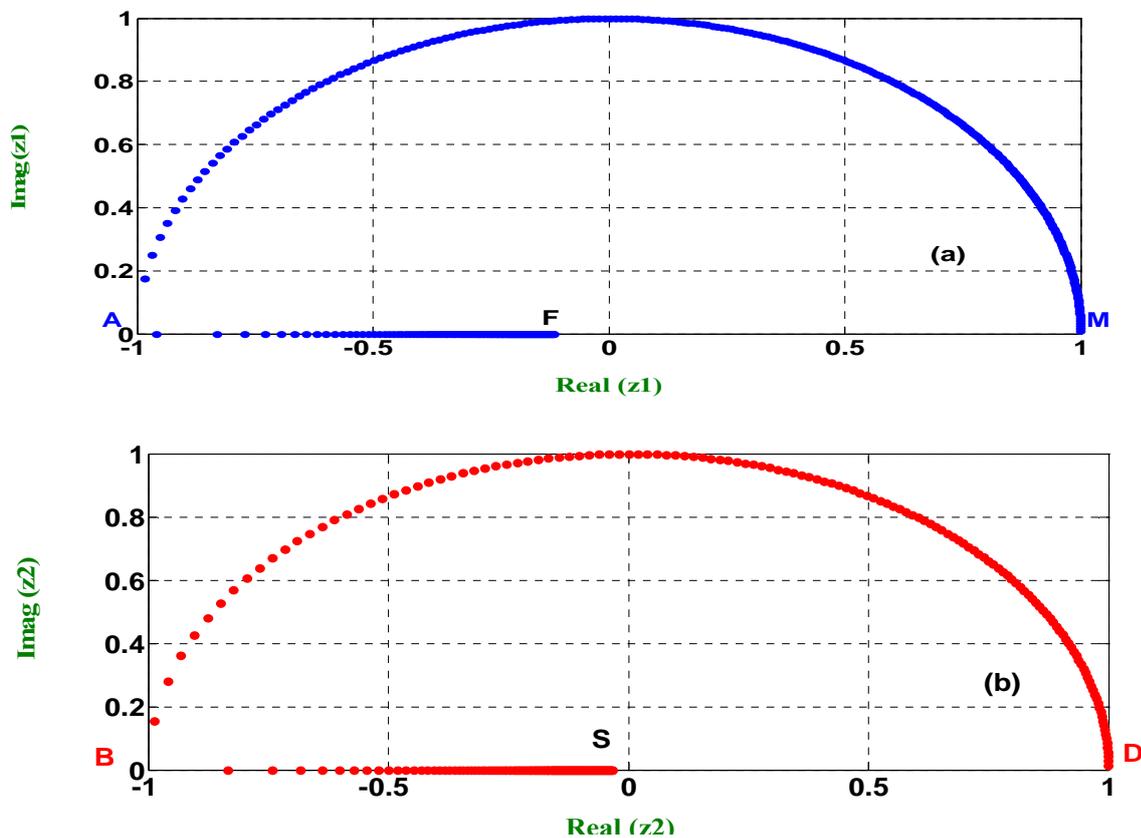


Figure. II.5 : Comportement fonctionnel de  $(Z)$  pour  $\varphi_y = 0$ , en bleu mode 1, en rouge mode 2.

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.5.a) et au point B

( $Re(z) = -0.91921, Im(z) = 0.1257$ ) pour le second (figure II.5.b), ce qui correspond respectivement aux fréquences  $\Omega = 2.61$  et  $\Omega = 1.67$  visibles sur la figure II.4.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.4). Au fur et à mesure que  $\Omega$  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 ( $\varphi_x$ ) (fig.II.2) et ( $Z$ ), (fig. II.5 et fig. II.6), nous avons marqué sur les différentes courbes les mêmes points particuliers. Les branches AM et BD des figures II.5 représentent les parties propageantes 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.5.a et II.5.b. Naturellement, ces deux branches ne peuvent se retrouver dans les courbes de dispersion puisque ces dernières correspondent à des modes propageants.

A titre d'exemple, les deux points M et D (fig. II.4) 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.6, nous montrons l'évolution des courbes  $\Omega(z)$  pour quelques valeurs caractéristiques de la phase  $\varphi_y$ . Considérons d'abord le mode transversal 1 (courbe en trait continu de la figure II.6). Par exemple, pour la valeur  $\varphi_y = \pi/6$ , il est immédiatement évanescent 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 propageant 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 évanescent sur le reste de l'intervalle (branche AF). Quant au mode longitudinal 2 (figure II.6.1), 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  $\varphi_y$  augmente. Enfin, tous les résultants obtenus par la dispersion ( $\varphi_x$ ) sont en parfait accord avec ceux donnés par la représentation spatiale  $\Omega(z)$ .

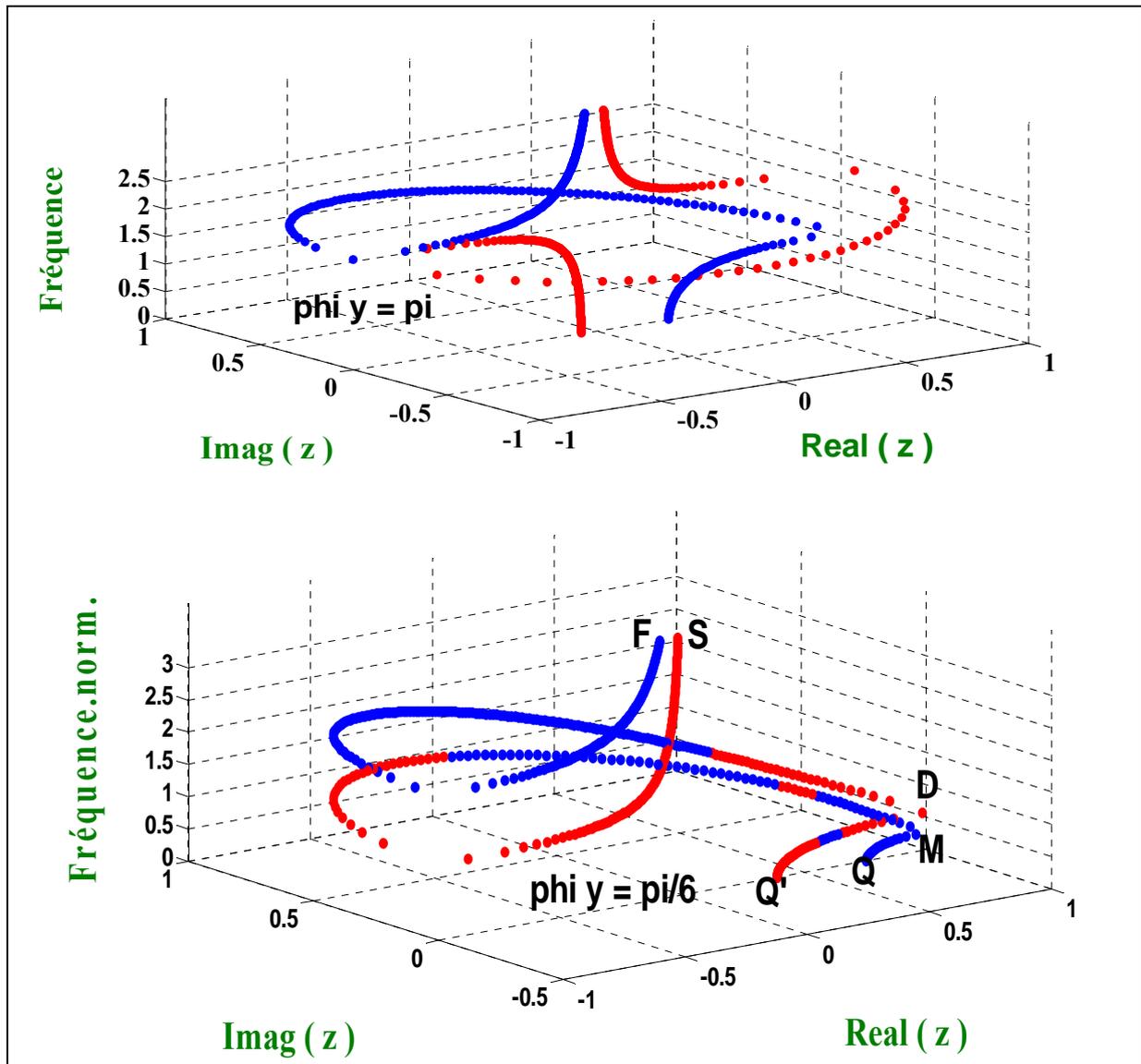
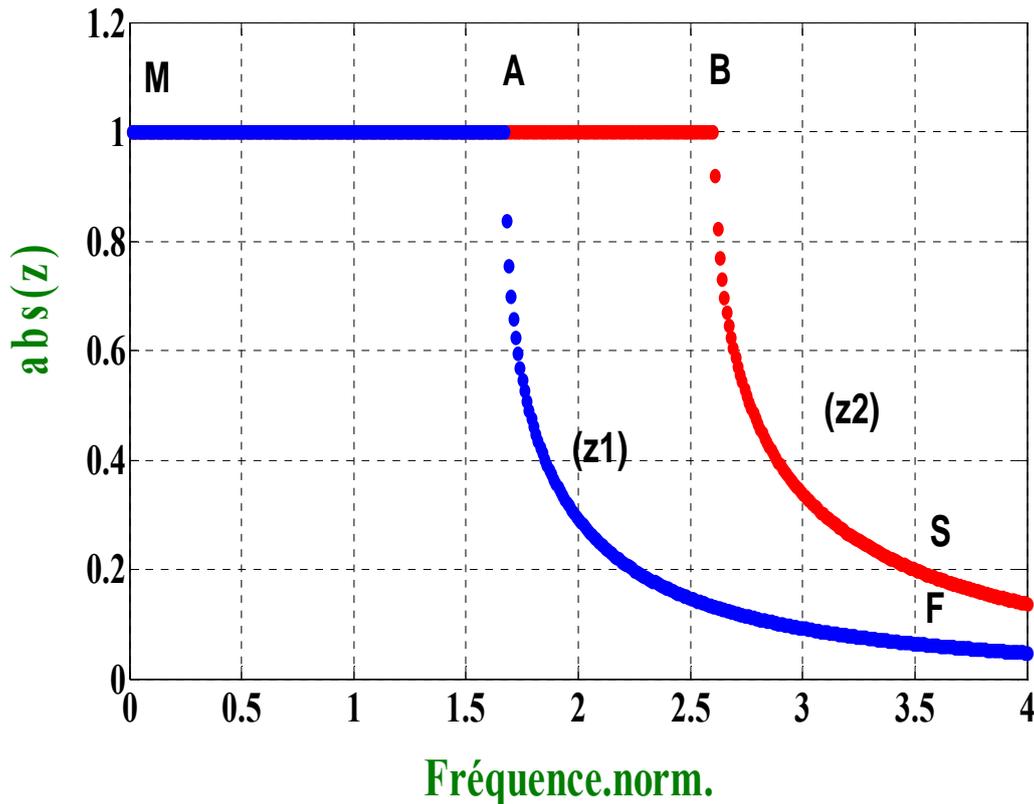


Figure. II.6 : Comportements fonctionnels  $\Omega(Z)$  pour  $\varphi_y = \pi/6$  et  $\varphi_y = \pi$ .

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. 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  $[0, 3.14]$ . Les points caractéristiques M, A, D, B, F, Q, S et Q' sont aussi reportés sur la figure II.5 toujours dans le souci de faciliter la comparaison avec les différentes figures II.2, II.3 et II.4.

