

# IMPACT DES LAMES NANOMÉTRIQUES INSÉRÉES EN SANDWISHS SUR LES PROPRIÉTÉS VIBRATIONNELLES DES STRUCTURES CFC [110]

Fazia LEKADIR<sup>1</sup> et Rachid TIGRINE<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université de Tizi-Ouzou, 15000 Tizi-Ouzou, Algérie

<sup>2</sup>Institut des Molécules et des Matériaux du Mans UMR 6283, Université du Maine, 72085 le Mans, France

## RÉSUMÉ

La dynamique vibrationnelle des structures cubiques contenant plusieurs zones d'interfaces fera l'objet de notre travail. En particulier, nous nous intéressons aux mouvements des ondes élastiques via des lames atomiques minces insérées en sandwich dans les structures cubiques de même type. La première structure examinée est de type A/B/A, obtenue par raccordement de deux systèmes semi-infinis par un film ultramince et à maillage semblable à celui des systèmes situés de part et d'autre.

Dans le but de connaître l'influence des lames insérées, nous avons augmenté le nombre de lames minces, en considérant les structures A/2B/A et A/3B/A. Les simulations numériques sont menées à l'aide des programmes élaborés par nous-même, ce qui a permis de relever le comportement et les propriétés des systèmes étudiés et de prédire leurs évolutions.

**Mots Clés:** Films Minces, Propriétés Vibrationnelles, Nanomatériaux, Lames Atomiques.

---

## NOMENCLATURE

### Symboles :

$m(l)$  la masse de l'atome, kg

$\vec{r}(l, l')$  vecteur

$k(l, l')$  la constante de force  $J.m^{-2}$

F force N

$r$  est le module du vecteur  $\vec{r}(l, l')$ ,

### Lettres grecques :

$\vec{u}_\alpha$  est l'amplitude de vibration

$\alpha$  et  $\beta$  représentent les directions cartésiennes  $x$ ,  $y$ , et  $z$

$r_\alpha$  et  $r_\beta$  sont respectivement les composantes cartésiennes selon  $\alpha$  et  $\beta$

---

## 1. INTRODUCTION

Les couches ultraminces sont des nanomatériaux dans une direction déterminée de l'espace. Elles sont déposées sous forme de lames atomiques sur un matériau appelé substrat. Elles ont suscité l'intérêt des scientifiques L. Esaki et R. Tsu des laboratoires IBM dans les années 1970, qui se sont consacrés à l'étude de la croissance des couches minces des super-réseaux. La naissance de cette discipline a révolutionné durablement la physique des semi-conducteurs. Les études s'y rapportant sont stimulées par le progrès réalisé dans le domaine de technique d'élaboration [1] et de caractérisation [2-3], développées dans les années 1980, notamment par les laboratoires Bell. La possibilité de synthétiser de façon contrôlée, de fonctionnaliser et de perfectionner les films ultraminces,

afin de répondre aux besoins des nanotechnologies, confère à ces matériaux un intérêt grandissant. Leur utilisation économique en rapport avec leurs propriétés physiques a élargi leurs domaines d'application, grâce à leur intégration dans les dispositifs micro et nanoélectroniques [4], les systèmes micro électromécaniques (MEMS) ainsi que pour les besoins des télécommunications, de la santé...etc.

## 2. DYNAMIQUE VIBRATIONNELLE DES SYSTEMES ORDONNES ET DESORDONNES

La dynamique des atomes d'un solide est décrite par la deuxième loi de Newton :

$$m(l) \frac{d^2 \vec{R}_i}{dt^2} = \sum \vec{F} \quad (1)$$

Dans le cadre de l'approximation harmonique [5-6] associée au modèle des forces centrales l'équation du mouvement d'un atome occupant le site  $l$  s'écrit :

$$m(l) \frac{d^2 \vec{u}_\alpha}{dt^2} = - \sum_{l' \neq l} \sum \left( \frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) K(l, l') [\vec{u}_\beta(l, t) - \vec{u}_\alpha(l', t)] \quad (2)$$

Où  $\alpha$  et  $\beta$  représentent les directions cartésiennes  $x$ ,  $y$ , et  $z$ ,  $m(l)$  la masse de l'atome au site  $l$ .  $\vec{u}_\alpha(l, t)$  est l'amplitude de vibration suivant la direction  $\alpha$ ;  $r_\alpha$  et  $r_\beta$  sont respectivement les composantes cartésiennes selon  $\alpha$  et  $\beta$  du vecteur  $\vec{r}(l, l')$  joignant les positions d'équilibre des atomes aux sites  $l$  et  $l'$ ,  $r$  est le module du vecteur  $\vec{r}(l, l')$ ,  $k(l, l')$  la constante de force de rappel entre deux sites.

