

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

UNIVERSITÉ BADJI MOKHTAR-ANNABA
Faculté des Sciences



جامعة باجي مختار- عنابة
كلية العلوم

Département de Physique

THÈSE

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de
DOCTORAT EN SCIENCES

*Investigation des effets de la pression sur les propriétés
élastiques des structures cristallines et amorphes*

Option : Physique des Semi-conducteurs

Présentée par :

M^{me} LAHMAR Souaad DOUAFER

Soutenue en Mars 2015 devant le jury :

<u>Directeur de thèse :</u>	Abdellaziz DOGHMANE	Prof. Université d'Annaba
Président :	Allaoua CHIBANI	Prof. Université d'Annaba
Examineurs :	Ahmed BOUCENNA	Prof. Université de Sétif
	Abdelhamid BOUAINÉ	M.C.A. Université de Jijel

Année universitaire: 2014/2015

دراسة تأثير الضغط على خصائص المرنة للبنيات البلورية وغير البلورية

ملخص

في هذه الأطروحة، درسنا بنية المواد، وبالتالي دراسة تأثير الضغ ط على بعض الخصائص الميكانيكية لبعض المواد أنصاف النواقل GaY من فئة (V-III) حيث (As وP، N=Y) وأكاسد المعادن (XO) = X) Ba، Ca، Sr، Mg و Cd) في البنية مكعب. لهذا، طبقنا مبدأ المجهر الصوتي في وضع انعكاس باستخدام المحاكاة النظرية SAM وبدأنا الدراسة للخصائص الصوتية للمواد تحت ضغط تدريجي عن طريق حساب معاملات الانعكاس (R(θ)، الذي كان الخطوة الأولى من المحاكاة ثم الهدف من الخطوة الثانية والثالثة هو تعيين التوقعات الصوتية V(z) باستخدام نموذج شيبارد ويلسون والتحليلات الطيفية الخاصة بها عن طريق تحويل فورييه السريع. قمنا بتكرار نفس الطريقة السابقة بالنسبة لجميع المواد تحت تأثير الضغط. في النهاية، تم استنتاج العلاقات التحليلية التالية بالنسبة لتأثير الضغط P، وثوابت المرنة C، معامل يونغ E والقص G و المسافة بين الذرات a.

$$C = C_0 + A_i P + A_j P^2 \quad \text{et} \quad a = a_0 + A_k P + A_l P^2$$

حيث $A_k, C_0, a_0, A_j, A_i, A_l$ ثوابت مميزة خاصة بثوابت المرنة و المسافة ما بين الذرات.

الكلمات المفتاحية الضغط، الخصائص الميكانيكية، أنصاف النواقل، أكاسد المعادن، SAM، معاملات المرنة، المسافة بين الذرات.

Investigation des effets de la pression sur les propriétés élastiques des structures cristallines et amorphes

Résumé

Dans cette thèse, nous avons étudié les propriétés structurales, par conséquent, l'effet de la pression sur certains paramètres mécaniques de quelques matériaux semi-conducteurs de la classe (III-V) : GaY (Y=N, P, As) et oxydes métalliques XO (X=Ba, Ca, Sr, Mg et Cd) dans la phase cubique. Pour cela, Nous avons adapté le principe d'un microscope acoustique opérant en mode de réflexion via la simulation théorique SAM. L'investigation des propriétés acoustiques des matériaux soumis à pressions progressives a commencé par le calcul des coefficients de réflexion $R(\theta)$ qui était la première étape de la simulation. Ensuite, la détermination des signatures acoustiques $V(z)$ en utilisant le modèle de Sheppard et Wilson, ainsi que leurs traitements via transformé de Fourier rapide, FFT font l'objectif de la deuxième et troisième étape. Et puis, nous avons répété la même procédure pour tous les matériaux considérés sous les intervalles de pressions ([0-40] GPa pour GaN, GaP, GaAs, BaO, CaO et SrO, et [0-150] GPa pour les matériaux MgO et CdO). A la fin, nous avons déterminé l'influence de la pression sur les modules d'élasticité ; Module de Young, E et celui de Cisaillement, G ainsi que sur les distances interatomiques, d et les variations ont pu se formulées sous les relations suivantes :

$$C = C_0 + A_i P + A_j P^2 \quad \text{et} \quad a = a_0 + A_k P + A_l P^2$$

Avec: $C = E$ ou G , $C_0 = E_0$ ou G_0 et A_i , A_j sont des constantes caractéristiques des modules élastiques E et G. A_k , A_l sont caractéristiques atomiques précises à chaque atome

Mots clés : Pression, Paramètres mécaniques, Semi-conducteurs III-V, Oxydes métalliques, SAM, Modules élastiques, Distance interatomique.

Investigation of the effects of pressure on the elastic properties of crystalline and amorphous structures

Abstract

In this thesis, we studied the structural properties, therefore, the effect of pressure on some mechanical parameters of some semiconductor materials of the class (III-V) GaY (Y = N, P, As) and metal oxides XO (X = Ba, Ca, Sr, Mg and Cd) in the cubic phase. For this, we have adapted the principle of an acoustic microscope operating in reflection mode using theoretical simulation SAM. The investigation of the acoustic properties of materials subjected to progressive pressure began by calculating the reflection coefficients $R(\theta)$, which was the first step of the simulation. Then, determination of acoustic signatures $V(z)$ using the model of Sheppard and Wilson and their treatments via Fast Fourier transformed, FFT are the objective of the second and third step. Then we repeated the same procedure for all materials considered under increasing pressure ([0-40] GPa for GaN, GaP, GaAs, BaO, CaO and SrO, and [0-150] GPa for MgO materials and CdO). At the end, we determined the influence of pressure on the elastic moduli; Young's modulus, E and the shear modulus, G and on the interatomic distances, a . The variations could be written in the following relationships:

$$C = C_0 + A_i P + A_j P^2 \quad \& \quad a = a_0 + A_k P + A_l P^2$$

With: $C = E$ or G , $C_0 = E_0$ and G_0 A_i and A_j are constants of elastic moduli E and G , A_k and A_l are accurate atomic characteristics of each atom

Key words: Pressure, Mechanical Parameters, Semi-conductors III-V, Metal Oxides, SAM, Elastic Moduli, Interatomic Distance.

DÉDICACES

Je dédie ce modeste travail :

À la mémoire de mon grand père paternel

*À mes très chers parents, **Zohra et Mohamed**, qui, sans leurs encouragements, je ne saurais parvenue à ce stade de compétence,
Allah Yahfadhom.*

*À mon Mari, **Hicham***

*À mon adorable bébé, **Wassim***

À mes frères, ma sœur, mon beau frère et ma belle mère

À tous ceux qui m'ont soutenue.

À ma grande famille....

Et surtout mes grands-parents paternels et maternels.

REMERCIEMENTS

*Le travail présenté dans cette thèse a été effectué au sein du Laboratoire des Semi-Conducteurs (LSC) à l'Université Badji Mokhtar – Annaba, UBMA. Tout d'abord, je remercie **Dieu** le tout puissant, qui m'a donné la foi et la force pour accomplir ce travail.*

*Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à la Directrice du LSC, Madame **Z. HADJOUR**, Professeur à l'UBMA, pour m'avoir acceptée au Laboratoire, pendant plusieurs années dès mon initiation à la recherche. Je voudrais la remercier pour ses conseils et pour l'oreille attentive que j'ai toujours trouvée auprès d'elle. Je la remercie également pour son aide et pour ses encouragements tout au long de la réalisation de ce travail. Qu'elle trouve ici l'expression de mon profond respect.*

*Je remercie vivement mon directeur de thèse, Monsieur **A. DOGHMANE**, Professeur à l'UBMA, Académicien, Vice-recteur des Relations Extérieures, de m'avoir donné l'opportunité de préparer mon Doctorat au sein de son équipe et de m'avoir fait part de ses compétences scientifiques. Je vous remercie pour votre suivi continu et pour le soutien permanent que vous m'avez apporté tant par vos qualités humaines que scientifiques. Merci également pour vos précieux conseils très utiles dans tous les domaines ainsi que pour la qualité que vous avez toujours exigée aussi bien lors du déroulement des travaux depuis mon encadrement au Magister que lors de la rédaction de cette thèse.*

*Mes remerciements vont également Monsieur **A. Chibani**, Professeur à l'université d'Annaba, Chef de Département de Physique qui a accepté avec une grande sympathie de présider ce jury de soutenance.*

*Tous mes remerciements s'adressent aussi aux membres du jury : Monsieur **A. Boucenna** Professeur à l'université de Sétif et Monsieur **A. Bouaine** MCA à l'université de Jijel, qui ont accepté d'évaluer ce travail. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma sincère gratitude.*

*J'exprime ma profonde gratitude à Mme la Professeur **F. DOUMARDES**, M^{me} **I. TOUATI** et M^{elle} **A. KHOULDIA** de l'UBMA pour leurs encouragements et leur sympathie lors de la réalisation de ce travail.*

*Je dis merci à mon mari **Hicham**, pour la bonne ambiance et l'aide qu'il a su entretenir en tout moment aussi au cours de la réalisation de ce travail. Mes remerciements les plus vifs vont également à **mes parents** pour leur intarissable soutien et leur compréhension jamais prise en défaut.*

Je remercie également toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à cette thèse, tout particulièrement ma famille pour leur soutien et leurs encouragements, ainsi que tous mes collègues doctorants du laboratoire et je cite entre autres: Zaki, Kahina, Souheyla, Yahia, Linda, Meriem, Fatima, Houda, Loubna, Khaled et Amal.