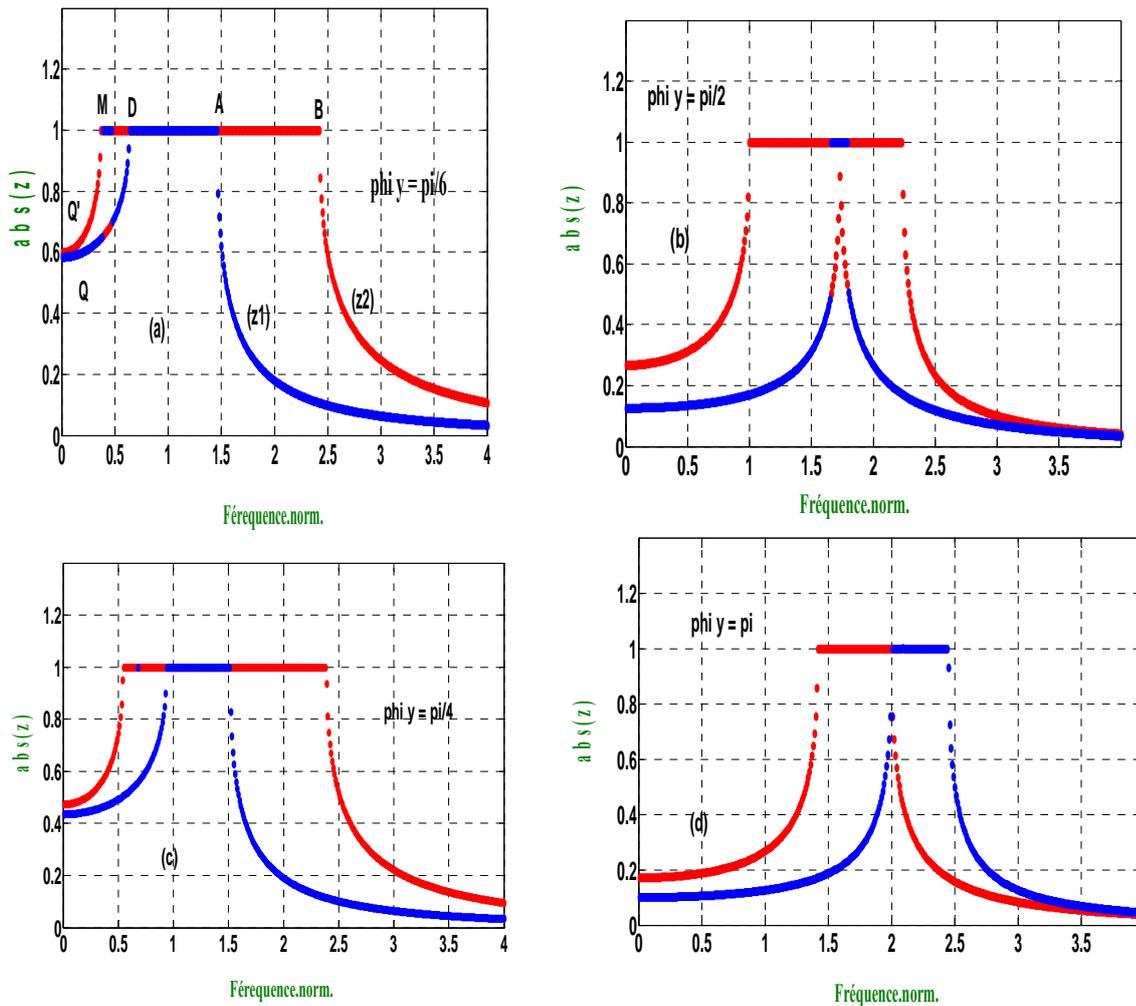


**Figure II. 7 :** Variation de module des facteurs de phase  $Z$  en fonction de la fréquence normalisée  $\Omega$ .

Sur la figure II.8, nous montrons l'évolution des modules des facteurs de phase en fonction de la fréquence normalisée pour différentes valeurs de  $\varphi_y$  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  $\varphi_y$  augmente. En même temps, cette augmentation de l'angle d'incidence  $\varphi_y$  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.5 (pour  $\varphi_y = \pi$ ).



**Figure II.8 :** Facteurs de phase en fonction de la fréquence normalisée  $\Omega$  pour les différents valeurs de  $\varphi_y$ .

## II.5- 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 l'énergie ou l'information dans le milieu. Elle est définie pour des vecteurs d'ondes  $\vec{q}$  réels par l'expression suivante :

$$v_g = \frac{\partial \Omega}{\partial q} \quad \text{soit} \quad \vec{v}_g = \overrightarrow{\text{grad}}_q(\Omega) \quad (\text{II.13})$$

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 :

$$D(\vec{q}) \cdot \vec{u} = -\Omega^2(\vec{q}) \cdot \vec{u} \quad (\text{II.14})$$

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.

### II.5.1 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

$$\vec{u}(\vec{q}) = \vec{u}(\vec{q}_0) \quad (\text{II.19})$$

Par contre 
$$D(\vec{q}) = D(\vec{q}_0) + \Delta\vec{q} \frac{\partial D}{\partial q} \quad (\text{II.20})$$

$$\Omega^2(\vec{q}) = \Omega^2(\vec{q}_0) + \Delta\vec{q} \frac{\partial \Omega^2}{\partial q} \quad (\text{II.21})$$

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  $\Omega$  :

$$\frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} = - \frac{\partial \Omega^2}{\partial q} \vec{u} \quad (\text{II.22})$$

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  $\vec{u}$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Omega}{\partial q} = - \frac{1}{2\Omega} \vec{u}^t \frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} \quad (\text{II.23})$$

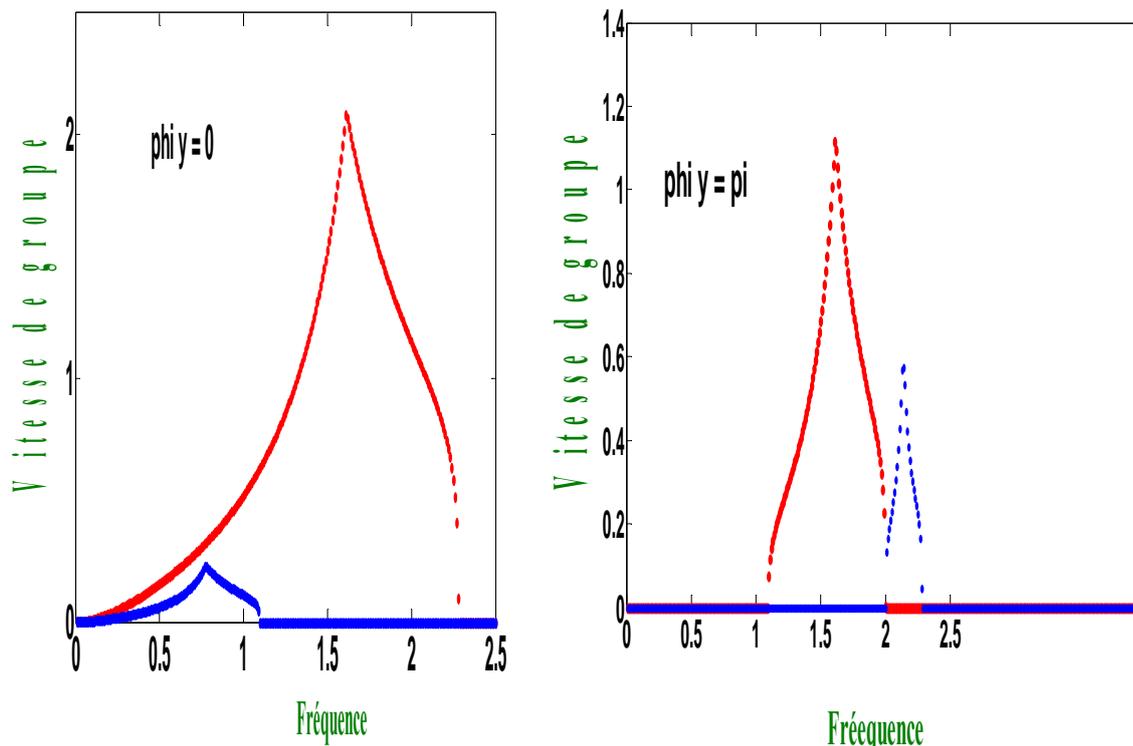
La dérivée analytique  $\frac{\partial D}{\partial q}$  se calcule à partir de l'équation (II.10)

$$\frac{\partial D}{\partial q} = \begin{bmatrix} i(1 + r_2 \cos(\varphi_y)) + \left(z - \frac{1}{z}\right) & -r_2 \sin(\varphi_y) \left(z + \frac{1}{z}\right) \\ -r_2 \sin(\varphi_y) \left(z + \frac{1}{z}\right) & i r_2 \cos(\varphi_y) \left(z - \frac{1}{z}\right) \end{bmatrix} \quad (\text{II.24})$$

d'où, 
$$V_g = - \frac{1}{2\Omega} \vec{u}^t \frac{\partial D}{\partial q} \vec{u} \quad (\text{II.25})$$

L'évolution des vitesses de groupe en fonction de la fréquence  $\Omega$ , pour  $\varphi_y = 0$ , sont représentées sur la figure (II.10) 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  $\varphi_x$ .

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.



**Figure II.9 :** Vitesse de groupe pour  $\varphi_y = 0$  et  $\varphi_y = \pi$  des deux modes 1 et 2 en fonction de la fréquence  $\Omega$ .

**II.6- Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons étudié la dynamique vibrationnelle d'un guide d'onde parfait quasi-bidimensionnels « un plan », dans lequel nous avons procédé à la détermination des équations de mouvement dans les deux directions cartésiennes d'un atome dans le plan, ce qui nous a amené à établir la matrice dynamique de système et les équations propres de système, puis en utilisant des programmes de simulation adaptés nous avons présenté les courbes de dispersions obtenues, les facteurs de phases et leurs vitesses de groupes. 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 des défauts. Nous verrons que les courbes de dispersion et l'évanescence du champ vibrationnel sont indispensables pour traiter la diffusion des phonons dans des structures bidimensionnelles.

### III.1- Introduction

Les études concernant les systèmes de basses dimensions sont un domaine de recherche en pleine expansion sur le double plan théorique et expérimental. Il ya essentiellement deux motivations principales pour l'intérêt accordé à ces systèmes mésoscopiques désordonnés, la première est leurs applications de plus en plus 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 [22].

Le présent chapitre est consacré à l'étude de l'effet de défaut sur les propriétés de diffusion d'ondes élastiques dans les systèmes de basses dimensions. Cette étude sera menée dans un cas simple de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins [22].

Actuellement, pour décrire l'impact des défauts de structure sur les propriétés de localisation et de diffusion, plusieurs méthodes théoriques et expérimentales sont proposées [23].

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 [23,25].

### III.2- Description de modèle

Le système à étudier est un réseau cristallin plan formé d'atome de masse  $M_1$  qui peuvent se déplacer dans deux directions, et dans lequel on insère une chaîne d'atome de masse  $M_2$  parallèle à l'axe  $Oy$  qui divise ce plan en deux plans semi-infinis où les coordonnées de l'atome de défaut est  $(\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2})$ . La figure III.1 schématise le modèle sur laquelle sont représentées les différentes régions d'étude composant le système : la zone de défaut, les zones de raccordement et les zones parfaites, ainsi que les différentes constantes utilisées dans l'étude.