## 3. METHODE EMPLOYEE

La méthode utilisée a été introduite pour la première fois par *Feuchtwang* lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini à trois dimensions [7]. Elle a été reprise en 1987 par *Khater* et *Szeftel* dans deux articles ; le premier est le développement du formalisme mathématique utilisé et le second est une application aux surfaces Ni(100) et Ni(100)+C(2x2) [8-9]. Depuis, la méthode dite de raccordement a contribué à l'étude de la dynamique vibrationnelle de plusieurs systèmes physiques par plusieurs auteurs. La méthode de raccordement est utilisée afin d'en déduire une approche analytique pour déterminer les grandeurs physiques caractérisant les systèmes désordonnés. L'application de cette méthode à l'étude des ondes de vibrations du système consiste à décrire le mouvement de vibrations des atomes par un nombre fini d'équations. Son application exige que l'espace du solide (système) soit divisé en trois régions:

- *Zone parfaite* : c'est la région où on retrouve le volume ; elle est caractérisée par une périodicité tridimensionnelle et c'est elle qui permet de tracer les courbes de dispersion en volume.
- *Zone de défaut (ou la zone perturbée)* : c'est la région qui renferme toutes sortes de nanostructures et de défauts, la périodicité est perturbée dans cette zone ce qui conduit à des propriétés différentes de celles de volume.
- *Zone de raccordement* : c'est la limite entre les régions parfaites et les atomes de la zone de défaut. Elle permet de raccorder analytiquement les modes induits par le défaut avec les états de vibrations évanescents de la zone parfaite.

4. SYSTEMES MODELES

• **Système A/B/A**

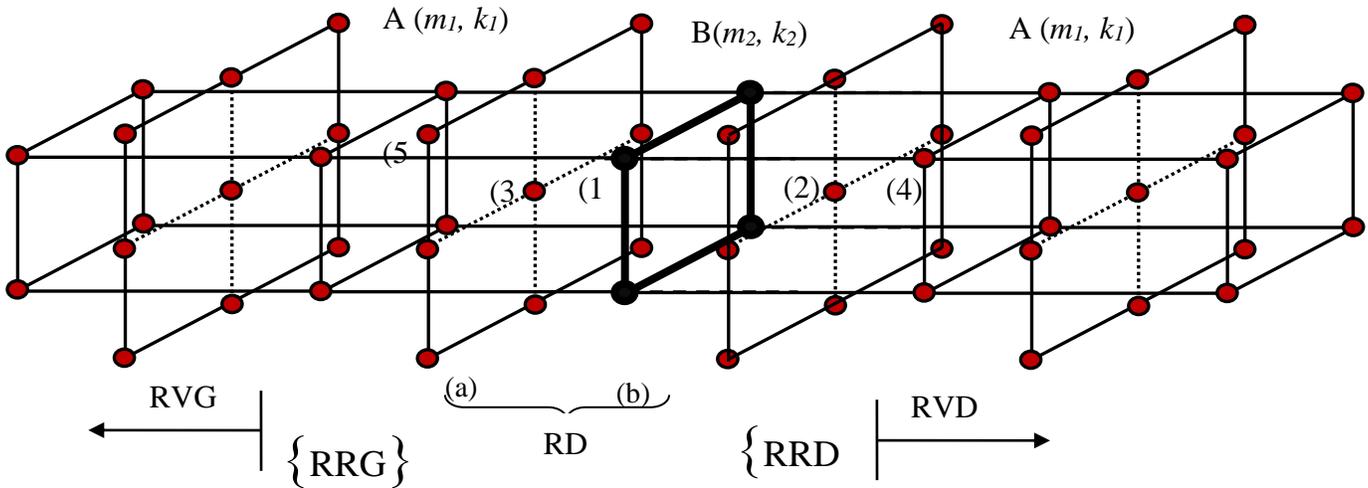


FIGURE 1. Représentation schématique d'une lame insérée en sandwich entre deux systèmes de type cfc suivant la direction [110] de type A/B/A