LISTE DES TABLEAUX

<i>Tab.</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
I.1	Extrait de la classification périodique des éléments.	6
I.2	Structure cristalline, groupe et paramètres de maille a et c (T = 300°K) pour les semi-conducteurs III–V	8
I.3	Quelques propriétés caractéristiques des oxydes métalliques type XO	9
I.4	Paramètres caractéristiques pour différents matériaux de la famille III-V.	10
I.5	Propriétés élastiques de CaO, BaO et SrO pour différentes pressions	21
I.6	Propriétés élastiques de MgO et CdO pour différentes pressions	21
I.7	Propriétés élastiques du MgO anisotrope pour trois directions	22
I.8	Propriétés élastiques des matériaux ; GaN, GaP et GaAs sous pression	23
I.9	Modules de Young et de Cisaillement pour différents types de matériaux.	26

II.1	Variations des vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour MgO _{iso}	32
II.2	Modules élastiques pour MgO isotrope et anisotrope	42

III.1	Paramètres élastiques pour différentes pressions pour BaO, CaO et SrO	48
III.2	Périodes spatiales et vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour BaO, CaO et SrO.	55
III.3	Périodes spatiales et vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour MgO et CdO	56
III.4	Paramètres caractéristiques pour les modules E et G des oxydes étudiés.	58
III.5	Variations des constantes E et G (en GPa) en fonction de P	66
III.6	Paramètres caractéristiques pour GaN, GaP et GaAs	67

LISTE DES FIGURES

<i>Figures</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
I.1	Structure cristalline des Oxydes métalliques	7
I.2	Maille cristallographique des semi-conducteurs GaN, GaP et GaAs	8
I.3	Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin pour les alliages III-V	11
I.4	Relation entre n et E_g pour la famille des semi-conducteurs III-V à 300K	12
I.5	Evolution du module de rigidité de certains semi-conducteurs (Groupes : IV, III-V et II-VI) en fonction de la distance interatomique	13
I.6	Dépendance du paramètre de maille a et de la pression hydrostatique des semi-conducteurs : Si, GaAs et ZnTe	16
I.7	Coefficient de réflexion $R(\theta)$ de la structure eau/MgO sans pression	19
I.8	Signature acoustique, $V(z)$ et spectre de FFT du MgO sans pression	20

II.1	Amplitudes (a) et phases (b) de R, θ pour MgO isotrope en fonction des angles d'incidences pour différentes pressions.	30
II.2	Variation de $V(z)$ et spectre de FFT en fonction de la pression	32
II.3	Amplitudes et phases des coefficients de réflexion $R(\theta)$ en fonction des angles d'incidence pour différentes pressions pour MgO<100>	34
II.4	Amplitudes et phases des coefficients de réflexion $R(\theta)$ en fonction des angles d'incidences pour différentes pressions pour MgO<110>	35
II.5	Amplitude et phase de $R(\theta)$ pour MgO <111> à différentes pressions.	36
II.6	$V(Z)$ et spectres FFT pour différentes pressions MgO <100>.	37
II.7	$V(z)$ et spectres FFT pour différentes pressions pour MgO<110>.	38
II.8	$V(z)$ et spectres FFT pour différentes pressions pour MgO<111>.	39
II.9	Dispersion des vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour MgO<100>	40

II.10	Dispersion des vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour MgO<110>.	40
II.11	Dispersion des vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour MgO<111>.	41
II.12	Comparaison des courbes $V(z)$ pour MgO isotrope et anisotrope	43
II.13	Dispersion de V_{Rn} en fonction de la pression.	44

III.1	Amplitude et phase en fonction des angles d'incidences pour BaO, CaO, SrO,	50
III.2	Coefficients de réflexion $R(\theta)$ en fonction des angles d'incidences pour MgO et CdO	51
III.3	Effet de la pression sur $V(z)$ et spectres de FFT pour BaO, CaO et SrO	53
III.4	Variation des $V(z)$ et spectres de FFT pour MgO et CdO	54
III.5	Variations des constantes élastiques, E et G, en fonction de la pression	57
III.6	Variations des distances interatomiques en fonction des pressions de transitions	60
III.7	Variations des amplitudes et phases des coefficients de réflexion $R(\theta)$ en fonction des angles d'incidences pour GaN, GaP et GaAs	62
III.8	Variations de $V(z)$ et spectres de FFT avec la pression ; pour GaN, GaP et GaAs.	64
III.9	Dispersion des VR avec la pression pour GaN, GaP et GaAs	65

LISTE DES SYMBOLES ET ABRÉVIATION

a	Distance interatomique
AM1	Austin Method 1
C	Constante élastique
C_{LR}	Rapport entre vitesse de Rayleigh et celle longitudinale
C_{LT}	Rapport entre vitesse transversale et longitudinale
E	Module de Young
F	Fréquence de travail
F_i	Densité de force par unité de volume
G	Module de cisaillement
g_i	Champ de la pesanteur
I_0	Intensité initiale
I_i	Intensité incidente
I_r	Intensité réfléchie
K	Module de compressibilité
k	Vecteur d'onde dans le liquide de couplage
K_{Ic}	Ténacité
k_{Isaw}	Composante du nombre d'onde des ondes de fuites de surface
k_R	Vecteur d'onde dans la direction de l'onde de Rayleigh
k_z	Vecteur d'onde dans la direction de dé-focalisation z
N	Ouverture numérique
N	Vecteur unitaire
P	Pression exercée
P	Pression acoustique
$P(\theta)$	Fonction pupille de la lentille
R	Amplitude des ondes réfléchies
R_{ms}	Résistance mécanique
RS	Structure Rock Salt (B3)

$R(\theta)$	Coefficient de réflexion
T	Amplitude des ondes transmises
T_{ij}	Contraintes
u	Déplacement longitudinal
U	amplitude de déformation
$U(\theta)$	Amplitude de l'onde plane générée par le transducteur
u_i^0	Polarisation de l'onde
V	Vitesse de phase
V	Vitesse de propagation du son.
$V(z)$	Signal de sortie ou signature acoustique
$V_I(\theta)$	Signature caractéristique de l'échantillon
V_I	Vitesse caractéristique de l'onde longitudinale
V_{IC}	Vitesse longitudinale du substrat
$V_{lens}(z)$	Réponse de la lentille
V_{liq}	Vitesse de l'onde ultrasonore dans le liquide
V_R	Vitesse de l'onde de fuite de Rayleigh
V_{RC}	Vitesse de Rayleigh calculée
V_{RS}	Vitesse de Rayleigh simulée
V_{Rn}	Vitesse de Rayleigh normalisée
$V_S(z)$	Signature acoustique de l'échantillon
V_t	Vitesse caractéristique de l'onde transversale
V_V	Vitesse de vibration
X	Distance
Z	Distance de dé-focalisation
Z	Impédance acoustique
ZB	Structure Zinc Blende (B1)
Z_{in}	Impédance intermédiaire
Δz	Période des oscillations
α	Coefficient d'absorption
λ	Longueur d'onde acoustique

θ_L	Angle critique d'excitation du mode longitudinale
θ_T	Angle critique d'excitation du mode transversale
θ_c	Angle d'excitation critique
θ_i	Angle d'incidence
θ	Angle d'incidence
θ_R	Angle de Rayleigh
ψ	Angle entre l'axe x et la direction de propagation
β_{is}	coefficient de compressibilité isotherme.
ν	Coefficient de poisson
σ_{ij}	Composants du tenseur de contraintes
ε_{ij}	Composants du tenseur de déformations
φ	Constante
θ_{lens}	Demi-angle d'ouverture de la lentille
ρ	Densité
ρ_0	Densité à pression nulle
ρ_{liq}	Densité du liquide
ρ_{sol}	Densité du solide
ω	Impulsion acoustique
δ	Rapport des vitesses acoustiques
ζ	Résolution
Γ_{ij}	Tenseur de Christoffel,

SOMMAIRE

INTRODUCTION GÉNÉRALE	02
CHAPITRE I : GÉNÉRALITÉS SUR LES PROPRIÉTÉS DES OXYDES MÉTALLIQUES ET SEMI-CONDUCTEURS III-V	
I.1 INTRODUCTION	05
I.2 DÉFINITIONS	05
I.3 STRUCTURES	06
I.3.1 Oxydes métallique	06
I.3.2 semi-conducteurs III-V	07
I.4 PROPRIÉTÉS PHYSIQUES.	09
I.4.1 Propriétés électroniques.	10
I.4.2 Propriétés optiques.	11
I.4.3 Propriétés mécaniques	13
<i>a) Dureté</i>	14
<i>b) Résistance à la rupture</i>	14
I.5 NOTION DE PRESSION	15
I.6 AVANTAGES ET INTERETS DES MATÉRIAUX ÉTUDIÉS	17
I.7 MÉTHODOLOGIE	17
I.7.1. Etapes de calcul	17
<i>a) Formule du coefficient de réflexion</i>	17
<i>b) Détermination du coefficient de réflexion sans pression</i>	18
<i>c) Formulation de la signature acoustique</i>	19
<i>d) Analyse spectrale des signatures acoustiques via FFT</i>	19
I.7.2. Conditions de simulation	20
I.8 PROPRIÉTÉS ÉLASTIQUES DES MATÉRIAUX ÉTUDIÉS	20
I.8.1 Propriétés élastiques des oxydes métalliques	20
I.8.2 Propriétés élastiques des composés GaN, GaP et GaAs	23

I.9 PROCÉDURE DE CALCUL DES VITESSES DE RAYLEIGH	23
I.9.1 Onde de Rayleigh	24
I.9.2 Méthode de calcul de la vitesse de Rayleigh	24
I.10 CALCUL DES CONSTANTES ÉLASTIQUES	25
I.10.1 Module de Young	25
I.10.2 Module de cisaillement	25
I.11 CONCLUSION	26

CHAPITRE II: MICROCARACTERISATION ACOUSTIQUE DU MgO ISOTROPE ET ANISOTROPE SOUS PRESSION

II.1 INTRODUCTION	29
II.2 CARACTÉRISATION DU MgO _{ISOTROPE} SOUS PRESSION	29
II.2.1 Influence de la pression sur les coefficients de réflexion	30
II.2.2 Influence de la pression sur les signatures et spectres de FF	31
II.2.3 Effet de la pression sur la vitesse de Rayleigh	31
II.3 CARACTÉRISATION DU MgO _{anisotrope} SOUS PRESSION	32
II.3.1 Effet de la pression sur les coefficients de réflexion	33
a) <i>Analyse des coefficients pour MgO_{<100>}</i>	33
b) <i>Analyse des coefficients pour MgO_{<110>}</i>	34
c) <i>Analyse des coefficients pour MgO_{<111>}</i>	35
II.3.2 Effet de la pression sur les signatures acoustiques et spectres de FFT	36
a) <i>La structure eau/MgO_{<100>}</i>	36
b) <i>La structure eau/MgO_{<110>}</i>	37
c) <i>La structure eau/MgO_{<111>}</i>	38
II.3.3 Effet de la pression la vitesse de Rayleigh	39
a) <i>Variation de vitesse de Rayleigh en fonction de P pour MgO_{<111>}</i>	39
b) <i>Variation de vitesse de Rayleigh en fonction de P pour MgO_{<100>}</i>	40
c) <i>Variation de vitesse de Rayleigh en fonction de P pour MgO_{<110>}</i>	41
II.4 CALCUL DES CONSTANTES ÉLASTIQUES	41
II.5 COMPARAISON DES RÉSULTATS DU MgO ISOTROPE ET ANISOTROPE	43

II.5.1 Influence de l'anisotropie et de la pression sur l'efficacité de génération	43
II.5.2 Influence de la pression sur les vitesses de Rayleigh normalisées	44
II.6. CONCLUSION	45

**CHAPITRE III: ÉTUDE DE L'EFFET DE LA PRESSION SUR LES
PROPRIÉTÉS ACOUSTIQUES DES OXYDES MÉTALLIQUES
ET DES SEMI-CONDUCTEURS**