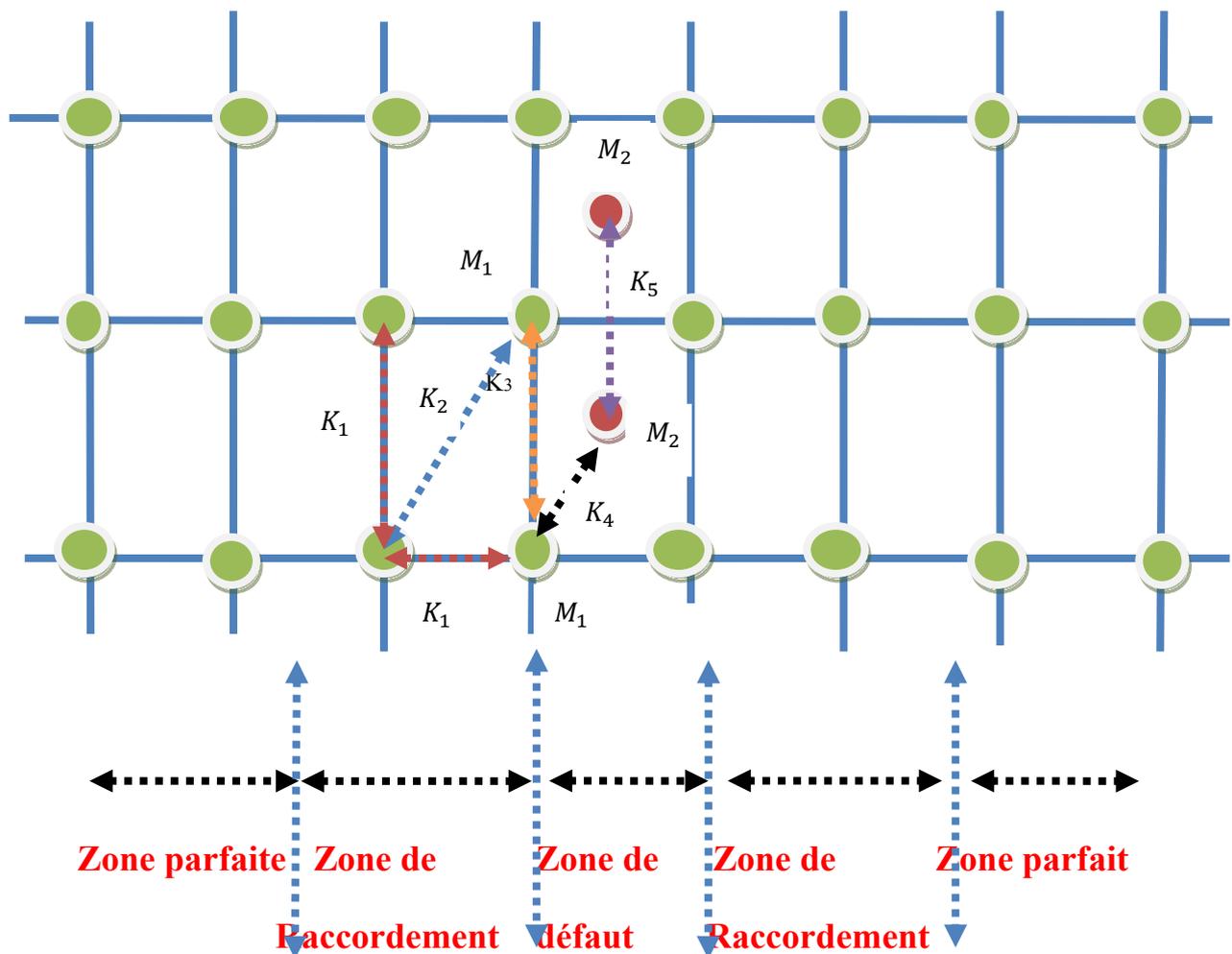


Figure III.1 : Schéma de modèle de la structure de défaut étudié

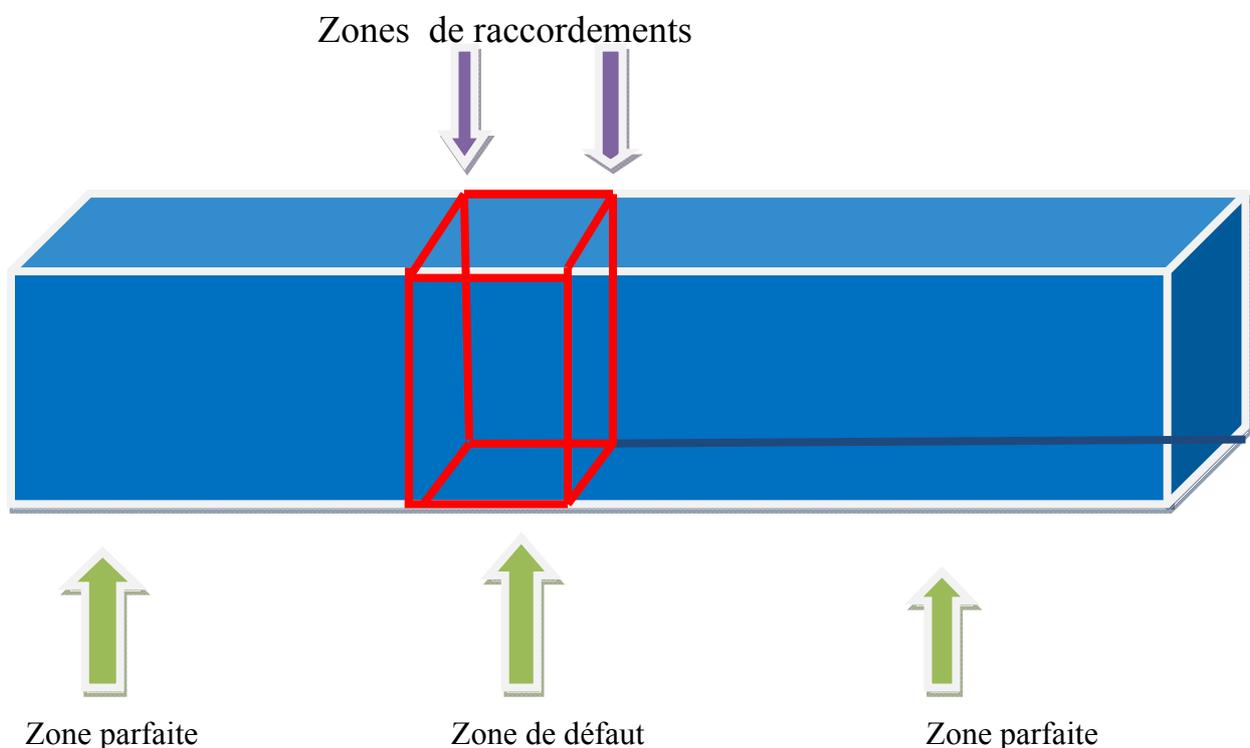
### III.3- La méthode de raccordement

Cette méthode a été introduite pour la première fois par *Feuchlwang* en 1967, lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi infini à trois dimensions [25]. Elle a été reprise en 1987 par *Szeftel* et *Khater* dans les deux articles [26, 27], le premier étant un développement du formalisme mathématique utilisé et le second une application directe aux surfaces  $Ni(100)$  et  $Ni(100) + c(2 \times 2)$  [28].

Depuis, la méthode a été appliquée dans plusieurs études, citons par exemple, l'étude de la dynamique des phonons et des magnétiques d'un certain nombre de systèmes physiques [29]. Le formalisme général décrivant le principe de la méthode est donné dans le paragraphe suivant :

### III.4- Principe de la méthode

La méthode de raccordement est une méthode analytique dont le but est de déterminer les grandeurs physique caractérisant les systèmes désordonnés. L'application de cette méthode permet d'enchaîner des relations analytiques entre les mouvements atomiques d'un système semi fini par un nombre fini d'équations en partageant le système considéré en trois régions, comme illustré sur la figure (III.1).



**Figure III.1 :** Représentation schématique d'un solide en présence d'un défaut.

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

- **La région parfaite** : ce sont les régions à droite et à gauche [26], chacune est caractérisée par sa périodicité, elle se trouve hors de tous les effets de défauts et nous permet de tracer les courbes de dispersion en volume.
- **La région du défaut (perturbée)** : c'est la région qui renferme tous les types de défauts [26]. Dans cette région on peut considérer la relaxation et la reconstruction des plans atomiques ; ce qui lui confère des paramètres structuraux spécifiques. Par conséquent, la périodicité est perturbée.
- **La région de raccordement** : elle est composée des atomes situés entre les régions parfaites et les atomes de la zone perturbée. Elle permet dans la modélisation théorique de raccorder analytiquement les modes induits par les défauts aux états de vibration évanescents de la zone parfaite [25].

### III.5- La matrice dynamique du système

L'écriture des équations du mouvements pour les atomes du défaut (0,0), (1/2,1/2), (1,0), (-1,0) ainsi que les atomes aux frontières (2,0), (-2,0) représentant la zone de raccordement de part et d'autre de la région de défaut, nous permet de définir la matrice dynamique de système donné ci-dessous :

$$D_f = \begin{bmatrix} e1 & 0 & e2 & e3 & e4 & 0 & 0 & 0 & e5 & e6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e7 & e3 & e2 & 0 & 0 & 0 & 0 & e6 & e8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e9 & e10 & e11 & 0 & e9 & -e10 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e12 & e9 & 0 & e12 & -e10 & e9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ e4 & 0 & e2 & -e3 & e1 & 0 & e5 & -e6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -e3 & e2 & 0 & e7 & e8 & e8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e5 & e6 & e13 & 0 & 0 & 0 & e5 & -e6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e6 & e8 & 0 & e14 & 0 & 0 & -e6 & e8 & 0 & 0 \\ e5 & -e6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e13 & 0 & 0 & 0 & e5 & e6 \\ -e6 & e8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e14 & 0 & 0 & e6 & e8 \end{bmatrix}$$

dont les éléments de cette matrice sont :

$$\begin{aligned} e1 &= (\Omega^2 - (\alpha + \beta + 1 + r)); \\ e2 &= \alpha (1 + \exp(-i\varphi_y)) / 2; \\ e3 &= \alpha (1 - \exp(-i\varphi_y)) / 2; \\ e4 &= \beta; \\ e5 &= 1 + r \cos(\varphi_y); \\ e6 &= -r i \sin(\varphi_y); \\ e7 &= (\Omega^2 - (\alpha + 2\beta(1 + \cos(\varphi_y) + r))); \\ e8 &= r \cos(\varphi_y); \\ e9 &= \alpha (1 + \exp(i\varphi_y)) / 2; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
e_{10} &= \alpha (1 - \exp(i\varphi_y))/2; \\
e_{11} &= ((\Omega^2 e^{-2\alpha}); \\
e_{12} &= ((\Omega^2 - (2\alpha + 2\lambda(1 + \cos(\varphi_y) + r))); \\
e_{13} &= (\Omega^2 - (2 + 2r)); \\
e_{14} &= (\Omega^2 + (2r + 2(1 + \cos(\varphi_y))));
\end{aligned}$$

$$\text{On à: } r = \frac{k_2}{k_1}, \quad \Omega^2 = \frac{mw^2}{k_1}, \quad \alpha = \frac{k_3}{k_1}, \quad \beta = \frac{k_4}{k_1}, \quad \gamma = \frac{k_5}{k_1} \quad \text{et} \quad e = \frac{M_2}{M_1}.$$

### III.6. La matrice de raccordement

L'objectif de cette partie, dans le cadre de notre étude, est d'établir les relations de raccordement entre les déplacements vibrationnels des atomes appartenant au domaine de défaut et les champs vibrationnels des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits. La connaissance simultanée des facteurs de phase ( $Z, 1/Z$ ), déterminés à partir de la matrice dynamique en volume (système parfait) du système tubulaire quasi-2D, permet de définir la matrice de raccordement, pour cela nous allons représenter les déplacements atomiques des sites appartenant à la région de raccordement par une combinaison linéaire de vecteurs  $\{RT\}$  définissant un espace fini. Dans le cas présent, il y'a en effet deux régions de raccordement différentes, c'est pour cela que nous allons définir deux bases distinctes  $\{R^+\}$  et  $\{R^-\}$ , la première caractérise la région de raccordement gauche et la seconde caractérise la région de raccordement droite. 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, on peut décrire ses déplacements vibrationnels de la manière suivante [30-31-32] :

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

De même, pour un atome de la région droite

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

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

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

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

Le vecteur  $|u\rangle$  des déplacements atomiques des sites de la maille élémentaire de la zone de défaut (voir la figure (III.1)) peut se décomposer en deux parties :  $|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix}$ .

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

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

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_d & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} \quad (III.3)$$

Où  $I_d$  est une matrice identité de dimension ( $n \times n$ ) ; et  $R_1, R_2$ , sont des sous matrices de dimension ( $2 \times 2$ ). Ces dernières sont exprimées en fonction des ( $Z_1, Z_2$ ) et de poids pondérés associés aux modes (cofacteurs).

$R$  : est appelée matrice de raccordement, ses dimensions sont ( $14 \times 10$ ).

Le produit de la matrice dynamique du système perturbé ( $D$ ) par la matrice de raccordement ( $R$ ) donne une matrice carrée  $S$  ( $10 \times 10$ ).

$$D_d(10 \times 14) [D_R(14 \times 10)] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = S(10 \times 10) \cdot \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |R\rangle \\ |T\rangle \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (III.4)$$

La relation  $\det([S(10 \times 10)]) = 0$  donne les états vibrationnels en présence du défaut.

### III.7- 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 tubulaire semi-infini du côté droit, l'autre est réfléchi sur le système tubulaire semi-infini du côté gauche, ce qui donne naissance à un champ vibrationnel de déplacement dans les

deux demi – espaces. La composante cartésienne  $\alpha$  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 [33,34,35].