• **Système A/2B/A**

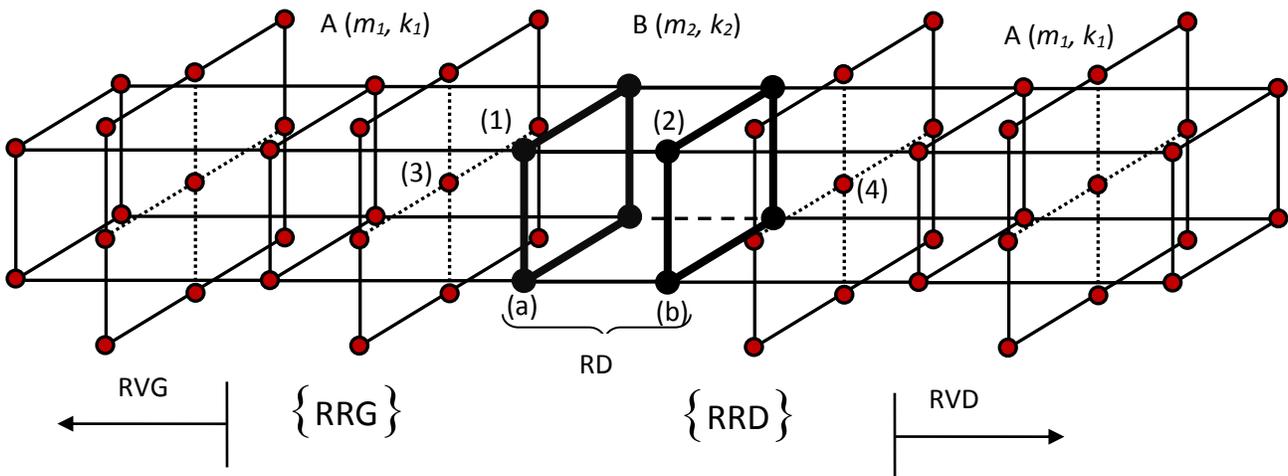


FIGURE 2. Représentation schématique d'une lame insérée en sandwich entre deux systèmes de type cfc suivant la direction [110] de type A/2B/A

• Système A/3B/A

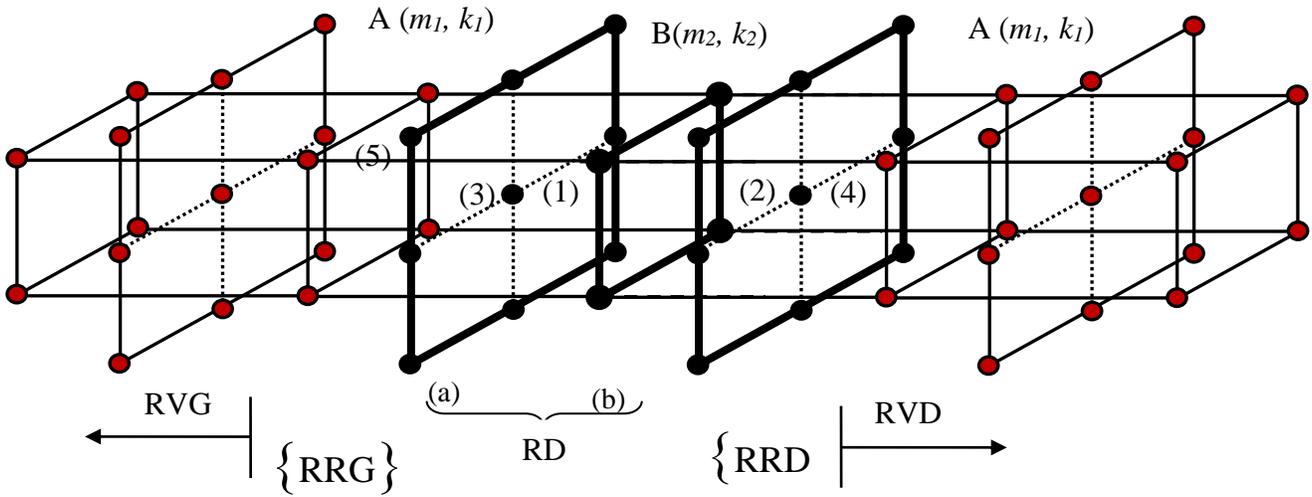


FIGURE 3. Représentation schématique d'une lame insérée en sandwich entre deux systèmes de type cfc suivant la direction [110] de type A/3B/A