III.1 INTRODUCTION.	47
III.2 ÉTUDE DE L'EFFET DE LA PRESSION SUR LES PROPRIÉTÉS ACOUSTIQUES DES MATÉRIEUX XO (X= Ba, Ca, Sr, Mg et Cd)	48
III.2.1 Effet de la pression sur les coefficients de réflexion	48
III.2.2 Effet de la pression sur les signatures acoustiques et spectre de FFT	52
III.2.3 Effet de la pression sur les vitesses de Rayleigh	55
III.2.4 Détermination des constantes élastiques	56
III.2.5 Etude de la transition de phase dans les oxydes métalliques	58
<i>a) Calcul de la distance interatomique</i>	59
<i>b) Relation pression de transition et distance interatomique</i>	59
III.3 PROPRIÉTÉS ÉLASTIQUES DES MATÉRIAUX GaY SOUS PRESSION	60
III.3.1 Analyse des coefficients en fonction de la pression	60
III.3.2 Variations des signatures acoustiques et des spectres de FFT	63
III.3.3 Effet de la pression sur la vitesse de Rayleigh	65
III.3.4 Influence de la pression sur les constantes élastiques	66
III.3.5 Pression De Transition	67
III.4 CONCLUSION	68
CONCLUSION ET PERSPECTIVES	70
RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES	72

Introduction Générale

Parmi les méthodes de contrôle non destructif, qui utilise les ultrasons dans une gamme de fréquence allant du méga Hertz au giga Hertz, nous citons la microscopie acoustique. Cette technique permet d'extraire les propriétés élastiques des matériaux [1-3]. Ses avantages résident essentiellement dans la quantification des constantes élastiques des matériaux de façon locale. De plus, la possibilité de pénétrer les matériaux optiquement opaques [4].

Les microscopes acoustiques en général ont été conçus pour étudier la structure d'un échantillon en particulier au-dessous de la surface. Les premières techniques de microscope acoustique furent celle du SAM (Scanning Acoustic Microscopy) [5] et celle du SLAM (Scanning Laser Acoustic Microscopy) [6,7].

On trouve que le microscope acoustique à balayage (SAM) [8,9] qui constitue la dernière génération de l'avancée technologique est le moyen le plus approprié pour l'utilisation aussi bien en qualitative (imagerie) qu'en quantitatif [10-12]. Cet instrument utilise un disque transducteur et une lentille sphérique afin de produire un jet d'ondes incident.

Dans ce travail, nous nous intéressons à l'étude des matériaux, dans le domaine élastique et dont l'état d'un solide peut être caractérisé par : (i) les déformations qui résultent des modifications des positions des particules, soumise à des déplacements sous l'action des forces extérieures et (ii) les contraintes qui apparaissent dans un solide déformé. Ces contraintes se transmettent de proche en proche par les forces de liaison entre atomes [13-18].

L'étude du comportement des matériaux sous l'effet de la pression est l'un des objectifs principaux de ce travail [19]. Afin de comprendre ce comportement, il est important de connaître leurs propriétés élastiques. Pour atteindre cet objectif, nous étudions les propriétés élastiques de plusieurs types de matériaux (oxydes métalliques et semi-conducteurs). Nous déterminons leurs coefficients de réflexion, signatures acoustiques, spectres de FFT, vitesses de Rayleigh et leurs constantes élastiques sous différentes pressions.

Cette thèse comprend trois chapitres. Après une introduction générale, une étude bibliographique sur les matériaux étudiés (oxydes métalliques et semi-conducteurs III-V) et

une présentation de la méthode utilisée ainsi que ses différentes étapes de simulation, fait l'objet du premier chapitre.

Le second chapitre a été consacré à la micro-caractérisation acoustique du MgO isotrope et anisotrope (suivant trois orientations ; $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$) mis sous pression via des simulations effectuées dans les conditions de fonctionnement d'un microscope acoustique à balayage en mode de réflexion, (*SAM : Scanning Acoustic Microscopy*).

Enfin, nous abordons l'étude de l'effet de la pression sur les paramètres acoustiques ($R(\theta)$, $V(z)$ et spectres de FFT) de quelques oxydes métalliques (BaO, CaO, SrO, MgO et CdO), ainsi que l'investigation de l'effet de la pression sur les propriétés et les modules élastiques des semi-conducteurs III-V (GaN, GaP et GaAs) dans le troisième chapitre.

Nous finirons cette étude par une conclusion générale qui regroupe les résultats finaux ainsi que des perspectives des prochains travaux.

CHAPITRE I

Généralités sur les Propriétés des Oxydes Métalliques et Semi-conducteurs III-V

I.1 INTRODUCTION

Les matériaux semi conducteurs jouent un rôle très important dans les dispositifs électroniques et optoélectroniques. C'est grâce aux travaux réalisés par L. Esaki et R. Tsu en 1970 [1], sur les couches minces en semi-conducteurs ainsi que leurs applications, que la recherche scientifique a été bien avancée sur les principales propriétés des hétérostructures semi-conductrices.

Récemment, des caractérisations ont été effectuées à l'aide des méthodes ultrasonore en mode de réflexion pour l'investigation des matériaux en générale et des semi-conducteurs en particulier. Cette technique permet la détermination de différentes propriétés acoustiques (coefficients de réflexion $R(\theta)$, signatures acoustiques $V(z)$ ainsi que leurs transformées rapide de Fourier, FFT) de plusieurs matériaux qui ne sont pas de la même nature. Ainsi, dans ce chapitre, nous avons :

- ✓ donné les principales propriétés électronique, optique, mécanique et élastique des matériaux étudiés ; XO (X= Ba, Sr, Ca, Mg et CdO) et GaY (Y= N, P et As)
- ✓ présenté la méthodologie ainsi que les différentes étapes de calcul afin d'expliquer comment fonctionne notre logiciel de simulation. Aussi, quelles sont les conditions nécessaires aux investigations.
- ✓ Expliqué la méthode de calcul des vitesses acoustiques du mode de Rayleigh, V_R , et les constantes élastiques : Module de Young, E, et celui de cisaillement, G.

I.2 DÉFINITIONS

Les matériaux semi-conducteurs de type III-V présentent en général une bonne mobilité électronique grâce à leur bande interdite directe. Ces composés sont constitués d'un ou de plusieurs éléments de la colonne III (tel que : Bore, Galium, Aluminium, etc.) et des éléments de la colonne V (tel que : Arsenic, Antimoine, Phosphore, etc.) du tableau de Mendeleïev. Le tableau (I.1) regroupe la classification périodique de certains éléments chimiques.

Dans le présent travail, nous nous sommes intéressés aux composés à base de gallium (Ga) avec du nitrure (GaN), du phosphore (GaP) ou de l'arsenic (GaAs) dont les applications couvrent plusieurs domaines. Nous citons particulièrement l'optoélectronique comme diodes lasers, cellules solaires, etc. et l'électronique comme transistors [2].

Tableau I.1 : Extrait du tableau périodique de Mendeleïev [3]

III	IV	V
$10.81 \text{ } ^5\text{B}$	$12.01 \text{ } ^6\text{C}$	$14.01 \text{ } ^7\text{N}$
$26.98 \text{ } ^{13}\text{Al}$	$28.09 \text{ } ^{14}\text{Si}$	$30.79 \text{ } ^{15}\text{P}$
$69.74 \text{ } ^{31}\text{Ga}$	$72.59 \text{ } ^{32}\text{Ge}$	$74.92 \text{ } ^{33}\text{As}$
$114.82 \text{ } ^{49}\text{In}$	$118.69 \text{ } ^{50}\text{Sn}$	$121.75 \text{ } ^{51}\text{Sb}$

Par contre, pour les oxydes métalliques qui sont composés d'un oxyde et d'un métal, nous avons par exemple : l'oxyde de Barium (BaO), l'oxyde de Calcium (CaO), l'oxyde de Strontium (SrO), l'oxyde de Magnésium (MgO) et l'oxyde de Cadmium (CdO). On note :

- ✓ Ces oxydes ont un comportement semi-conducteur à hautes température (de 400 à 800°C).
- ✓ Ils sont très utilisés comme capteurs de gaz aussi comme autonettoyants (photocatalyse).
- ✓ Ils sont des agents de vulcanisation des élastomères halogénés ; un système de vulcanisation à base d'oxyde de Zinc (ZnO) et d'oxyde de Magnésium (MgO) est généralement très utilisé.

I.3 STRUCTURES

I.3.1 Oxydes métalliques

Tous les métaux forment des oxydes avec l'oxygène à cause de l'agressivité du dioxygène qui recouvre tous les métaux d'une fine couche d'oxyde (même l'or). L'intérêt est de savoir si la couche formée va protéger le métal en dessous (phénomène appelé passivation) ou pas (comme le fer). Sans cette couche d'oxyde, une barre de métal coupée en deux se recollerait par simple contact.

Enfin, les oxydes font partie plus généralement de la famille des composés de l'oxygène au même titre que les peroxydes, les super- oxydes et les ozonures [4].

Les oxydes métalliques sont parmi les plus importants des solides inorganiques, par exemples : Oxydes: XO (e.g. Ba, Ca, Sr, Mg...) et les dioxydes: XO₂ (e.g. Ti, Nb, Cr, Mo, Ge, Pb & Sn) ayant la même structure cristalline comme montre la figure (I.1).

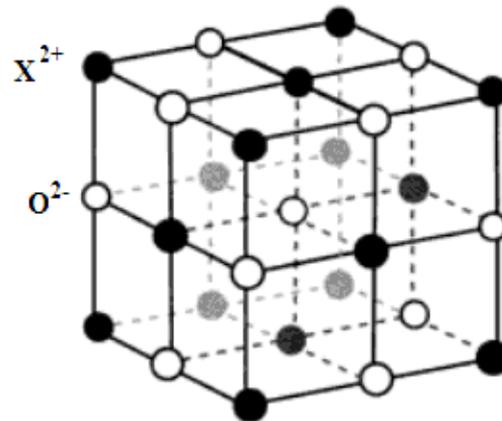


Figure I.1 : Structure cristalline des oxydes métalliques \bullet X^{2+} \circ O^{2-} Cubique

I.3.2 Semi-conducteurs III-V

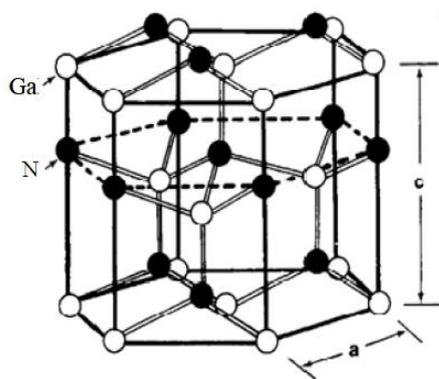
Les composés III-V cristallisent généralement dans une structure zinc-blende. Ce réseau est constitué de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées (cfc) interpénétrés, l'un étant formé par les éléments III et l'autre par les éléments V.