Les déplacements atomiques dans les deux directions cartésiennes d'un site atomique appartenant à la structure tubulaire (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 :

$$u'_\alpha(n, m, k) = [Z(\bar{\nu})]^n \cdot p(\alpha, i') + \sum_i R_{ii'} \cdot [Z(\bar{\nu})]^{-n} \cdot \bar{p}'(\alpha, i) \quad \text{avec } n < 0 \quad (\text{III.5})$$

De la même manière, pour un site atomique du système de côté droit (D), les déplacements

atomiques peuvent s'exprimer ainsi :

$$u_\alpha(n, m, k) = \sum_j T_{ij} \cdot [Z(\bar{\nu})]^{+n} \cdot \bar{p}'(\alpha, j) \quad \text{avec } n > 0 \quad (\text{III.6})$$

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 tubulaire 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  $(\alpha, i)$  et  $\bar{p}'(\alpha, j)$  représentent les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres des matrices de volume [22].

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 [30].

Comme nous l'avons signalé auparavant, les quantités  $T_{\bar{\nu}\bar{\nu}}$  et  $R_{\bar{\nu}\bar{\nu}}$  introduites dans les équations précédentes, permettent d'obtenir toutes les grandeurs intéressantes [36-37]. Parmi ces grandeurs, on peut citer les coefficients de réflexions et de transmission.

### III.7.1- 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 [22].

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.5) et (III.6), on peut alors, écrire les équations de mouvements des

atomes formant le défaut, et obtenir un système d'équations inhomogènes de la forme suivante [38] :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} + |IH\rangle \quad (III.7)$$

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

En multipliant l'équation (III.7) par la matrice  $[D]$  on obtient alors :

$$[D] |u\rangle = [D] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [D] [R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} + [D] |IH\rangle \quad (III.8)$$

Ce qui peut se résumer à :

$$[D] [R] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [S] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} = - [D] |IH\rangle \quad (III.9)$$

Ou encore

$$\begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} = - [S]^{-1} [D] |IH\rangle \quad (III.10)$$

La solution du système d'équations (III.10) 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  $\Omega$ .

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 [39].

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

$$\mathbf{r}_{ii'} = \frac{v_{i'}}{v_i} |R_{ii'}|^2 \quad (III.11)$$

Et le coefficient de transmission par :

$$\mathbf{t}_{ij} = \frac{v_j}{v_i} |T_{ij}|^2 \quad (III.12)$$

Notons que  $\mathbf{v}_i$ , 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  $\Omega$  à l'aide des expressions suivantes [36].

$$\mathbf{r}_i = \sum_{i'} r_{ii'} \quad (III.13)$$

$$\mathbf{t}_j = \sum_j t_{ij} \quad (III.14)$$

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 :

$$S = \sum_i (t_i + r_i) = 1 \quad (\text{III.15})$$

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

### III.7.2- 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 [31], la conductance phononique d'un défaut pour une fréquence  $\Omega$  donnée [20]. Cette conductance notée  $\sigma(\Omega)$  est notamment définie pour une propagation depuis le double plan côté gauche vers le double plan côté droit :

$$\sigma(\Omega) = \sum_{ij} t_{ij} \quad (\text{III.16})$$

Où la somme est effectuée sur tous les modes se propageant à la fréquence  $\Omega$ .

Pour un guide d'ondes parfait (non perturbé) ; sans défaut  $\sigma$  est un entier qui donne le nombre de modes propageants à la fréquence  $\Omega$  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  $\sigma$  idéal et sa valeur provenant des processus de diffusion élastique sur les défauts, cet écart donne une mesure de la réflexion. La conductance  $\sigma$  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 de transmission individuels [22].

## III.7.3 Résultats et discussions

### III.7.3.1 Coefficients de transmission et de réflexion

Les résultats relatifs aux coefficients de transmission et de réflexion en fonction des fréquences normalisées  $\Omega$  sont tracés sur les figures (III.1.1-III.1.2), pour les trois valeurs de  $\alpha$  (le rapport des constantes de forces entre un atome de défaut et un atome de réseau), allant de l'adoucissement ( $\alpha = 0.2$ ) au durcissement ( $\alpha = 1.5$ ) en passant par l'homogénéité ( $\alpha = 1.0$ ), et cela pour les deux modes de vibration transversal et longitudinal, que nous avons montré leurs existence au chapitre II, sachant que nous avons fixé les valeurs des autres paramètres de système. La relation théorique bien connue entre les coefficients de transmission et de réflexion

$t + r = 1$  est vérifiée. Cette condition a été utilisée comme un moyen de contrôle de nos résultats numériques.

Notons que ces courbes existent sur la totalité du domaine de la plage de propagation et pour les vitesses de groupe non nulles. Sur la quasi-totalité des courbes de ces figures, on constate que l'onde est totalement transmise aux très basses énergies, voir 1 quand  $\Omega$  tend vers 0. Ce qui peut s'expliquer qu'à basse énergie si comme le défaut n'existe pas, et l'onde se propage facilement. Mais elle diminue au fur et à mesure que l'énergie augmente, et ils tendent vers 0 quand  $\Omega$  tend vers les grandes énergies.

De façon générale, la présence de défaut donne lieu à un décroissement de la probabilité de transmission 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  $\Omega$  voisines de zéro, le coefficient  $t \rightarrow 1$  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.

Les figures (III.2.1-III.2.2) représentent les coefficients de réflexion et de transmission dans les deux modes de vibration dans le cas d'une variation des valeurs des constantes de forces entre les atomes premiers voisins de réseau sous l'effet de la présence de défaut allant de l'adoucissement au durcissement. Nous remarquons pour des valeurs croissantes de  $\beta$ , l'apparition progressive d'une résonance type Fano dans le mode 1 dans les basses fréquences aux alentours de  $\Omega = 0.90$ . Un tel phénomène s'explique par l'interaction d'un état localisé discret créé par le défaut avec le guide d'onde parfait. La deuxième observation incontestable est le comportement particulier de mode 2, où on trouve une transmission totale des phonons dans

son intervalle de propagation et ne montre aucune résonance de Fano, ceci s'explique par le fait qu'il est fortement énergétique, comparé à l'autre mode. Par conséquent, il joue un rôle important dans la conductance phononique.

Les figures (III.3.1-III.3.2) montrent également les différents coefficients de transmission et de réflexion dans les deux modes de vibration dans le cas d'un durcissement des constantes de forces entre les atomes de défaut en fonction de la fréquence sans dimension  $\Omega$ . Nous observons pour les valeurs croissantes de  $\gamma$  aucun changement dans le spectre de transmission et de réflexion pour le mode 1. En revanche, pour le mode longitudinal, c'est le déplacement léger de pic de résonance des basses fréquences vers les hautes fréquences.

Les différentes figures (III.4.1-III.4.2) montrent l'allure des coefficients de transmission et de réflexion en fonction de la fréquence lorsque le rapport de la masse des atomes de défaut à la masse des atomes du volume change ( $M_2 = 0.5 M_1$  ;  $M_2 = M_1$  ;  $M_2 = 1.5 M_1$ ). D'après ces figures on remarque que les résonances se déplacent légèrement des hautes fréquences vers les basses fréquences. Il n'est pas étonnant qu'un défaut lourd induise la création d'une vibration de faible fréquence. En effet un résultat bien connu de mécanique élémentaire indique que la fréquence propre d'un oscillateur harmonique est lié à sa masse par  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ . Même si notre système est plus compliqué, cette relation continue à donner une information utile.

### III.7.3.2 Conductance phononique

Nous rappelons que la conductance analytiquement est définie comme étant la contribution de l'ensemble des modes à la transmission d'ondes de phonons. Autrement dit, c'est la somme des coefficients de transmission individuel du système se propageant à une fréquence  $\Omega$  donnée. Physiquement, elle permet de connaître l'aptitude du système à laisser passer les phonons. Elle est appelée aussi la transmittance du système. La conductance présente l'inconvénient de perdre l'information sur l'apport de chaque mode de vibration. Néanmoins, elle est accessible expérimentalement, du moment qu'on peut exciter et détecter les vibrations des atomes à une fréquence donnée.

Sur les Figures (III.5.1-2-3-4), nous avons tracé pour le cas de défaut étudié, l'allure des conductances phononiques  $\sigma(\Omega)$ , dans les différentes possibilités de l'environnement atomique, en fonction de l'énergie de vibration  $\Omega$ . Nous avons représenté aussi celle du guide d'ondes parfait sur la même courbe, pour faire une comparaison et noter les diverses modifications

induites par l'existence des inhomogénéités dans le film mince. La courbe du guide d'ondes parfait,  $\sigma(\Omega)$ , est sous forme d'escalier, où chaque palier correspond au nombre de modes propagants dans l'intervalle de fréquence considéré.

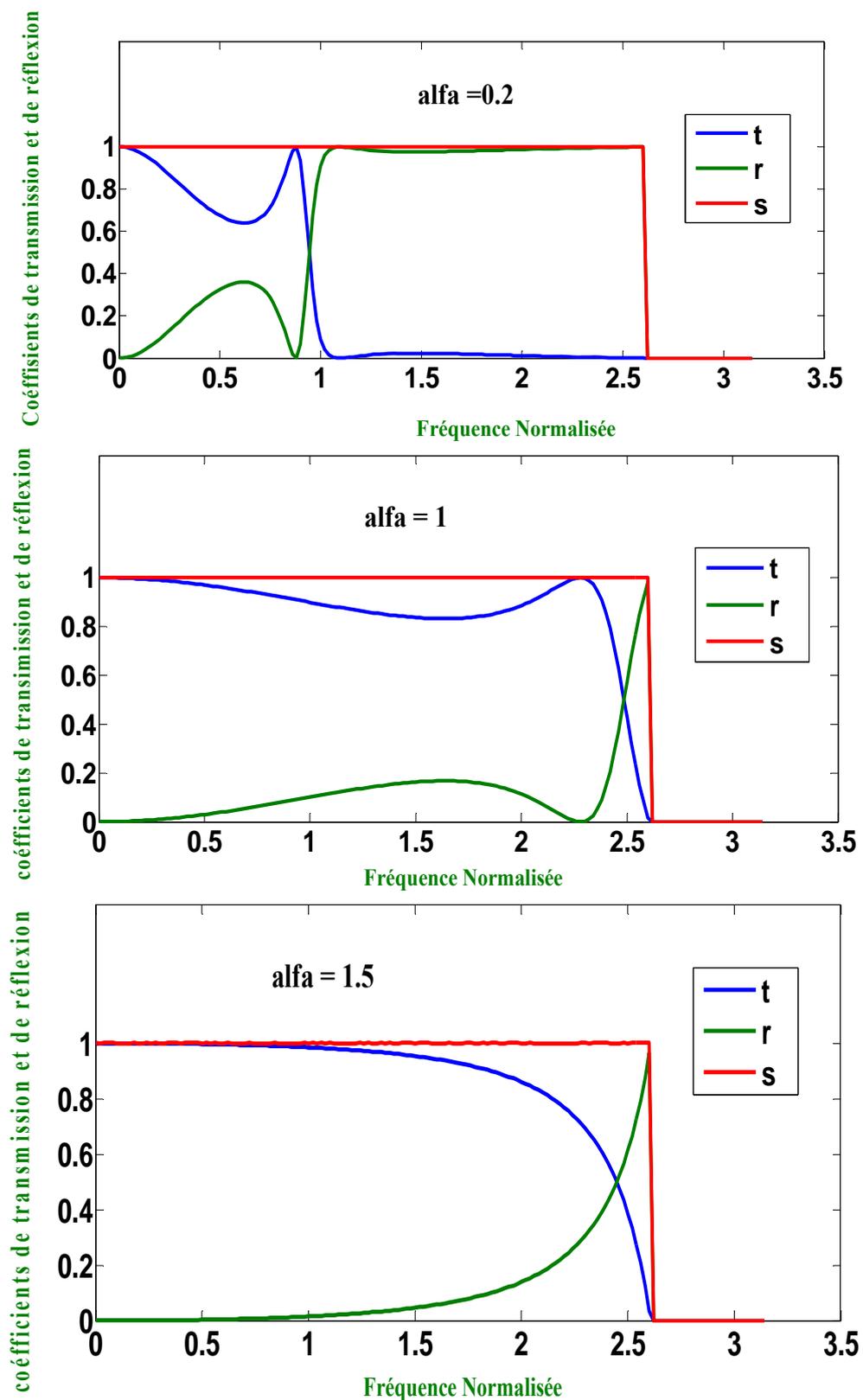
On remarque que la conductance ne dépasse l'unité que dans la plage de fréquences où les deux modes se recouvrent. Au-delà de la limite du mode transversal (1), les deux courbes de conductances présentent exactement la même allure que celle des coefficients de transmission du mode longitudinal (2). Pour la conductance du réseau parfait, la transmission est totale dans les deux modes, c'est la raison pour laquelle la conductance est égale à 2 car les deux modes sont excités simultanément, en d'autres termes il y a recouvrement et la conductance est égale à l'unité ailleurs.