5. RESULTATS ET DISCUSSIONS

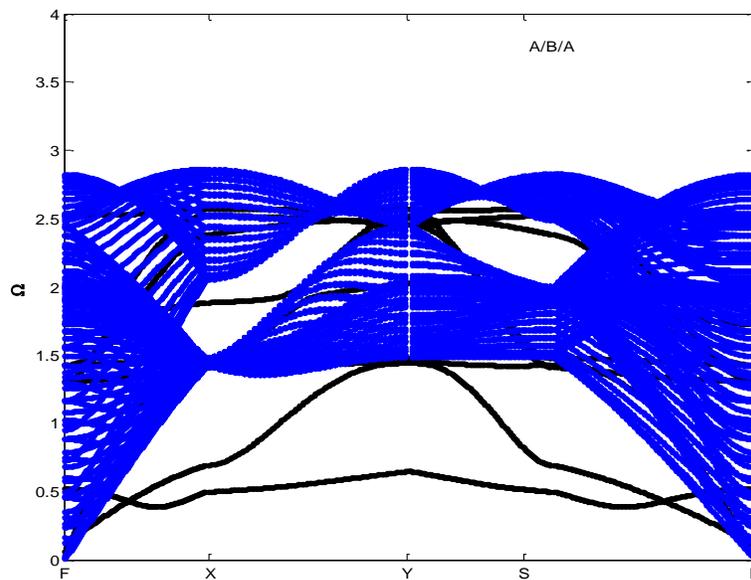


FIGURE 4. Les états localisés au niveau d'une interface du type A/B/A

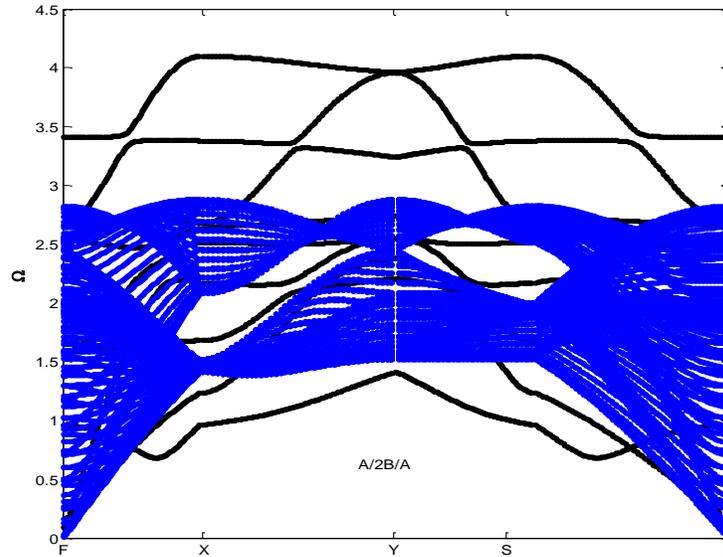


FIGURE 5. Les états localisés au niveau d'une interface du type A/2B/A

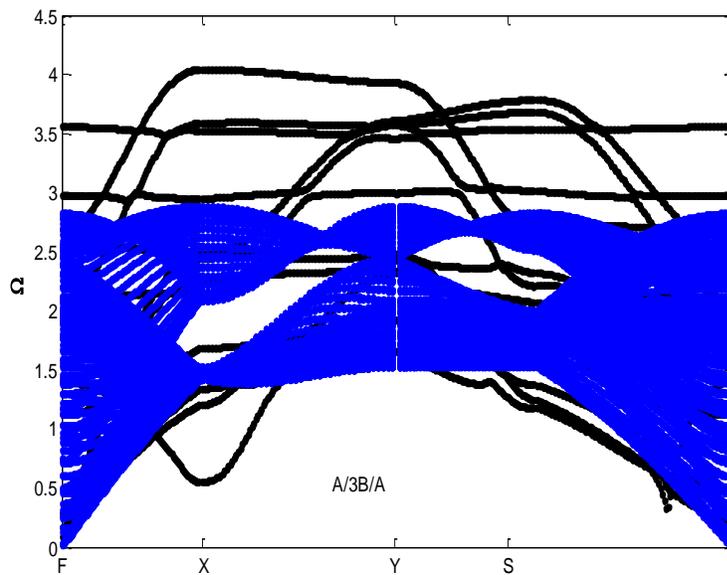


FIGURE 6. Les états localisés au niveau d'une interface du type A/3B/A

Les résultats sont donnés sur les Fig. 4, dans le cas d'une interface A/B/A, les courbes présentent quatre branches de phonons localisés au dessous de la bande de phonons du volume. Nous constatons que ces branches optiques sont moins énergétiques que les phonons du volume, de plus, nous observons quatre branches des phonons localisés à l'intérieur du gap de volume. Dans le cas d'une interface A/2B/A, les résultats sont donnés par la Fig. 5. Nous notons l'apparition de trois branches de phonons localisés au dessus de la bande passante, par contre, à l'intérieur du gap supérieur du volume, nos résultats détaillent trois branches. Au dessous de la bande

du volume, nous constatons l'existence juste de deux branches de phonons dont l'énergie est inférieure à celle des phonons du volume. Sur la Fig. 6, nous présentons nos résultats dans le cas d'une interface A/3B/A. Nos résultats montrent la présence de six branches de phonons localisés au dessus de la bande de phonons en volume, et trois branches à l'intérieur du gap de volume. Nous notons aussi l'existence de trois branches au dessous de la bande de volume.

## 6. CONCLUSION

Ce travail reporte une investigation des propriétés vibrationnelles de la structure de l'interface alliage ordonnée. La méthode de raccordement employée ici pour les calculs analytiques et numériques de ces propriétés vibrationnelles en interface, s'avère être un outil théorique de base et efficace.

Nous avons relevé que le nombre de couches insérées influe fortement sur les courbes des phonons localisés. A chaque fois que le nombre de couches insérées est grand, les énergies des branches de phonons localisés sont grandes, et ces branches se situent au dessus de la bande des phonons du volume ; et diminuent au fur et à mesure que le nombre de couches est petit. Nous avons montré