À l'échelle nano-scopique, la structure wurtzite devient également stable pour certains matériaux (III-V) (GaAs, InAs) et elle offre une autre possibilité d'ajuster leur propriété optoélectroniques, lorsque cette transition est bien contrôlée. Plusieurs études ont montré le contrôle de cette transition pour des nano-fils ou des boîtes quantiques [5].

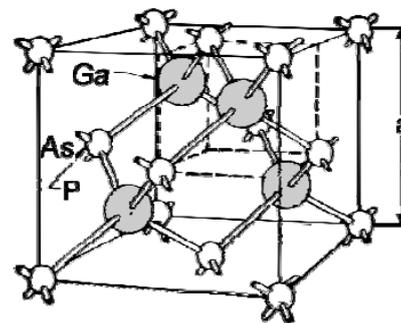
Le tableau (I.2) [6] regroupe les structures cristallines de quelques composés III-V avec leurs groupes spacieux ainsi que les paramètres de mailles (a et c). La figure (I.2) [5] illustre les structures cristallines pour les matériaux : GaN, GaP, GaAs .

Tableau I.2 : Structure cristalline, groupe et paramètres de maille a et c ($T = 300K$) pour les semi-conducteurs III-V : d = diamond; zb = zinc-blende; h = hexagonal; w = wurtzite. [6]

composé III-V	structure cristalline	Groupe	a (Å)	c (Å)
c-BN	Zb	F43m(Td)	3.6155	
h-BN	H	P63/mmc (D6h)	2.5040	6.6612
BP	Zb	F43m(Td)	4.5383	
BAAs	Zb	F43m(Td)	4.7770	
w-AlN	W	P63mc (C6v)	3.1120	4.3800
c-AlN	zb	F43m(Td)	4.9821	
AlP	zb	F43m(Td)	5.4635	
AlAs	zb	F43m(Td)	5.6614	
AlSb	zb	F43m(Td)	6.1355	
α -GaN	W	P63mc (C6v)	3.1896	5.1855
β -GaN	zb	F43m(Td)	4.5200	
GaP	zb	F43m(Td)	5.4508	
GaAs	zb	F43m(Td)	5.6533	
GaSb	zb	F43m(Td)	6.0959	
InN	W	P63mc (C6v)	3.5480	5.7601
InP	zb	F43m(Td)	5.8690	
InAs	zb	F43m(Td)	6.0583	
InSb	zb	F43m(Td)	6.4793	



Wurtzite (GaN)



Zinc Blend (GaP et GaAs)

Figure I.2 : Mailles cristallographiques des composées GaN, GaP et GaAs[5].

I.4 PROPRIÉTÉS PHYSIQUES

Les composés incluant du bord, de l'aluminium, ou de l'azote et le phosphore de gallium ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs, ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. Par ailleurs, les éléments lourds, comme le thallium ou le bismuth, donnent des composés à caractère métallique. Pour des applications électroniques et optoélectroniques, on considérera donc essentiellement les composés à base de gallium (GaAs, GaSb), ou d'indium (InP, InAs, InSb), dont les propriétés sont les plus intéressantes [7].

La formation d'alliages ternaires comme $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ou $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ permet d'ajuster certaines propriétés comme la largeur de la bande interdite (pour les applications optoélectroniques), la mobilité des porteurs (pour les applications électroniques) ou encore la constance de réseau, importante pour la croissance épitaxiale sur des substrats silicium par exemple. Nous citons dans le tableau (I.3) [4] quelques propriétés des oxydes : BaO, CaO, SrO, MgO et CdO, dont nous remarquons que la température de fusion proportionnelle à la densité du matériau considéré.

Tableau I.3 : Quelques propriétés caractéristiques des oxydes métalliques [4].

Propriétés	BaO	SrO	MgO	CdO	CaO
T. fusion (°C)	1920	2783	2800	900-1000	2570
T. ébullition (°C)	2000	3200	3600	1559	2850
Densité $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	5.72	4.7	3.58	8.15	3.3
Masse molaire $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$	153.32	103.63	40.30	128.41	56.07

Le tableau (I.4) [8] donne des paramètres caractéristiques pour quelques composés binaires III-V: énergie de bande interdite, E_g ; la longueur d'onde du seuil d'absorption, λ_g ; la masse effective des électrons, m^* , et le paramètre de maille du cristal, a_0 . Nous nous sommes intéressés à l'étude du GaP et GaAs au vu de leur grande importance dans plusieurs domaines d'application.

Notons que les composés (binaires ou ternaires) n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, en particulier de la structure des bandes, montre notamment que les éléments les plus légers donnent des composés à large bande interdite, dont les propriétés se rapprochent de celles des isolants.

Tableau. I.4: Paramètres caractéristiques de composés III-V [8]

Composé III-V	E_g (eV)	λ_g (μm)	a_0 (Å°)
GaAs	1.42	0.87	5.653
GaP	2.26	0.55	5.449
BN	7.5	0.17	3.615
AlP	2.45	0.51	5.463
AlAs	2.16	0.57	5.661
AlSb	1.58	0.75	6.138
GaSb	0.72	1.85	6.095
InP	1.35	0.92	5.868
InAs	0.36	3.44	6.058
InSb	0.17	7.30	6.479

I.4.1 Propriétés électroniques

Les modes de conduction électrique des oxydes de métaux de transition sont régis par le comportement des électrons externes des cations, c'est-à-dire ceux placés dans les couches périphériques. Deux grandes théories limites peuvent décrire les électrons périphériques dans les solides : la théorie des électrons collectifs (théorie des bandes) et la théorie des électrons localisés [9].

L'allure générale des bandes d'énergie est la même pour tous les composés III-V. La plupart de ces matériaux possèdent un gap direct (excepte: GaP, AlAs, AlSb ou Al), c'est-à-dire que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande conduction sont situés au centre de la zone de Brillouin, en $k=0$ [10].

La figure (I.3) montre la position des composés binaires, et les lignes représentent l'évolution du gap " E_g " et du paramètre cristallin " a " en fonction de la composition des alliages ternaires *et* quaternaires.

Ce diagramme permet de connaître la composition de tout alliage ternaire ou quaternaire susceptible d'être déposé en couche mince par épitaxie sur un substrat binaire comme GaAs ou InP, afin d'obtenir le gap désiré. Les matériaux III-V offrent donc une grande variété d'alliages permettant de moduler leurs propriétés électroniques [11].

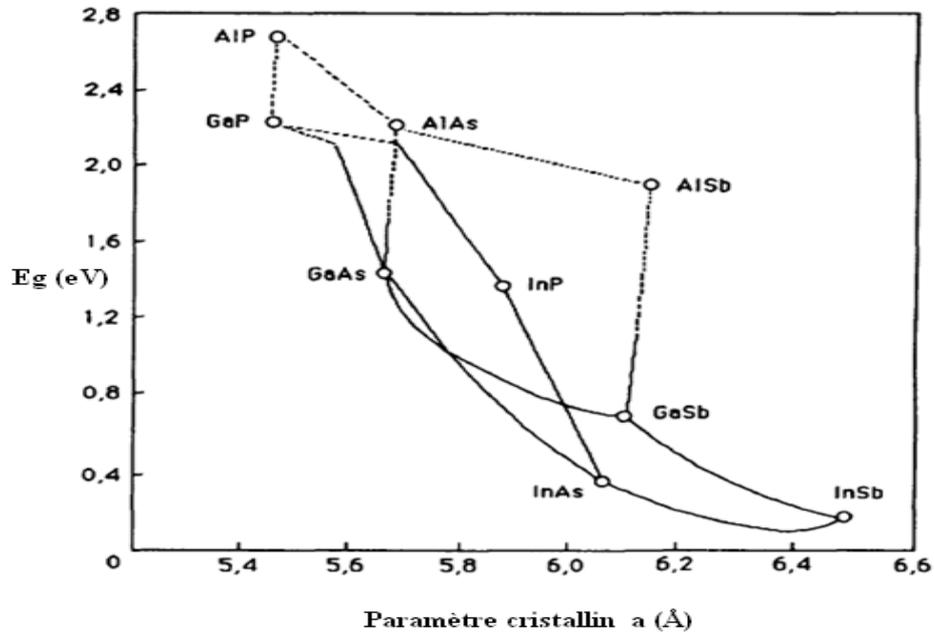


Figure I.3 : Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin pour les alliages III-V [12].

I.4.2 Propriétés optiques

L'indice de réfraction est le reflet de la "résistance" du milieu à la pénétration de la lumière; il est égal au rapport de la célérité de la lumière à la vitesse de propagation de la lumière dans un milieu.

L'indice de réfraction permet également de définir le comportement de réfraction d'une onde lumineuse à l'interface entre deux milieux. En effet, lorsque la lumière traverse deux milieux d'indice de réfraction différent, elle est réfractée selon la loi de Snell Descartes défini par:

$$n_1 \cdot \sin \varphi_1 = n_2 \cdot \sin \varphi_2 \quad (\text{I.1})$$

Les semi-conducteurs III-V sont des matériaux très importants dans les applications optoélectroniques. Un semi-conducteur à bande interdite indirecte est un très mauvais émetteur de la lumière.

En revanche, un matériau à bande directe (comme le GaAs), pour lequel les électrons et les trous se retrouvent sur les maxima de leurs bandes respectives qui sont tous les deux au point $k = 0$, est un très bon émetteur de lumière. C'est donc un bon matériau pour l'optoélectronique.

En pratique, l'indice de réfraction, n est un paramètre physique très important lié aux interactions atomiques microscopiques. Du point de vue théorique, il existe deux approches différentes:

- D'une part, considérant le cristal comme une collection des entiers individuels polarisables sous l'action du champ électrique, l'indice de réfraction pourrait être relié à la densité et à la polarisation locale de ces entiers [13].
- D'autre part, l'indice de réfraction n sera relié à l'énergie du gap, E_g , de la structure de bande du matériau par la constante diélectrique. Plusieurs modèles empiriques reliant n à l'énergie du gap E_g ont été établis [14]. Cependant, dans ces relations l'indice de réfraction est indépendant de la température et de l'énergie du photon incident.

Nous représentons dans la figure (I.4) les variations de l'indice de réfraction, n avec l'énergie du gap, E_g . Nous constatons clairement que n diminue avec l'augmentation de E_g . La variation présentée par Ravindra et al [15] décroît linéairement et passe par tous les composés étudiés. D'autre part les autres variations diminuent proportionnellement avec l'énergie, E_g .