La figure (III.5.1) montre l'allure de la transmission totale (conductance), du système perturbé par le défaut en fonction de l'énergie de diffusion obtenus pour un angle d'incidence  $\varphi_y = 0$ , et dans le cas des paramètres  $\alpha = 0.2$ ;  $\alpha = 1$  et  $\alpha = 1.5$ . Cette conductance (ou transmittance) est définie par la somme des coefficients de transmissions sur tous les modes propagant du système parfait, et elle est très sensible aux paramètres du système. Nous remarquons que dans le cas d'un adoucissement des contraintes au niveau du défaut ( $\alpha$  diminue), le décalage des courbes de la conductance phononique vers les basses énergies.

La figure (III.5.2) montre l'allure de la conductance en fonction de l'énergie de diffusion obtenus dans le cas de paramètre  $\beta = 0.2$ ;  $\beta = 1$  et  $\beta = 1.5$  qui représente le rapport des constantes de forces de réseau perturbé à celles de réseau parfait. Nous remarquons aussi que dans le cas d'un adoucissement des contraintes au niveau du réseau atomique ( $\beta$  diminue), le décalage des courbes de la conductance phononique vers les basses énergies.

La figure (III.5.3) montre l'allure de la conductance en fonction de l'énergie de diffusion obtenus dans le cas de paramètre  $\gamma = 0.2$ ;  $\gamma = 1$  et  $\gamma = 1.5$  qui représente le rapport des constantes de forces entre les atomes de défaut à celles de réseau parfait. On remarque que la conductance est peu sensible à la variation de  $\gamma$ .

Sur la figure (III.5.4) nous avons représenté l'allure de la conductance phononique en fonction de l'énergie de diffusion obtenus dans le cas de paramètre  $e = 0.5$ ;  $e = 1$  et  $e = 1.5$  qui représente le rapport des masses entre les atomes de défaut à celles de réseau parfait. On remarque que la conductance est très sensible à la variation de la masse de défaut lorsqu'on passe d'un défaut léger à un défaut lourd.



**Figure III.1.1 :** Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion de mode 1 pour les différents valeurs de  $\alpha$ .

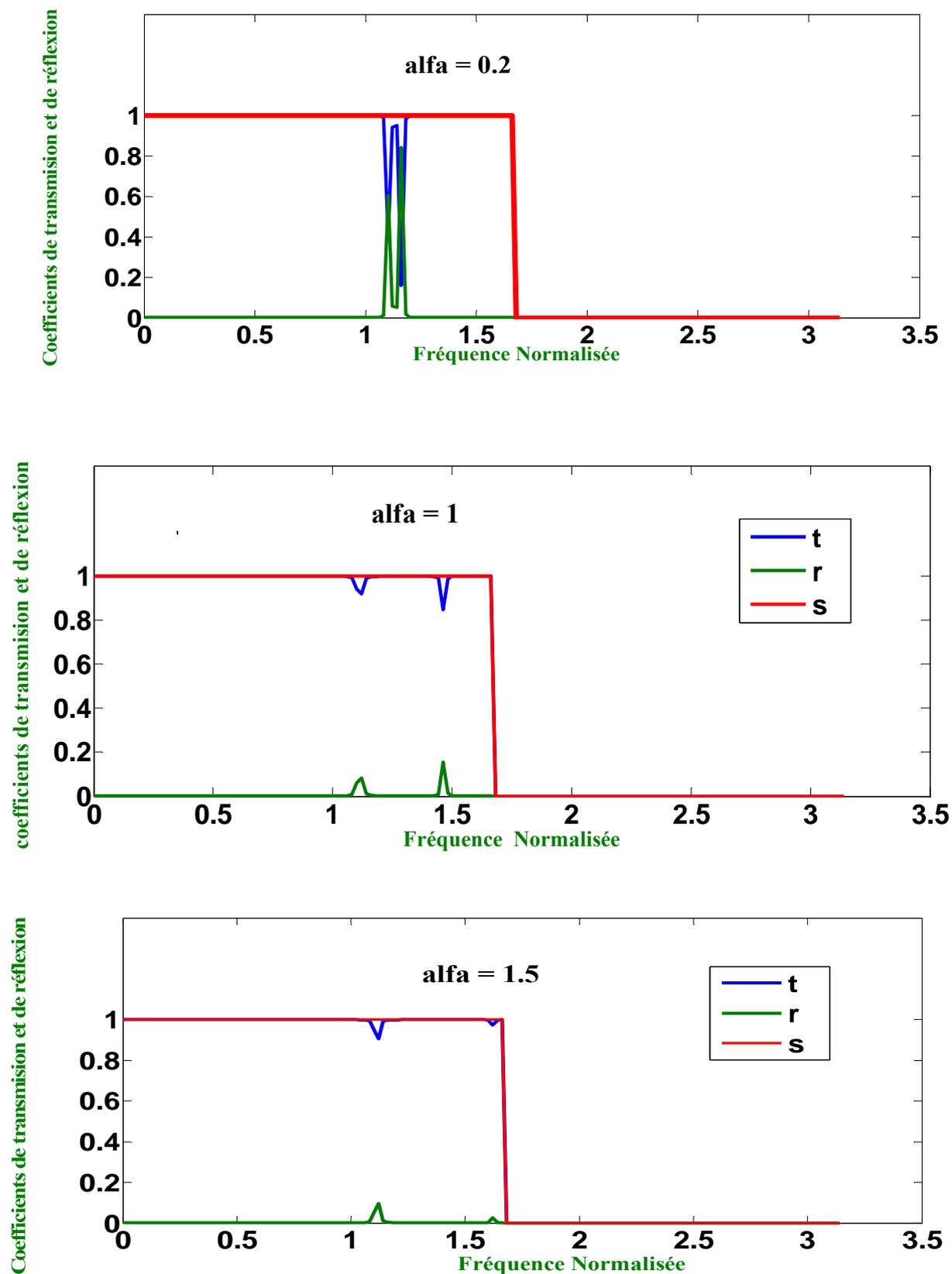


Figure III.1.2: Courbes de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différents valeurs de  $\alpha$ .

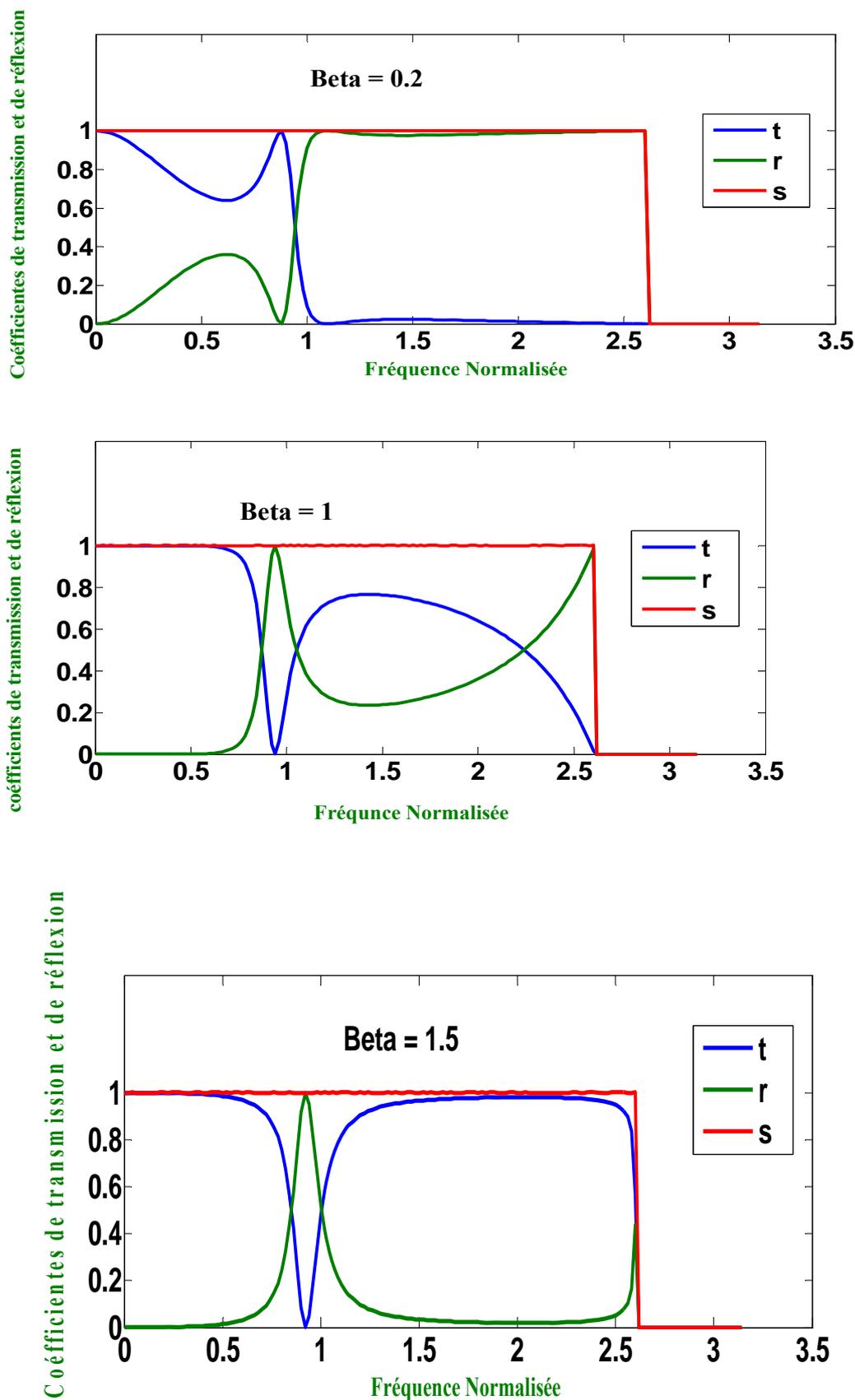


Figure III.2.1: Courbes de réflexion et de transmission de mode 1 pour les différents valeurs de  $\beta$ .