la présence de trois types de modes localisés, le premier est un mode de Rayleigh, il se propage suivant la direction de haute symétrie, le second type est à l'intérieur de la bande de volume, le troisième est attribué à des modes propres localisés d'Einstein à des hautes fréquences. La présence de plusieurs couches atomiques dans une structure peut jouer le rôle d'un amplificateur pour certaines ondes, ils permettent ainsi d'apporter une réponse complète sur la maîtrise parfaite des propriétés des systèmes en présence d'interfaces va contribuer à la fabrication et la production de matériaux de caractéristiques améliorées, multi fonctionnels moins coûteux, plus légers et plus fiables.

## REFERENCES

- [1] Foxon, C. T, *Acta Electron.* 21 139 (1978).
- [2] Paul K. Hansma and Jerry Tersoff, Scanning tunneling microscopy, *J. Appl. Phys.* 61, R1, 1987.
- [3] G. Binnig, C. F. Quate, and Ch. Gerber, Atomic Force Microscope, *Phys. Rev. Lett.* 56, 930, 1986; T. A. Albrecht and C. F. Quate, Atomic resolution imaging of a nonconductor by atomic force microscopy, *J. Appl. Phys.* 62, 2599, 1987.
- [4] Green, M. L., Schenck, P. K., Chang K., S, Ruglovsky, J., and Vaudin, M., Higher-k dielectrics for advanced silicon microelectronic devices: A combinatorial research study, 2009, 86, Jul. Sep. Pp.1662-1664.
- [5] A. Maradudin, R. F. Wallis and L. Dobrzynski, *Handbook of Surfaces and Interfaces, Vol. 3* Garland, New York, 1980.
- [6] H. Ibach and H. Lüth, *Solid-State Physics: An Introduction to Principles of Materials Science*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009.
- [7] T. E. Feuchtwang, Dynamics of a Semi-Infinite Crystal Lattice in a Quasiharmonic Approximation. II. The Normal-Mode Analysis of a Semi-Infinite Lattice, *Phys. Rev.* 155, 731, 1967.
- [8] J. Szeftel and A. Khater, Calculation of surface phonons and resonances: the matching procedure revisited: I, *J. Phys. C : Solide state Phys.* 20, 4725, 1987.
- [9] J. Szeftel, A. Khater, F. Mila, Calculation of surface phonon dispersion on Ni(100) and Ni(100)+c(2x2) along the (010) direction by means of the matching procedure. II, S.d'Addato and N. Auby, *J. Phys. C : Solide state Phys.* 21, 2113, 1988.