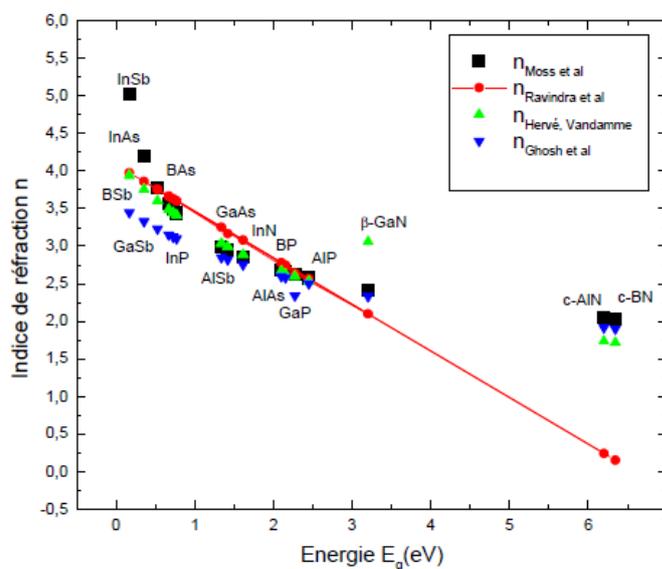


Figure I.4: Relation entre n et E_g pour les semi-conducteurs III-V à 300K [16].

I.4.3 Propriétés mécaniques

Le volume du corps ne pouvant diminuer que lorsqu'on augmente la pression, les variations du volume V et de la pression P sont donc inversement proportionnelles.

Par ailleurs, une compression sous une pression P permet de définir le module de compressibilité B (B est appelé aussi module de rigidité à la compression), qui peut être s'exprimé comme suit [15] :

$$B = - V (dP/dV) \quad (I.2)$$

Où : V est le volume du corps à une pression appliquée P . Plus B augmente, plus le matériau est peu compressible.

Nous montrons sur la figure (I.5) les variations du module de rigidité, B en fonction des distances interatomiques de certains semi-conducteurs III-V [10]. Il est impératif de dire que le matériau devient plus rigide en rapprochant les atomes les uns des autres (distance minimale).

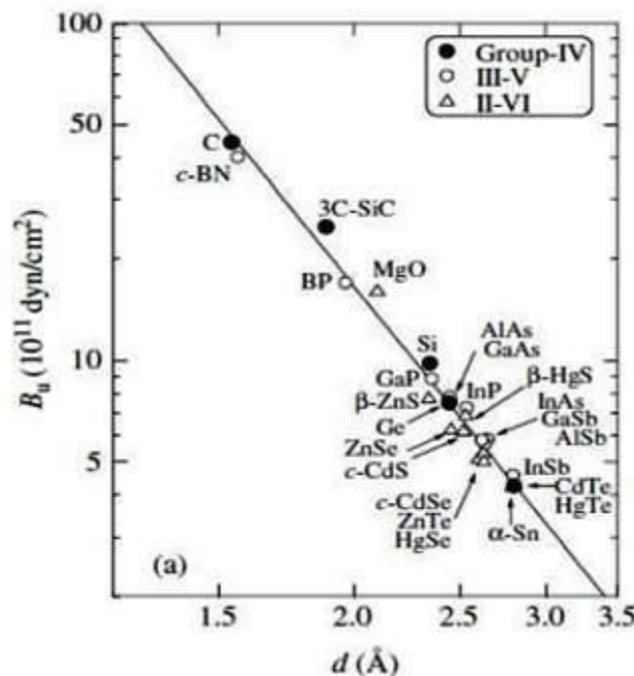


Figure I.5:Évolution du module de rigidité de certains semi-conducteurs (Groupes : IV,III-V et II-VI) en fonction de la distance interatomique [10]

Le module de compressibilité mesure donc la résistance à une modification du volume dans les solides et donne ainsi une estimation de la réponse élastique d'un matériau à une pression hydrodynamique externe.

Pour les céramiques ayant, comme les métaux, un module d'Young bien défini, c'est-à-dire que le module reste constant pendant l'application d'une charge (contrairement au polymère dont l'élasticité n'est pas linéaire), les liaisons ioniques et covalentes sont très cohésives, on note:

$$E_{\text{Céramiques}} > E_{\text{Métaux}} > E_{\text{Polymères}}$$

En outre, les céramiques sont constitués d'atomes légers (C, O, Si, Al) et présentent une structure cristalline souvent non compacte: $\rho_{\text{Métaux}} > \rho_{\text{Céramiques}} > \rho_{\text{Polymères}}$. Le module spécifique des céramiques est donc très favorable : $E/\rho)_{\text{Céramiques}} \gg E/\rho)_{\text{Métaux}}$.

Cette propriété fait que les céramiques constituent des matériaux de choix comme charge renforçant les composites [16].

a) Dureté

Les céramiques présentent la plus grande dureté, H , de tous les matériaux. Elles sont utilisées comme abrasifs pour couper, meuler ou polir tous les matériaux, y compris le verre [16].

$$H_{\text{Céramiques}} > H_{\text{Alliages Métalliques}} > H_{\text{Métaux purs}} \gg H_{\text{Polymères}}$$

b) Résistance à la rupture

La plasticité en tête de fissure offre aux métaux leur ténacité élevée. Le fait que les céramiques contiennent toujours des fissures et des porosités diminue largement leur ténacité.

$$K_{Ic \text{ Céramique}} \sim 1/50 K_{Ic \text{ Métaux}}$$

La résistance mécanique en traction dépend de la ténacité et de la longueur des plus grandes fissures, am , selon la relation :

$$R_{mc} = K_{Ic} / (\pi am)^{1/2} \quad (I.3)$$

Avec πa_m est la longueur de la plus grande fissure. Quantitativement, on trouve pour les céramiques des valeurs de l'ordre de : $K_{Ic} \sim 0.2 - 2 \text{ MPa.m}^{1/2}$, $R_{mc} \sim 10-300 \text{ MPa}$ et $a_m \sim 10-60 \mu\text{m}$. La relation (I.3) montre que la résistance en traction décroît lorsque la longueur de la plus grande fissure augmente.

L'application numérique montre que les tailles caractéristiques des fissures provoquant la rupture sont très faibles, de l'ordre de la taille des grains d'un matériau fritté. Il existe deux manières d'améliorer la résistance mécanique des céramiques :

- ✓ Diminuer la longueur de la plus grande fissure par un contrôle de la granulométrie des poudres et des méthodes de mise en œuvre.
- ✓ Augmenter K_{Ic} à l'aide de composites ou d'alliage, comme en incorporant de la paille hachée dans les briques ou de la fibre de verre dans le ciment.

I.5 NOTION DE PRESSION

La pression, P est une notion physique fondamentale. En tant que paramètre physique, la pression, tout comme la température, joue un rôle extrêmement important dans la plupart des domaines. La pression admet, selon les branches de la physique que l'on considère, plusieurs définitions qui coïncident toutes. En mécanique, la pression est définie localement à partir de la composante de la force normale à la surface sur laquelle elle s'exerce.

En mécanique des milieux continus, la pression est définie comme le tiers de la trace du tenseur des contraintes c'est-à-dire la moyenne des termes diagonaux de ce tenseur. En mécanique des fluides incompressibles, la pression est le multiplicateur de Lagrange permettant de vérifier l'incompressibilité du matériau.

On a alors à faire à une définition implicite de la pression. Du point de vue thermodynamique, il s'agit d'une grandeur intensive. Il est à noter qu'il existe plusieurs types de pressions : pression absolue, vide, pression atmosphérique (ou barométrique), pression relative, pression différentielle, pression hydrostatique.

A l'échelle métrique internationale, l'unité de mesure de la pression est le pascal (Pa) : une pression de 1 pascal correspond à une force de 1 newton exercée sur une surface de 1m^2 .

Une équation reliant la pression appliquée et le volume correspondant, elle est appelée, équation d'état de troisième ordre de Birch-Murnaghan (Third order equation of state of Birch- Murnaghan (EOS (BM3)), qui est donnée par la formule (I.4) [17].

$$P(V) = \frac{3}{2} B_0 \left[\left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{7}{3}} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{5}{3}} \right) \right] \left\{ 1 + \frac{3}{4} (B_0' - 4) \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right] \right\} \quad (I.4)$$

Où V_0 est le volume de la maille à $P = 0$, et V est le volume de la maille à $P \neq 0$

La figure (I.6) [18], présente un exemple de la dépendance des paramètres de la mailles a et la pression hydrostatique des trois semi-conducteurs: Si, GaAs et ZnTe Ces valeurs des paramètres de mailles sont calculées en moyen d'utilisation d'équation d'état de Murnaghan [17].

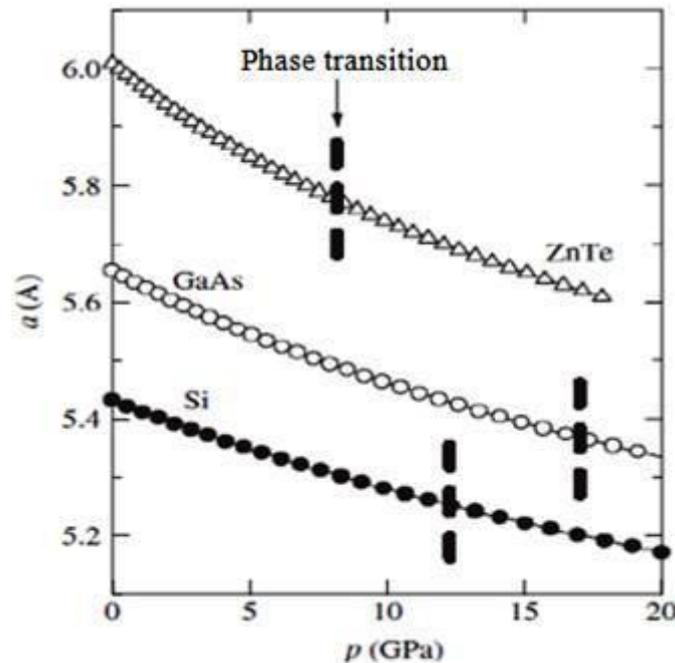


Figure I.6: Dépendance du paramètre de maille a et de la pression hydrostatique des semi-conducteurs : Si, GaAs et ZnTe [18].

I.6 AVANTAGES ET INTERÊTS DES MATÉRIAUX ÉTUDIÉS

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne.

Les principaux avantages des semi-conducteurs III-V sont les suivants :

- leur propriété semi-isolant (substrat SI) permet la fabrication des circuits intégrés hyperfréquences.
- leur résistance aux radiations.
- leur capacité de travailler à des températures plus importantes que celle du silicium standard, ce qui est important pour les applications militaires.
- Leurs performances vitesse/consommation nettement supérieure à celles des calculateurs utilisant des circuits en silicium (applications numériques).
- Leur très vaste domaine de fréquences couvert puisqu'il s'étend de 1 GHz à plus de 100 GHz.