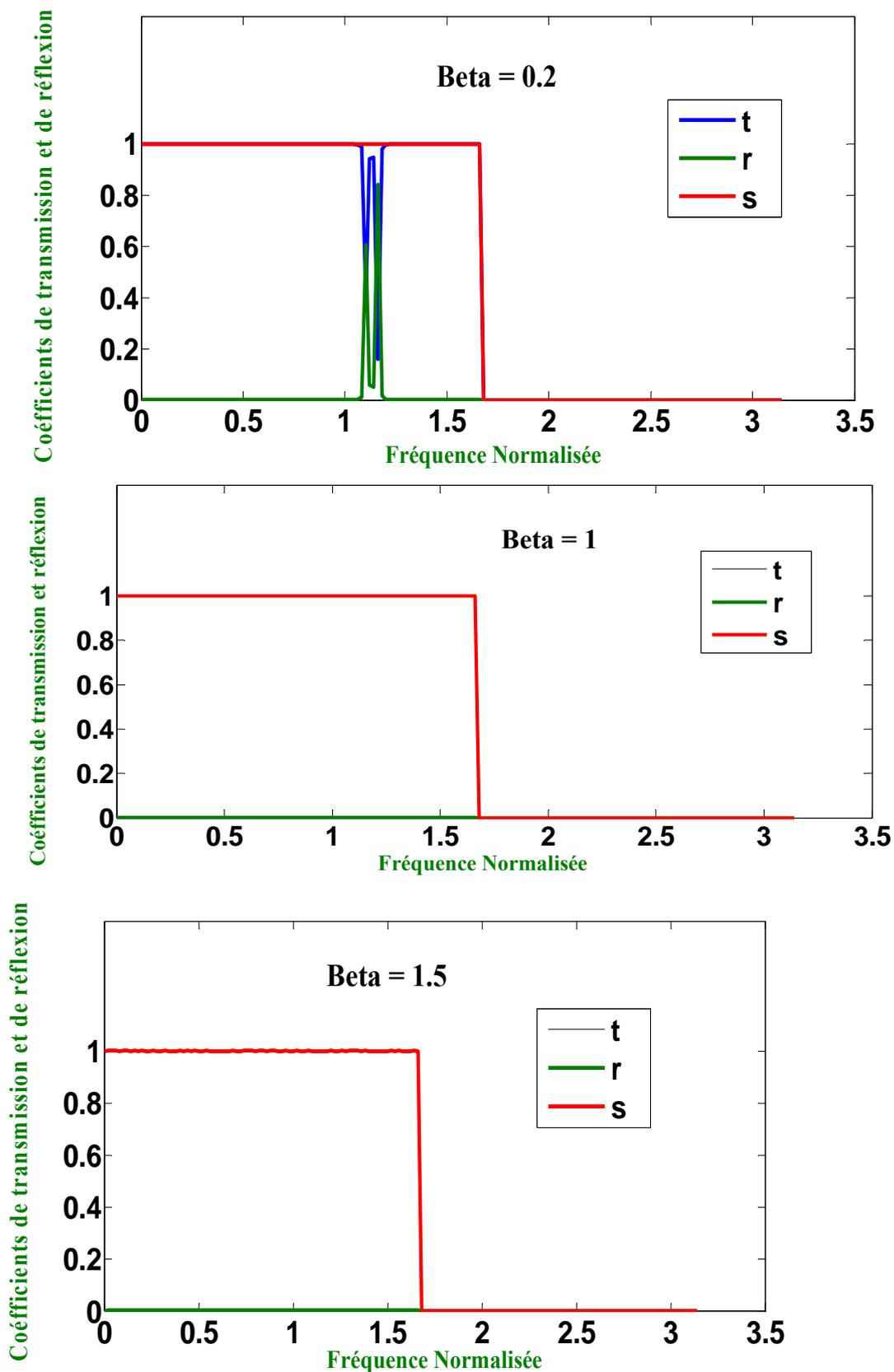


Figure III.2.2 : Courbes de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différents valeurs de  $\beta$ .

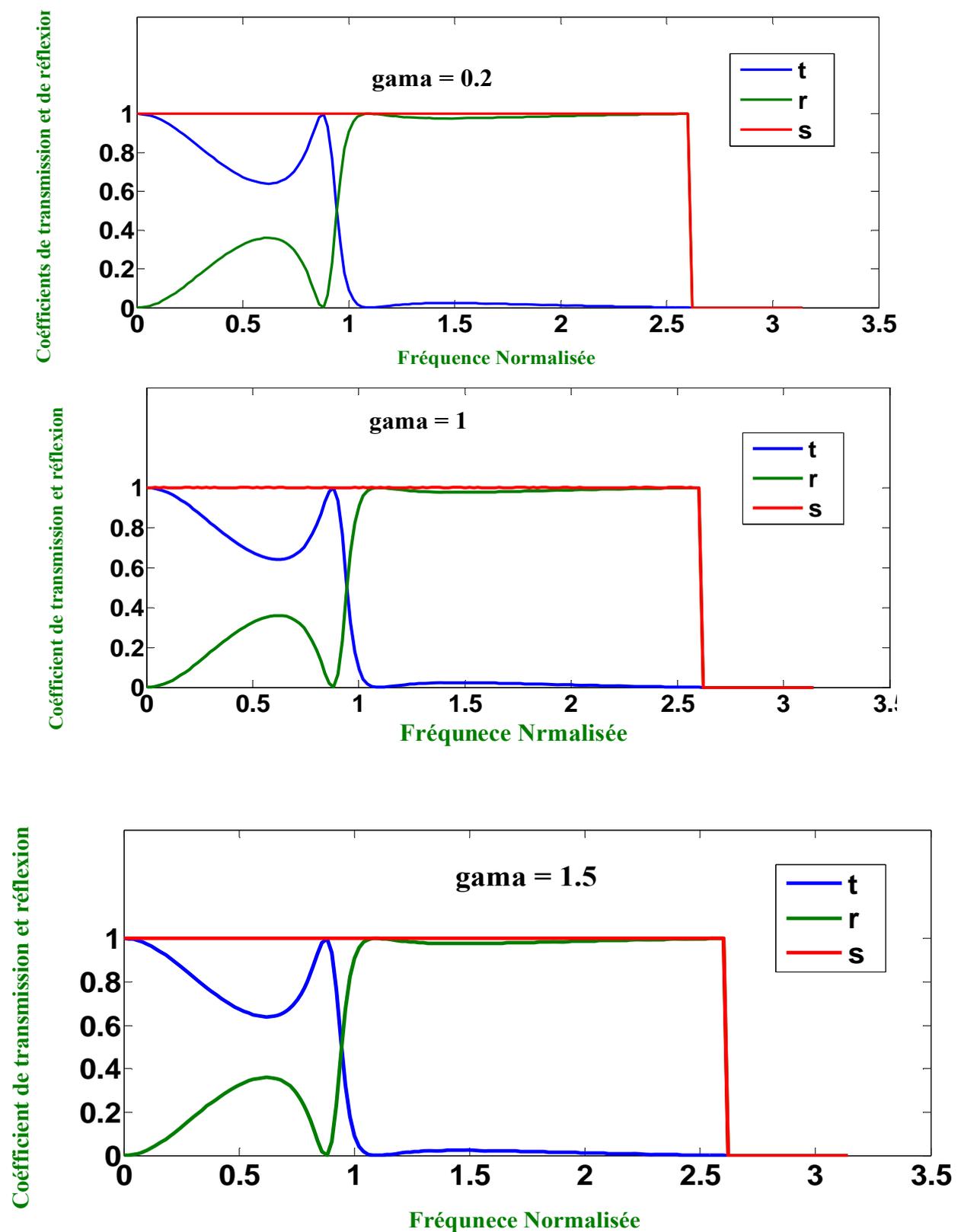


Figure III.3.1: Courbes de réflexion et de transmission de 1 mode pour les différents valeurs de

$\gamma$ .

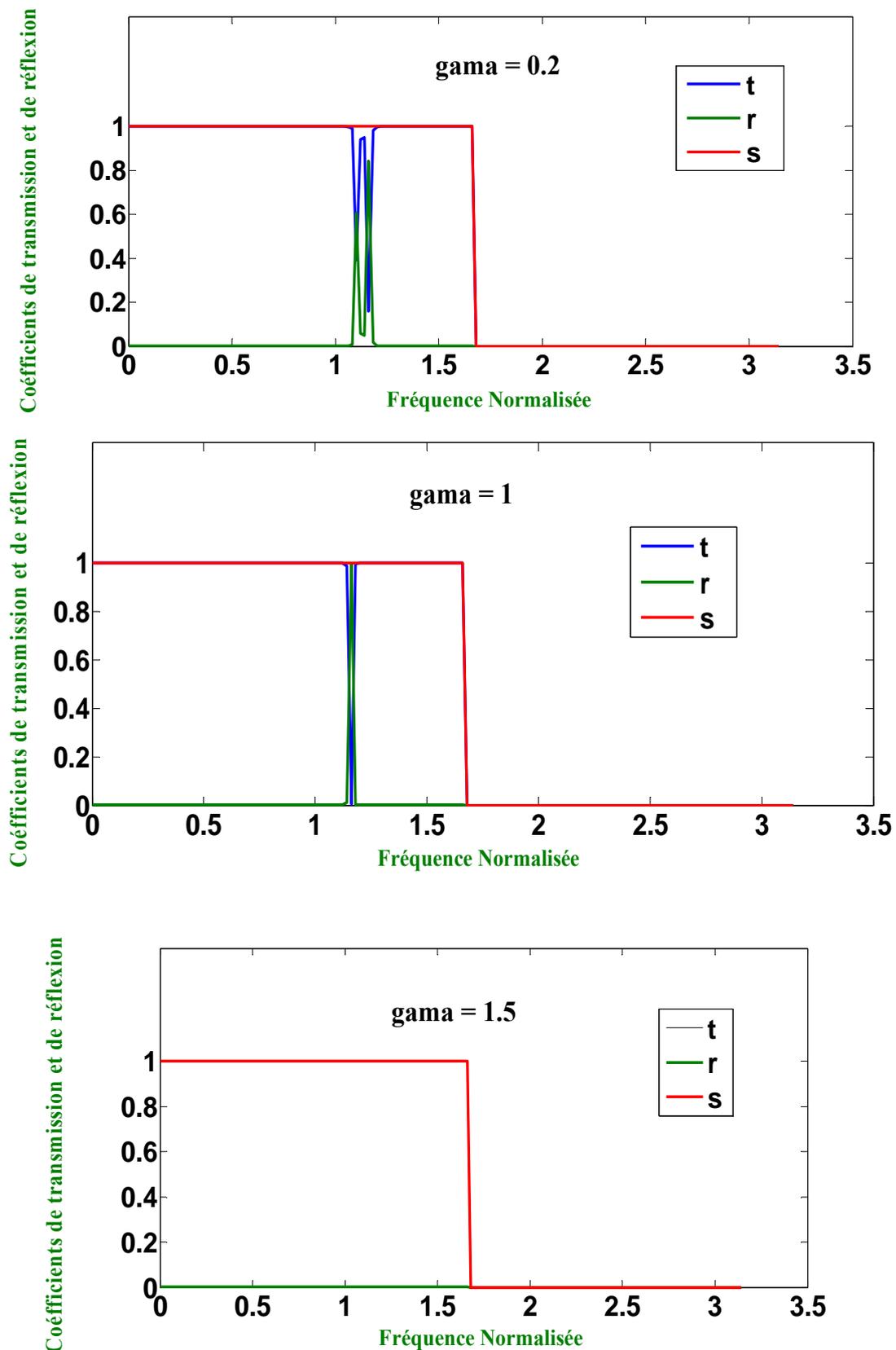


Figure III.3.2 : Courbes de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différents valeurs de  $\gamma$ .

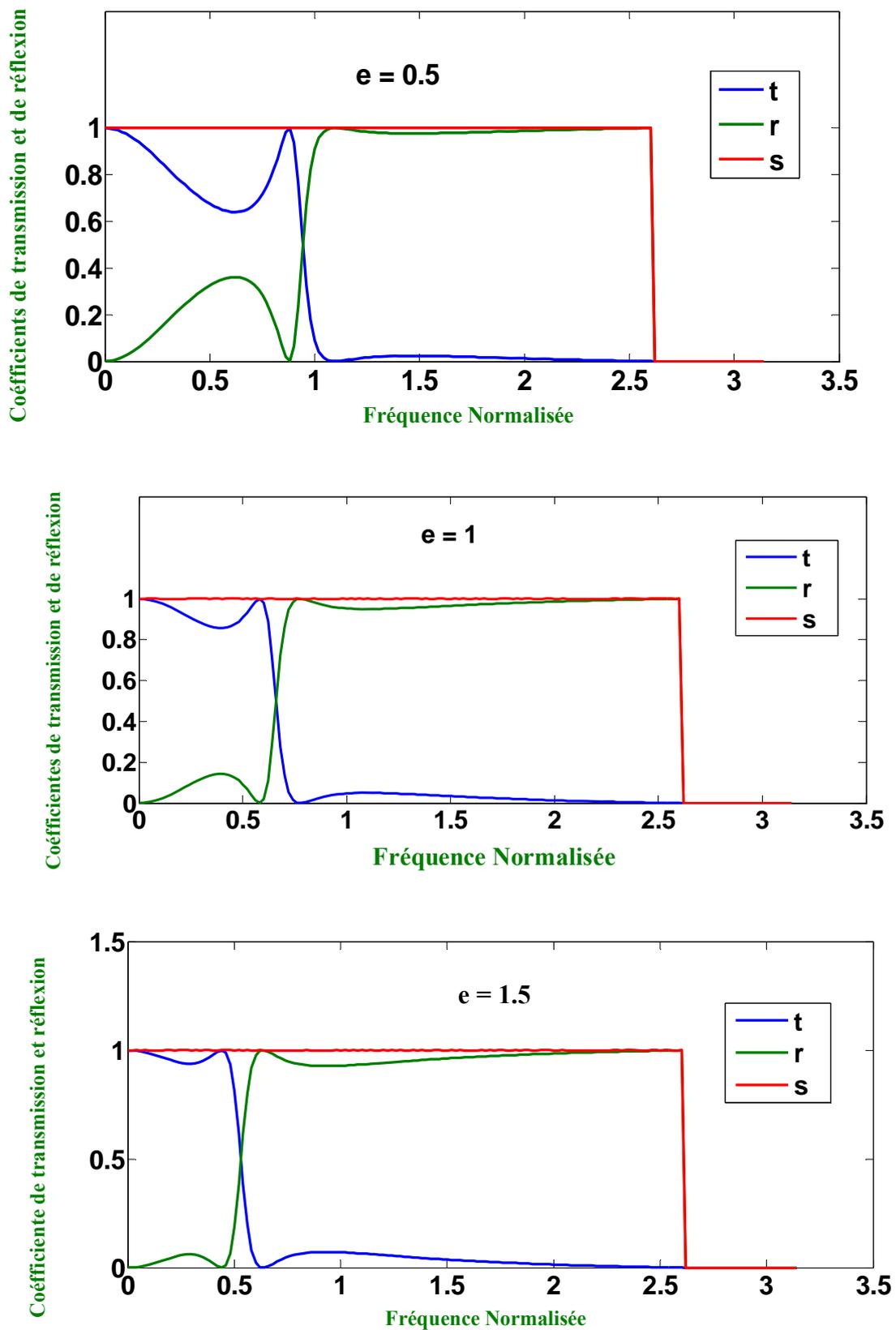


Figure III.4.1 : Courbes de réflexion et de transmission de mode 1 pour les différents valeurs de

$e$ .