Ce dernier aspect est fondamental, parce que les composants à base de silicium sont actuellement limités à une fréquence inférieure à quelque Giga Hertz [19].

I.7 MÉTHODOLOGIE

I.7.1. Etapes de calcul

a) Formule du coefficient de réflexion

Les conditions de continuité du déplacement, à travers l'interface, et de la force d'attraction doivent être vérifiées lorsqu'une onde est incidente sur une interface. Si l'amplitude des ondes en incidence normale est égale à l'unité et les amplitudes des ondes réfléchi et transmise sont respectivement R et T, les deux conditions de continuité doivent être vérifiées :

$$\text{- Continuité de la force :} \quad T - R = 1 \quad (\text{I.5a})$$

$$\text{- Continuité de la vitesse :} \quad (1-R)/Z_1 = T/Z_2 \quad (\text{I.5b})$$

avec Z_1 et Z_2 sont les impédances acoustiques des deux milieux ; notons que le signe moins est dû au changement de la direction de propagation de l'onde réfléchie. La combinaison des deux équations (I.5a) et (I.5b) donne :

$$R = (Z_2 - Z_1) / (Z_2 + Z_1) \quad (I.6)$$

Le coefficient de réflexion, pour une interface liquide/solide, est donné par la relation :

$$R(\theta) = (Z_{\text{Sol}} - Z_{\text{liq}}) / (Z_{\text{Sol}} + Z_{\text{liq}}) \quad (I.7)$$

Avec Z_{Sol} et Z_{liq} sont les impédances acoustiques respectivement du solide et du liquide données par les relations suivantes :

$$Z_{\text{Sol}} = Z_L \cos^2 2\theta_T + Z_T \sin^2 2\theta_T \quad (I.8a)$$

$$Z_{\text{liq}} = \rho_{\text{liq}} V_{\text{liq}} / \cos\theta \quad (I.8b)$$

Avec Z_L et Z_T sont les impédances acoustiques longitudinale et transversale respectivement, θ_T c'est l'angle critique d'excitation du mode transversal, ρ_{liq} et V_{liq} sont la densité du liquide de couplage et la vitesse de propagation des ondes dans ce liquide [20].

b) Détermination du coefficient de réflexion sans pression

Nous représentons dans la figure (I.7) la courbe obtenue du coefficient de réflexion, $R(\theta)$, en fonction de l'angle d'incidence, θ_i , pour la structure eau/MgO sans pression. L'amplitude (---) est donnée sur l'axe gauche de la courbe et la phase sur l'axe droit. En augmentant θ_i , on peut observer deux fluctuations pour l'amplitude ainsi que pour la phase.

La première fluctuation correspond à l'angle critique d'excitation des angles longitudinale, θ_L , et la seconde (en amplitude) correspond à celle des ondes transversales θ_T , au-delà de cette angle (θ_T) l'amplitude tend vers l'unité à cause de la réflexion totale de l'énergie. La seconde fluctuation en la phase (—) correspond à l'angle critique d'excitation

des ondes de Rayleigh, θ_R . A une incidence proche de θ_R , la phase subit un grand changement de (2π) et un très petit changement en θ_L .

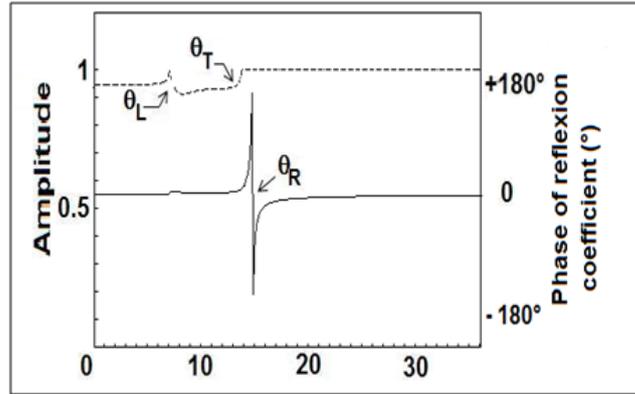


Figure I.7 : Coefficient de réflexion $R(\theta)$ de la structure eau/MgO sans pression

c) Formulation de la signature acoustique

La signature acoustique $V(z)$ est donnée par [21]:

$$V(z) = \int P^2(\theta) R(\theta) e^{i2kz \cos(\theta)} \sin(\theta) \cos(\theta) d\theta \quad (I.9)$$

θ : est l'angle entre le vecteur d'onde, K , et l'axe de la lentille, z ; $P(\theta)$ est la fonction pupille de la lentille et $R(\theta)$ est la fonction de réflexion de l'échantillon. La fonction pupille est élevée au carré car les ondes passent dans les deux sens à travers la lentille. Les différents modèles de calcul de la signature acoustique nécessitent la connaissance du pouvoir réflecteur ou coefficient de réflexion des structures en fonction de l'angle d'incidence, $R(\theta)$. Le plus utilisé est celui de Sheppard et Wilson [21].

d) Analyse spectrale des signatures acoustiques via FFT

Le traitement de la signature acoustique s'effectue par transformée de Fourier rapide, FFT. A partir de la raie principale du spectre du FFT on peut déterminer non seulement la vitesse de propagation du mode correspondant mais également son efficacité de génération. Cependant, plusieurs solutions permettent d'avoir des raies ayant la même énergie alors que l'amortissement et l'amplitude de la signature acoustique sont très différents [22].

L'analyse spectrale des courbes $V(z)$ via FFT fournit la période spatiale des pseudos oscillations. La figure (I.8b) montre les spectres de FFT des courbes de $V(z)$ de la figure (I.8a). Toute variation dans les $V(z)$ entraîne nécessairement des variations dans les spectres de FFT. On observe l'existence d'un pic principal représentant le mode le plus dominant qui est celui de Rayleigh. Cependant l'efficacité de ce mode, représentée par sa hauteur [23].

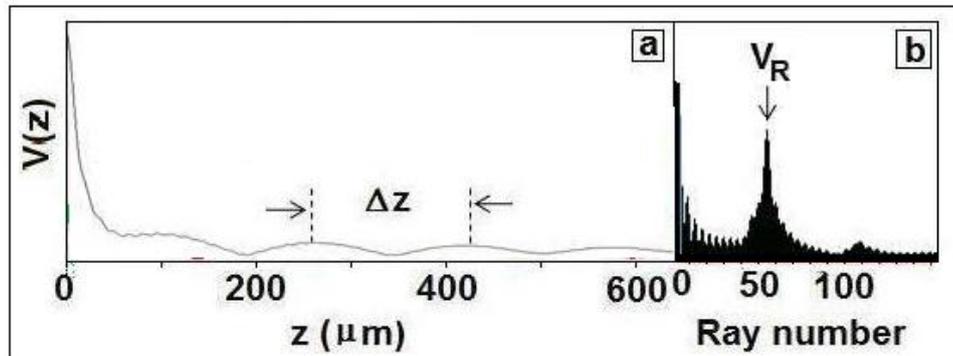


Figure I.8 : (a) Signature acoustique, $V(z)$, et (b) spectre de FFT du MgO sans pression

I.7.2. Conditions de simulation

Le modèle de Sheppard et Wilson [21] nécessite la connaissance des valeurs des vitesses des ondes longitudinale et transversale; V_L , V_T ainsi que la densité ρ du matériau massif. Pour cela, nous avons adapté pour cette étude le principe d'un microscope acoustique opérant en mode de réflexion, dont les conditions de fonctionnement normales sont les suivantes :

- Une fréquence de travail de 142 MHz,
- l'eau comme liquide de couplage ($\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ et $V_L = 1500 \text{ m/s}$),
- un demi-angle d'ouverture de 50° .

I.8 PROPRIÉTÉS ÉLASTIQUES DES MATÉRIAUX ÉTUDIÉS

I.8.1 Propriétés élastiques des oxydes métalliques

Nous nous sommes intéressés aux paramètres acoustiques de quelques oxydes métalliques: BaO , CaO , SrO , [24] MgO et CdO . Ainsi, par utilisation respective des relations [25] : (10), (11) et (12) nous avons calculé ; la densité, ρ ; les vitesses longitudinales, V_L , et transversales, V_T .

Les data utilisés sont regroupées dans le tableau (I.5) pour les composés BaO, CaO et SrO (basses pressions < 45GPa) et le tableau (I.6) pour les composés MgO et CdO (hautes pressions > 100GPa). Avec ρ_0 est la densité sans pression citée dans le tableau (I.3).

$$\rho = \rho_0(V_0/V) \quad (\text{I.10})$$

$$V_L = (3B+4G)^{1/2}/(3\rho)^{1/2} \quad (\text{I.11})$$

$$V_T = (G/\rho)^{1/2} \quad (\text{I.12})$$

Tableau I.5: Propriétés élastiques de CaO, BaO et SrO pour différentes pressions [24].

P(GPa)	BaO			CaO			SrO		
	V_0/V	G(GPa)	B(GPa)	V_0/V	G(GPa)	B(GPa)	V_0/V	G(GPa)	B(GPa)
0	1	41.63	71.01	1	64.01	100.6	1	56.03	85.7
5	1.06	55.35	97.1	1.04603	87.15	125.77	1.05263	71.5	106.3
10	1.12	66.96	123.19	1.08696	100.01	146.3	1.0989	85.02	126.1
15	1.16	76.78	144.92	1.12108	114.67	167.01	1.13766	98.55	145.9
20	1.21	86.61	165.21	1.1534	128.44	185.6	1.17647	111.11	165.7
25	1.24	94.64	179.71	1.18343	142.2	204.1	1.20919	124.64	183.8
30	1.28	101.78	192.75	1.21065	154.12	225	1.24069	138.16	203.6
35	1.31	107.14	200	1.23609	166.97	241.2	1.27065	150.72	223.4
40	1.35	113.39	205.8	1.30719	178.89	257.7	1.2987	162.32	243.2

Tableau I.6 : Propriétés élastiques de MgO [26] et CdO [27] pour différentes pressions.

P(GPa)	MgO [26]			CdO [27]		
	ρ (g/cm ³)	V_L (m/s)	V_T (m/s)	ρ (g/cm ³)	V_L (m/s)	V_T (m/s)
0	3486	9580	5910	8150	4769.8	2351.3
10	3685	10250	6200	8716.58	5292.5	2486.7
20	3856	10810	6450	9177.9	5681.7	2551.1
40	4386	12440	7060	9914.8	6275.3	2594.5
60	4596	9580	5910	10516.1	6728.9	2582.8
80	4596	13050	7250	11028.4	7102.5	2548.2
100	4785	13590	7400	11478.9	7428.7	2502.4
150	5189	14160	7690	-	-	-

Matériaux anisotropes :

Les matériaux cristallins sont généralement élastiques anisotropes ; même des matériaux cubiques sont caractérisés par trois constantes élastiques, tandis que le matériau élastique isotrope ne possède que ces trois constantes (C_{11} , C_{12} et C_{44}). Pour définir l'anisotropie élastique pour les matériaux cubiques, on utilise souvent le facteur élastique d'anisotropie $S = (S_{11} - S_{12} - S_{44}) / 2$ ou $A = 2(S_{11} - S_{12}) / S_{44}$ où les ij de S sont les compliances élastiques. Les matériaux deviennent isotropes quand $S = 0$ ou $A = 1$.

Dans cette partie, on s'intéresse à l'oxyde de magnésium, MgO anisotrope suivant trois orientations ; $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ dont les paramètres élastiques sont donnés par le tableau (I.7).

Tableau I.7: Propriétés élastiques du MgO anisotrope pour les trois directions [26].

Paramètres		$\langle 100 \rangle$		$\langle 110 \rangle$		$\langle 111 \rangle$	
P(GPa)	$\rho(\text{kg/m}^3)$	$V_L(\text{m/s})$	$V_T(\text{m/s})$	$V_L(\text{m/s})$	$V_T(\text{m/s})$	$V_L(\text{m/s})$	$V_T(\text{m/s})$
0	3486	9140	6310	9730	5360	9920	5690
5	3590	9650	6290	10010	5700	10120	5900
10	3685	10140	6300	10280	6010	10330	6140
20	3856	10970	6320	10770	6320	10710	6540
40	4144	12370	6330	11630	6330	11370	7200
60	4386	13470	6300	12300	6300	11880	7740
80	4596	14390	6290	12910	6290	12370	8150
100	4785	15240	6230	13440	6230	12790	8560
125	4998	16140	6160	14000	6160	13200	9000
150	5189	16890	6110	14450	6110	13540	9400

I.8.2 Propriétés élastiques des composés: GaN, GaP et GaAs

Les paramètres acoustiques de tous les composés GaY : la vitesse longitudinale, V_L , vitesse transversale, V_T , et la densité de la matière, ρ sont regroupés dans le tableau (I.8).

Tableau I.8: Propriétés élastiques des matériaux ; GaN, GaP et GaAs sous pression [28].

P (GPa)	GaN			GaP			GaAs		
	ρ (g/cm ³)	V_L (m/s)	V_T (m/s)	ρ (g/cm ³)	V_L (m/s)	V_T (m/s)	ρ (g/cm ³)	V_L (m/s)	V_T (m/s)
0	6100	9225	5450	4138	8556	4800	5317.6	6877	3874
5	6321.2	9622	5754	4342.1	8778	4600	5645	7035	3558
10	6510.1	9852	5733	4542.3	8889	4244	5974.8	7148	3197
15	6688.8	9977	5606	4723.7	9000	3889	6270.7	7216	2881
20	6838.6	10082	5441	4943.8	9044	3556	7109.1	7329	3761
25	6979.4	10165	5273	5539.5	9133	4689	7324.5	7555	3852
30	7101.3	10207	5085	5653.0	9333	4778	7521.3	7735	3919
35	7236.1	10207	4939	5787.4	9578	4844	7717.8	7939	3964
40	7367.1	10270	4667	5903.0	9822	4911	7877.9	8119	4032
45	8390.6	940	4939	5962.5	9956	4956	7996.4	8187	4055

I.9 PROCÉDURE DE CALCUL DES VITESSES DE RAYLEIGH

Il existe plusieurs types d'ondes acoustiques de surface, mais dans l'étude présente, nous nous sommes intéressés à celle de Rayleigh. Ceci est dû à leurs diverses utilisations, non seulement dans la détection des défauts de surfaces et dans le test non destructif mais aussi dans la fabrication des composants électrochimiques [29].

I.9.1 Onde de Rayleigh

L'onde de Rayleigh est particulièrement typique à l'acoustique, car elle dépend de la capacité du milieu à supporter les contraintes longitudinale et transversale. Elle se propage à la surface d'un solide semi-infini limité par le vide pour lequel le mouvement des particules est elliptique. Son amplitude décroît exponentiellement [29].

La difficulté de propagation des ondes acoustiques dans l'air nécessite l'utilisation d'un liquide de couplage. Dans ce cas, les ondes qui se propagent dans une structure liquide/solide, sont connues sous le nom d'ondes de Rayleigh généralisées [30] ou ondes de fuites de Rayleigh [31]. Ces ondes réémettent de l'énergie dans le liquide. Notons que l'angle critique d'excitation du mode de Rayleigh, θ_R , est défini par la loi de Snell.

Puisque les ondes de Rayleigh sont des ondes de surface, elles peuvent réagir avec le liquide sur de grandes distances.

I.9.2 Méthode de calcul de la vitesse de Rayleigh

La valeur de la vitesse de l'onde de fuite de Rayleigh, V_R , peut être déterminée par l'application des conditions aux limites à l'interface liquide/solide ; en utilisant l'approximation de Victorov [32] qui nous donne une expression approchée de la vitesse de Rayleigh en fonction des vitesses longitudinale et transversale :

$$V_R = V_T (0.718 - (V_T/V_L)^2) / (0.750 - (V_T/V_L)^2) \quad (I.13)$$

Rappelant que l'onde de Rayleigh est composée d'un déplacement longitudinal et d'un autre transversal. Elle a reçu un intérêt considérable [33] grâce à son utilité pour la détection des défauts de surface dans le test ultrasonore non destructif des matériaux. En plus, elle est employée dans la construction des lignes à retard électromécaniques utilisées pour les radars et les systèmes de télécommunication.

Il est bien établi qu'à partir de la période spatiale (la distance séparant deux maxima ou deux minima successifs) Δz , on peut déterminer la vitesse de Rayleigh, V_R , par l'utilisation de la relation suivante [23] :

$$V_R = \frac{V_{liq}}{\sqrt{1 - \left(1 - \frac{V_{liq}}{2f\Delta z}\right)^2}} \quad (\text{I.14})$$

I.10 CALCUL DES CONSTANTES ÉLASTIQUES

Le module d'élasticité (appelé aussi module élastique) est une grandeur intrinsèque d'un matériau, définie par le rapport de la contrainte à la déformation élastique provoquée par cette contrainte. La déformation est exprimée comme une grandeur sans dimension. Le comportement élastique d'un matériau homogène, isotrope et linéaire est caractérisé par deux modules (ou constantes) d'élasticité indépendants : la paire équivalente (E et G). Le module élastique exprime l'aptitude du matériau à se déformer élastiquement sous l'effet d'une contrainte ; plus le module est faible, plus l'allongement est grand [33].

I.10.1 Module de Young

Le module de Young ou module d'élasticité longitudinal est un rapport entre la contrainte de traction appliquée à un matériau, et la déformation qui en résulte (un allongement relatif) est constante, tant que cette déformation reste petite et que la limite d'élasticité du matériau n'est pas atteinte. Aussi ce module se définit par la contrainte mécanique qui engendrerait un allongement de 100% de la longueur initiale d'un matériau (il doublerait donc de longueur), si l'on pouvait l'appliquer réellement : dans les faits, le matériau se déforme de façon permanente, ou se rompt, bien avant que cette valeur soit atteinte.

Il existe plusieurs moyens pour calculer le module de Young, E, [33] la vitesse des vibrations longitudinales V_L dépend du module de Young, E et de la densité ρ comme explique la relation (I.15).

$$V_L = (E/\rho)^{1/2} \quad (\text{I.15})$$

I.10.2 Module de cisaillement

On parle du cisaillement ou du glissement lorsque les forces extérieures provoquent un déplacement de deux sections planes parallèles, l'une par rapport à l'autre, la distance entre

elles demeure inchangée. Le module de cisaillement, G est une mesure de la résistance du cisaillement d'un matériau (dans sa limite élastique) par unité de contrainte [34].

Les vitesses longitudinale, V_L et transversale, V_T , dans un matériau homogène et isotrope de densité, ρ , sont reliées aux constantes par les relations suivantes [35] :

$$E = \rho V_T^2 (3V_L^2 - 4V_T^2) / (V_L^2 - V_T^2) \quad (\text{I.16})$$

$$G = \rho V_T^2 \quad (\text{I.17})$$

Nous montrons sur le tableau (I.9) [33] l'ordre de grandeurs des modules d'élasticité pour différents types de matériaux, dont on remarque que les oxydes occupent la deuxième classe des matériaux les plus rigides et plus tenaces après les céramiques.

Tableau I.9: Modules de Young et de Cisaillement pour différents types de matériaux [33].

Matériau	E (GPa)	G (GPa)
Métaux	30-130	10-150
Oxydes	140-380	50-150
Plastiques	28-40	10-15
Verres	60-75	25-35
Céramiques	350-450	100-200

I.11 CONCLUSION

Le monde des matériaux peut se décomposer en quatre familles ; les céramiques, les métaux, les semi-conducteurs et les polymères. Ce chapitre nous a permis de présenter premièrement des généralités sur les matériaux semi-conducteurs (type III-V) et les oxydes métalliques ainsi, quelques propriétés physiques; électronique, optique, mécanique et élastique de ces derniers. Nous avons rappelé aussi les avantages et les intérêts du choix de ces matériaux. Les matériaux semi-conducteurs en général évoluent dans nos jours plus vite que d'autres matériaux. En effet, les semi-conducteurs se présentent sous plusieurs compositions chimiques avec une grande variété de structures cristallines. Ils existent sous forme d'éléments simples tels que le Si et le Ge ou des composés binaires tels que le GaAs,

ternaires, quaternaires, etc. Par ailleurs, certains semi-conducteurs présentent un comportement magnétique ou ferroélectriques et d'autres supraconducteurs.

Enfin, nous avons expliqué la méthodologie et les conditions de simulation pour le présent travail. Parmi les techniques modernes de contrôle de qualité des matériaux, nous citons la microscopie acoustique qui se présente comme un moyen potentiel dans la micro-caractérisation non destructive. Le principe de fonctionnement de cette dernière est basé sur l'émission des ondes ultrasonores par un générateur et la réception de ces mêmes ondes réfléchies, en balayant l'échantillon considéré.

CHAPITRE II

*Micro-caractérisation acoustique du MgO
isotrope et anisotrope sous pression*

II.1 INTRODUCTION

Les propriétés des cristaux pourraient être différentes selon l'orientation cristallographique. Ainsi, il est important d'étudier les différentes propriétés des matériaux: structurales, mécaniques, électriques etc. pour pouvoir maîtriser les multiples domaines d'application [1,2].