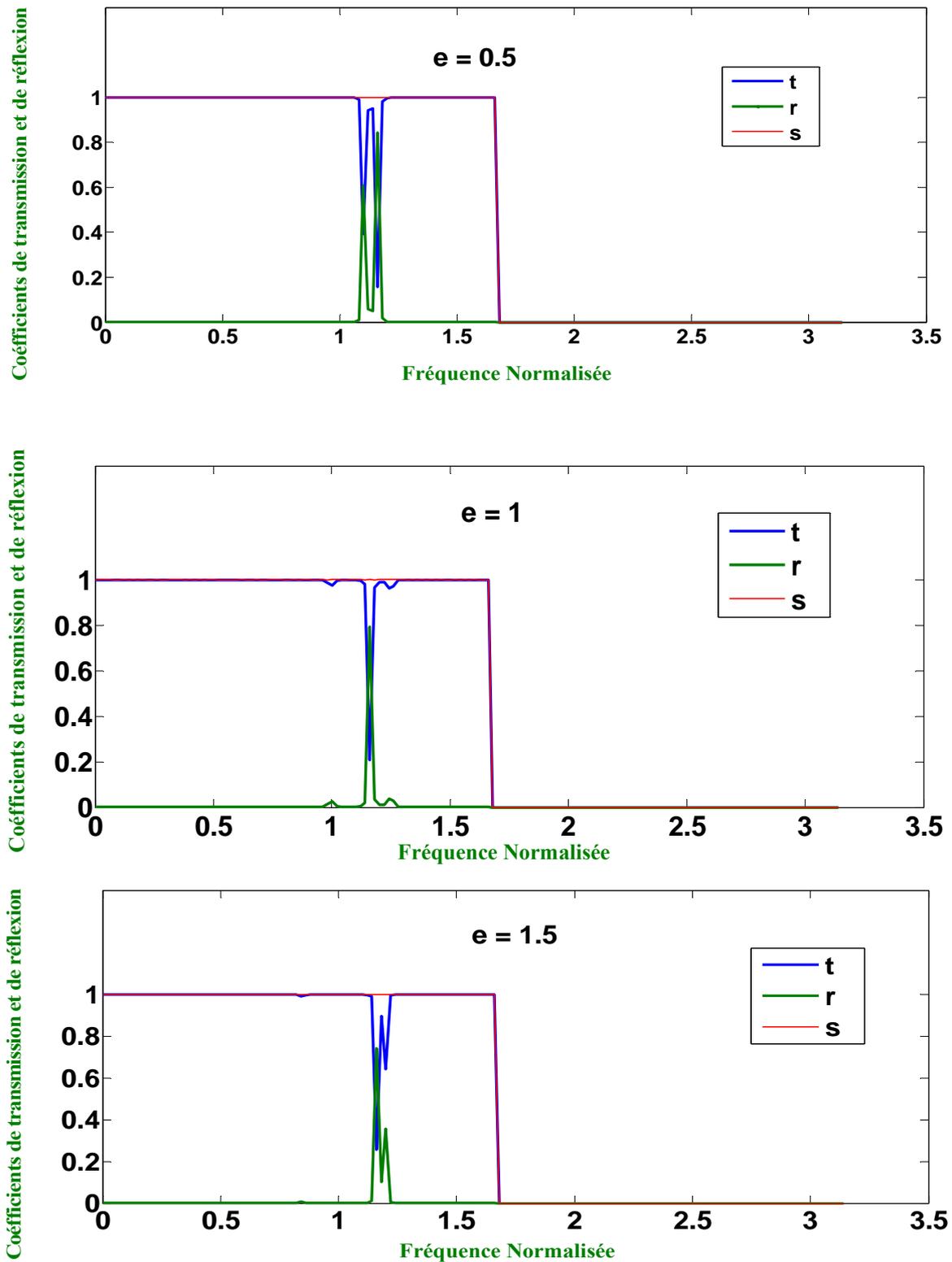


Figure III.4.2 : Courbes de réflexion et de transmission de mode 2 pour les différentes valeurs de  $e$ .

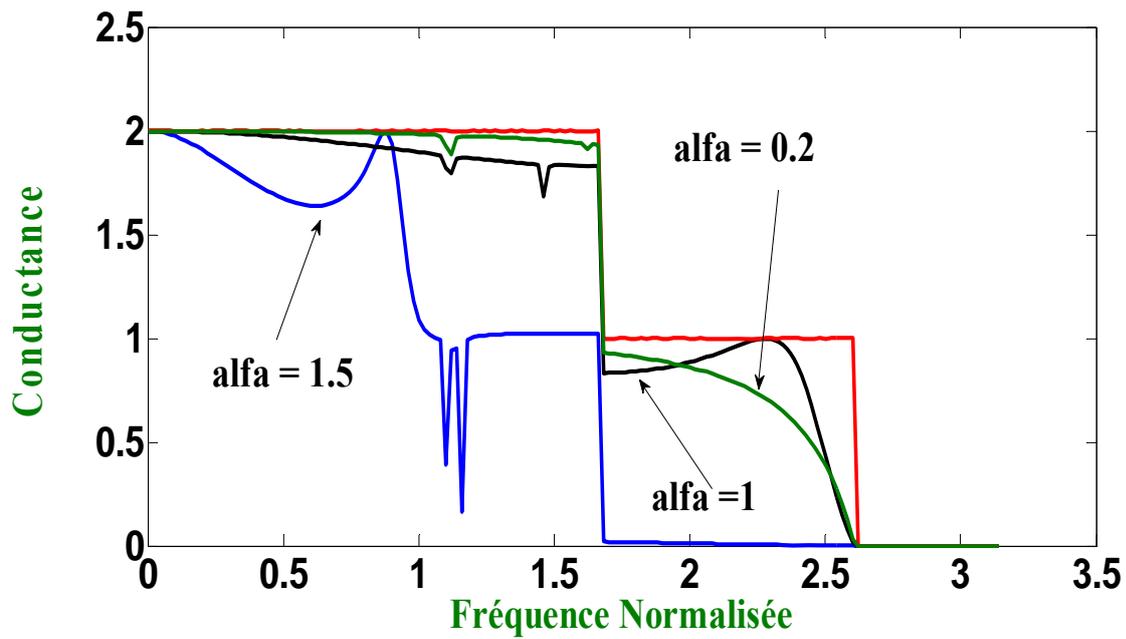


Figure III.5.1 : Courbe de la conductance phononique pour différente valeur de  $\alpha$ .

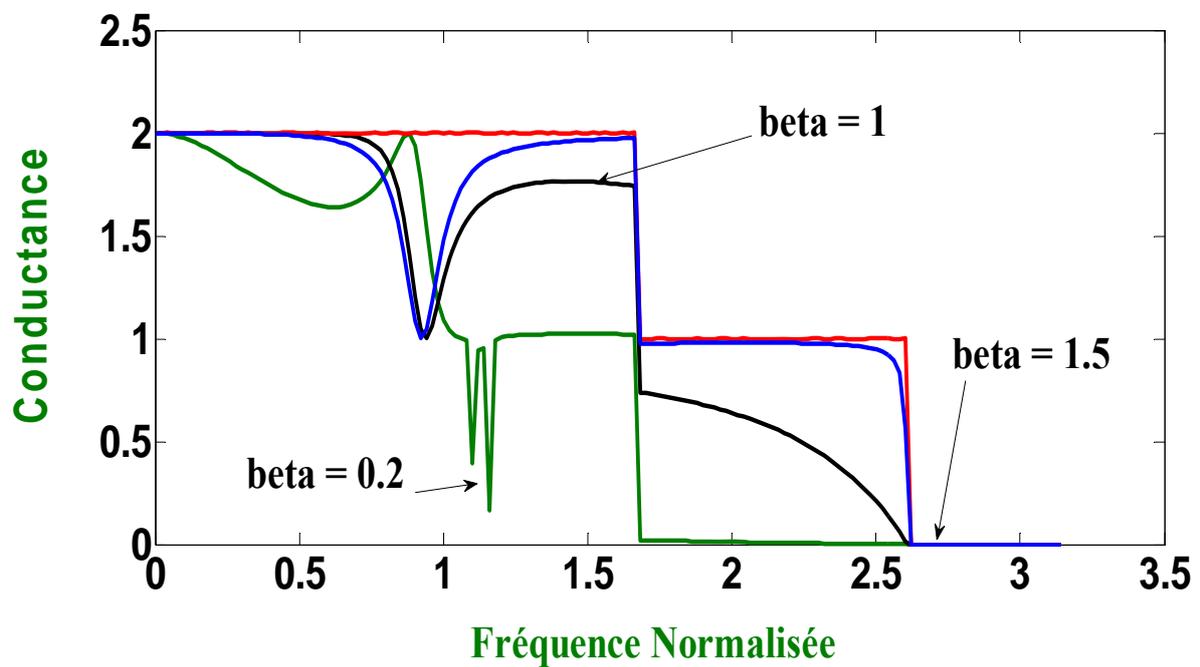


Figure III.5.2 : Courbe de la conductance phononique pour différentes valeurs de  $\beta$ .

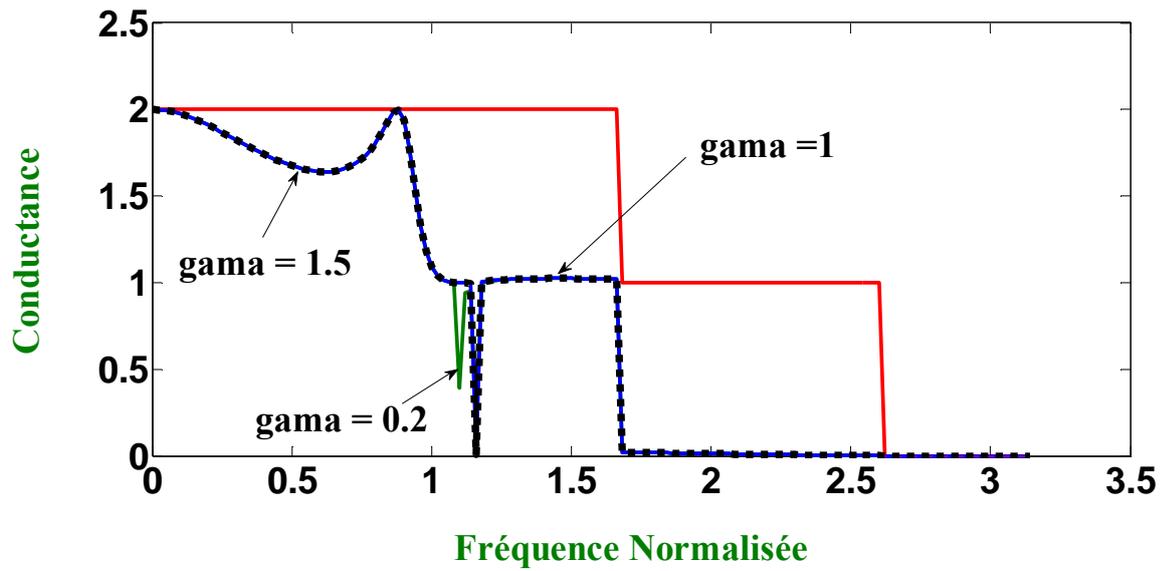


Figure III.5.3 : Courbes de la conductance phononique pour différentes valeurs de  $\gamma$ .

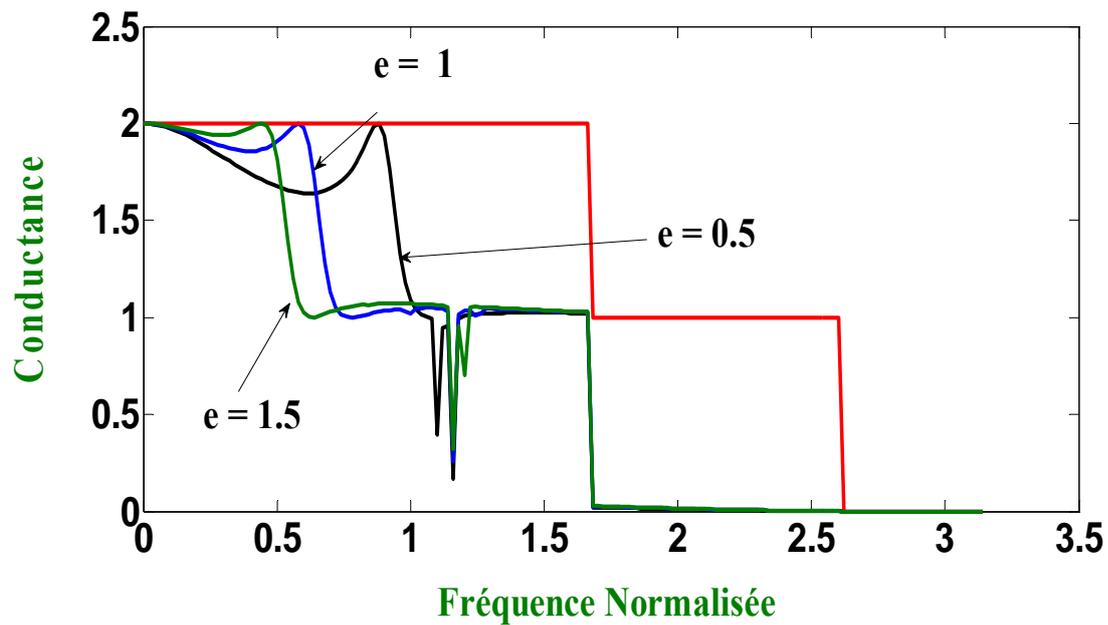


Figure III.5.4: Courbes de la conductance phononique pour différentes valeurs de  $e$ .

### III.8- Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudiés le cas de diffusion d'onde élastique dans les systèmes de basses dimensions présentant des défauts de structure. Dans la première partie nous avons présenté le modèle des défauts de structure objectif de notre étude, puis nous avons calculé la matrice dynamique de système ainsi que la matrice de raccordement, ces résultats sont obtenus à partir de méthode de raccordement dont le principe est présenté dans la première partie de ce chapitre. La deuxième partie est consacrée à la présentation des différents résultats obtenus, à savoir la variation des coefficients de transmissions et de réflexions ainsi que la conductance phononique. Les résultats ont été discutés et commenté.

De façon générale, la présence de défaut donne lieu à un décroissement de la probabilité de transmission 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.

### **Conclusion Générale**

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

L'étude dynamique d'un réseau parfait nous a permis de déterminer la matrice dynamique de système ainsi que les courbes de dispersion, les facteurs de phases et les vitesses de groupe qui sont essentiels pour l'étude de la diffusion d'ondes de phonons.

Nous avons présenté les différents résultats obtenus, à savoir la variation des coefficients de transmissions et de réflexions ainsi que la conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée. Les résultats ont été discutés et commentés.

Nos résultats numériques ont mis en évidence l'existence de 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. Nous avons aussi constaté une grande dépendance des coefficients de transmission et de réflexion de l'onde excitatrice ainsi que des paramètres de système perturbé.

L'existence des inhomogénéités peut faire écran aux ondes de phonons dans certains intervalles d'énergie, ainsi leur éventuelle utilisation comme filtres pour régler la conductance d'un système en électronique.

Concernant les perspectives offertes par ce travail, nous proposons :

De faire une étude plus approfondie par l'application de la méthode de raccordement en introduisant les effets de la température sur le transport des phonons.

De déterminer la contribution des défauts à la chaleur spécifique et la conductivité thermique.

- [1] D.P. Woodruff editor, *The Chemical Physics of Solid Surfaces Vol. 10 - Surface Alloys and Alloy Surfaces*, Elsevier (2002).
- [2] E. Bussmann, J. Sun, K. Pohland G. L. Kellogg, *J. Phys.: Conds. Matt.* **21**, 314016 (2009).
- [3] Jean-Jacques Rousseau et Alain Gibaud, Professeurs à l'université du Maine (Le Mans) : *Cristallographie géométrique et radiocristallographie*, 3e édition Dunod, Paris, (2000).
- [4] Anders Nilsson, Lars G.M. Pettersson, Jens K. Nørskov *Chemical Bonding at Surfaces and Interfaces*, Elsevier, Oxford First edition (2008).
- [5] Internet : *Application de la mécanique quantique : Du l'atome au solide*. Claud Aslangul, Université Pierre et Marie Curie (Paris 6).
- [6] E. A. Wood: *J. Appl. Phys.* **35**, 1306 (1964).
- [7] R. L. Park, and H. H. Madden, *Surf. Sci.* **11**, 188 (1968).
- [8] P. R. Watson, M. A. v. Hove, K. Hermann, National Institute of Standards and Technology Database 42, (2001).
- [9] Charles Kittel, *Physique de l'état solide*, Dunod, Paris, (1998).
- [10] Brout (R.) et Visscher (W. M.), *Phys. Rev. Letters*, 9, 54 ,(1962).
- [11] E. J. Routh, « Dynamics of a system or rigid bodies », Reprint Dover, New York ,(1955).
- [12] R . J. Elliott, *Phil. Mag.*, 1, 293,(1956).
- [13] R. F. Wallis, *Phys. Rev.* , 105, 5401, (1957).
- [14] P. Auger, *J. Physique Rad.* **6**, 205, (1925).
- [15] H. Ibach, *Physics of Surfaces and Interfaces*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, p 646, (2006).
- [16] Oatley CW, Everhart TE: The examination of p-n junctions in the scanning electron microscope. *J Electron* 2, 568-570, (1957) .
- [17] Oatley CW, Nixon WC, Pease RFW: Scanning electron microscopy. *Adv Electronics Electron Phys* 21, 181-24 ,(1965).

- [18] Precision Method for Obtaining Absolute Values of Atomic Binding Energies », in Physical Review, vol. 105, 1957, p, (1676).
- [19] Rabah Chadli. Thèse de Doctorat Univ. Mouloud Mammeri. Tizi-Ouzou ,(2012).
- [20] A. Fellay, F. Gagel, K. Maschke, A. Virlovet, A. Khater, Phys. Rev. B,55, 1707 (1997)
- [21] M. Belhadi, O. Rafil, R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, Eur. Phys. J. B,15 ,435 (2000) .
- [22] A. Samira, Mémoire de Magister, Excitation Phononiques dans les systèmes de basses dimension, USTHB (2005).
- [23] O .NAFFA, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri (2010).
- [24] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, P. A. Deymier, Ph. Lambin, et Dobrzynski, Phys. Rev. B, Vol. 65, 174308 (2002).
- [25] A. Khater et W. Gzaja, Physica. B 167,33, (1990).
- [26] A. Khater, N. Auby et D. Kechrakos, J. Phys. Condens. Matter 4.3743 ,(1992).
- [27] B. Djafari-Rouhani, P. Masri, L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 15,5690 ,(1977).
- [28] Akjouj. A, Doberzenski L, Djafari-Rouhani B, Vasseur J. O. and Kushwaha M.S Euro. Phys. Lett, 41 321, (1998).
- [29] A. A. Maradudin, R. E. Wallis et L. Dobr zynski, Hand Book of surfaces and interfaces, Garland, New York Vol 3, (1980).
- [30] J. Szefteland A .Khater,J.Phys.C:Solide.State.Phys.20, 4725, (1987).
- [31] R. Landauer, J.Phys : codens Matter 1.8099, (1989).
- [32] Y. Meir, S. Wingreen, Phys. Rev. Lett., 68, 2512, (1992) .
- [33] M. Belhadi, R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil, J. Hardy .Phys. chem. News 8.23 (2002).
- [34] S. Irene, Mémoire de Magister, Université M. Mammeri de Tizi Ouzou (2001).
- [35] M. Abou. Ghantous and A. Khater .Eur . Phys.J.B 12,335 (1999).
- [36] M. Belhadi. Thèse de doctorat d'état, Univ.M.Mammeri de Tizi Ouzou (2000).
- [37] A. Fellay. Travail Pratique de Diplome d'ingénieur Physicien. Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, (1995).

[38] F. Gagel, et K. Maschke, Phys. Rev, B52, 2013 (1993).

[39] C. Berthod, F. Gagel, et K.Maschke, Phys. Rev, B50, 18299 (1994).

## ***Résumé***

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

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

Nous avons étudiés les propriétés dynamiques du réseau parfait, 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.

En présence de défaut, nous avons, en utilisant la méthode de raccordement, analysé la diffusion des ondes vibratoires par un défaut de surface d'une structure cristalline en fonction des changements dans l'environnement atomique de la zone de défaut. A l'aide de programme de simulation adaptée, nous déterminons les spectres de transmission et réflexion ainsi que la conductance phononique en fonction de la fréquence normalisée pour les deux modes propres de vibration du réseau parfait.

## ملخص:

الهدف من عملنا هو دراسة ديناميات الاهتزاز لشبكة ثنائية الأبعاد في وجود العيوب. من دراسة نظرية للظواهر الديناميكية المتعلقة بتوطين الأمواج المطاطية في منطقة قريبة من فجوة الفجوة بين دليلين موجات بلورية ذات أبعاد منخفضة والتي تكسر تناظر الترجمة في الاتجاه الطبيعي على خطأ. سيتم إجراء هذه الدراسة كجزء من التقارب التوافقي للقوى المركزية والتفاعل بين الجيران الأول والثاني. من هياكل النموذج، يتناول هذا العمل تطوير وتطبيق الأساليب التحليلية والمحاكاة العددية.

لقد درسنا الخصائص الديناميكية للشبكة الكاملة، وهي مقدمة لحسابات تشتت فونون من أجل دليل موجي مثالي ثنائي الأبعاد في سياق التقارب التوافقي للقوى المركزية والتفاعل بين الجيران الأول والثاني.

في ظل وجود عيب، قمنا، باستخدام طريقة التوصيل، بتحليل انتشار الموجات الاهتزازية عن طريق خلل السطح لبنية بلورية كدالة للتغيرات في البيئة الذرية للمنطقة المعيبة. باستخدام برنامج محاكاة مقتبس، فإننا نحدد أطراف الإرسال والانعكاس بالإضافة إلى التوصيل الصوتي كدالة للتردد المعياري للطريقتين الطبيعيين للاهتزاز في الشبكة المثالية.

## Summary

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

From a theoretical study of dynamic phenomena related to the localization of elastic waves in the vicinity of an area of a gap gap between two low-dimensional crystallographic waveguides which break the translation symmetry in the normal direction at fault. This study will be conducted as part of the harmonic approximation of the central forces and the interaction between first and second neighbors. From the model structures, this work deals with the development and application of analytical methods and numerical simulation.

We have studied the dynamic properties of the perfect lattice, an introduction to phonon dispersion computations for a perfect two-dimensional waveguide in the context of the harmonic approximation of central forces and the interaction between first and second neighbors.

In the presence of a defect, we have, using the connection method, analyzed the diffusion of the vibratory waves by a surface defect of a crystalline structure as a function of the changes in the atomic environment of the defect zone. Using an adapted simulation program, we determine the transmission and reflection spectra as well as the phononic conductance as a function of the normalized frequency for the two natural modes of vibration of the perfect network.