Le MgO est un oxyde simple avec une structure de NaCl stable à quelques Méga barres ; il est également caractérisé par une large gamme de stabilité température-pression. Cet oxyde trouve son application dans plusieurs domaines allant des semi-conducteurs et couches minces jusqu'aux industries nucléaire et sidérurgique en passant par l'énergie solaire, la biomécanique, le bureautique, l'automobile, etc. En appliquant la pression sur ce matériau, une transition de sa phase initiale (B1, NaCl) peut se changer à une nouvelle phase à partir de la pression de transition 205 GPa [3]

Dans ce chapitre nous présentons les résultats obtenus pour le MgO isotrope et anisotrope sous différentes pression. Nous avons utilisé une méthode non destructive basée sur l'interaction des ondes de surface avec la matière via des relations analytiques. Les paramètres suivants sont étudiés pour les deux cas du MgO : les coefficients de réflexion, les signatures acoustiques, les périodes spatiales, les angles d'excitations des modes de propagation, les vitesses de Rayleigh et les constantes élastiques.

Enfin, nous faisons une étude comparative des paramètres acoustiques (spectres FFT, V_R et Δz) entre MgO isotrope et anisotrope mis sous pression.

II.2 CARACTÉRISATION DU MGO ISOTROPE SOUS PRESSION

Les paramètres acoustiques du MgO sont calculés à partir des vitesses longitudinales, V_L , vitesses transversales, V_T , et de la densité du matériau, ρ , dont les valeurs sont données au tableau (I.6) [3].

II.2.1. Influence de la pression sur les coefficients de réflexion

Nous avons étudié ces coefficients de réflexion, $R(\theta)$, à différentes pressions [0-150] GPa, afin de mettre en évidence son influence sur $R(\theta)$. Les résultats obtenus par le calcul en utilisant la formule (I.7) dans le premier chapitre, sont représentés par les figures (II.1a) et (II.1b) en fonction des angles d'incidences. Pour plus de clarté, nous avons séparé l'amplitude de la phase. Également, nous avons superposé les parties réelles et les parties imaginaires. La figure (II.1a) montre clairement:

- ✓ Une augmentation en amplitude de $R(\theta)$ lorsque l'angle d'incidence atteint les valeurs des angles critiques longitudinaux.
- ✓ Une diminution de l'amplitude de $R(\theta)$ lorsque l'angle d'incidence atteint les valeurs des angles critiques transversales.

Pour la figure (II.1b), nous Remarquons que la phase de $R(\theta)$ change de 2π pour une très faible variation de θ . C'est le mode de Rayleigh, qui montre ce déphasage de 2π , qui est beaucoup plus important, par conséquent, il domine tous les autres modes qui pourraient exciter.

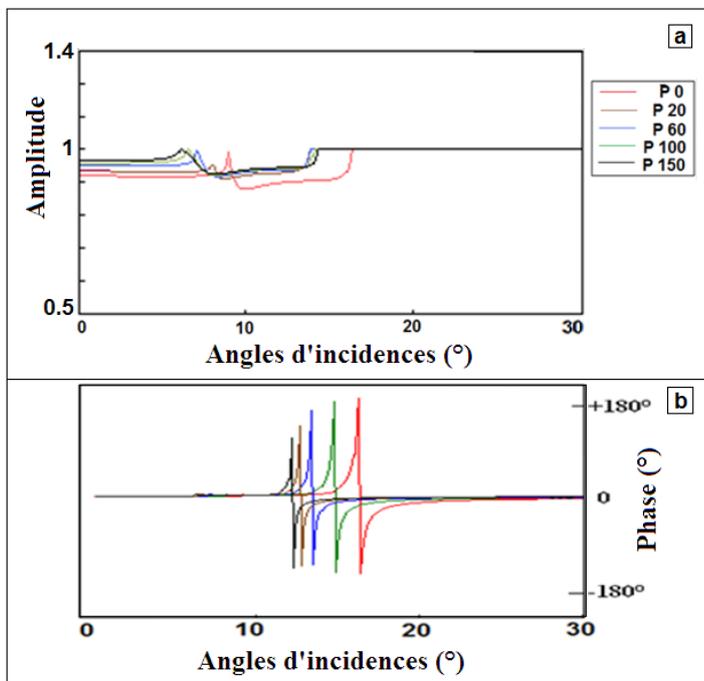


Figure II.1: (a) Amplitudes et (b) phases de $R(\theta)$ pour MgO_{iso} en fonction des angles d'incidences pour différentes pressions

La hauteur de fluctuation en phase correspondante à l'angle critique θ_L augmente légèrement en appliquant de la pression. On note aussi que tous les modes sont générés à des angles inférieurs à 20° , ces angles dépendent fortement des conditions de simulation (surtout du liquide de couplage) [4].

II.2.2 Influence de la pression sur les signatures acoustiques et les spectres de FFT

Rappelons que les signatures acoustiques peuvent être expérimentalement obtenues en enregistrant la variation d'amplitude, V , du signal en fonction du déplacement, z , de la lentille vers l'échantillon. Ces mêmes signatures, connues sous le nom de $V(z)$, sont calculées à partir de la relation (I.9). Les courbes ainsi calculées ($f = 142$ MHz, $\theta_{\text{lentille}} = 50^\circ$) pour la structure eau/MgO à différentes valeurs de la pression sont représentées sur la figure (II.2a). Les signatures sont normalement superposées. Cependant, pour une représentation plus claire nous les avons déplacées verticalement.

Nous savons que la réponse du signal $V(z)$ est due aux interférences constructives et destructives des modes de propagation. Cependant, ces signatures acoustiques varient d'une pression à une autre. Nous remarquons que les courbes $V(z)$ dans la figure (II.2a) se différencient aussi bien en amplitude qu'en période. En amplitude, la courbe s'atténue rapidement pour $P = 150$ GPa. En période, on observe un décalage plus rapide des maxima successifs au début qu'à la fin.

Nous montrons sur la figure (II.2b) les spectres de FFT des courbes de $V(z)$ de la figure (II.2a). Nous observons que le pic permettant la détermination du mode de Rayleigh se déplace vers les grandes vitesses. Notons que l'efficacité de ce mode est représentée par sa hauteur [5] et qui varie plus importante pour la pression 150 GPa.

II.2.3 Effet de la pression sur la vitesse de Rayleigh

L'onde de Rayleigh est composée d'un déplacement longitudinal et d'un déplacement transversal, elle a reçu un intérêt considérable [6] grâce à son utilité pour la détection des défauts de surface dans le test ultrasonique non destructif des matériaux, en plus elle est

employée dans la construction des lignes à retard électromécaniques utilisées pour les radars et les systèmes de télécommunication.

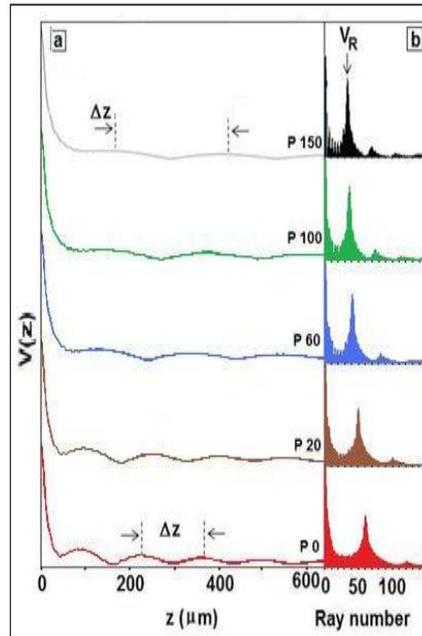


Figure II.2 : Variation de $V(z)$ et spectre de FFT par différentes pressions

Nous avons déterminé les vitesses correspondantes de Rayleigh, V_R , en utilisant la relation (I.14). Le décalage des raies principales dans les spectres de FFT entraîne une variation de vitesse V_R . Les résultats obtenus sont regroupés dans le tableau II.1. Nous remarquons à partir du tableau (II.1) qu'il y'a une augmentation rapide de la vitesse de Rayleigh V_R en fonction de la pression. Cette variation peut se justifier par la structure cristalline de MgO qui est devenue plus compacte en la comprimant.

Tableau II.1 : Variations des vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour MgO_{iso}

P(GPa)	0	5	10	20	40	60	80	100	125	150
V_R(m/s)	5378	5513	5694	5924	6252	6536	6709	6958	6980	7171

II.3 CARACTÉRISATION DU MgO ANISOTROPE SOUS PRESSION

Dans cette partie, nous étudions l'influence de la pression sur les différents paramètres acoustiques du MgO_{aniso} suivant trois orientations ($\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$).

Nous avons utilisé la méthode non destructive basée sur l'interaction des ondes de surface avec la matière via des relations analytiques. Nous avons calculé leurs coefficients de réflexion $R(\theta)$, signatures acoustiques, spectres de transformée de Fourier rapide (FFT) ainsi que leurs vitesses de Rayleigh suivant chaque direction. Les data nécessaires dans cette simulation pour les trois directions sont regroupés dans le tableau (I.7) section I.

II.3.1 Effet de la pression sur les coefficients de réflexion

a) Analyse des coefficients pour MgO $\langle 100 \rangle$

Les coefficients de réflexion jouent un rôle très important dans la détermination des signatures acoustiques ainsi que des spectres FFT. Ils permettent aussi d'obtenir des informations importantes sur les angles d'excitation des modes de fuites qui apparaissent sous forme d'un changement dans la phase et l'amplitude de $R(\theta)$. Nous représentons sur la figure (II.3) les coefficients de réflexion en fonction des angles d'incidences pour une gamme de pressions allant de 0 jusqu'à 150GPa. Pour mieux illustrer l'influence de la pression sur l'amplitude et la phase de $R(\theta)$, nous avons séparé et superposé les modules et les phases pour chaque valeur de pression.

La figure (II.3a) montre qu'il existe un changement dans l'amplitude au niveau des angles critiques longitudinal, transversal et celui de Rayleigh. A partir de cette courbe on observe :

- ✓ l'absence du mode longitudinal pour les pressions inférieures à 20GPa.
- ✓ la génération du mode longitudinal commence par l'application d'une pression proche de 20GPa.
- ✓ L'augmentation de la pression (au-delà de 20GPa) entraîne une augmentation de la fluctuation correspondante à l'angle critique d'excitation du mode longitudinal ; cette fluctuation devient plus nette et plus importante en amplitude.

La figure (II.3b) représente les variations de phase de $R(\theta)$ en fonction de l'angle d'incidence pour des pressions comprises entre 0 et 150GPa. Nous constatons :

- ✓ Un changement dans la phase qui varie de π à $-\pi$ indiquant la génération du mode de Rayleigh.
- ✓ un décalage du pic vers les petits angles critiques au fur et à mesure que la contrainte appliquée sur le matériau augmente.

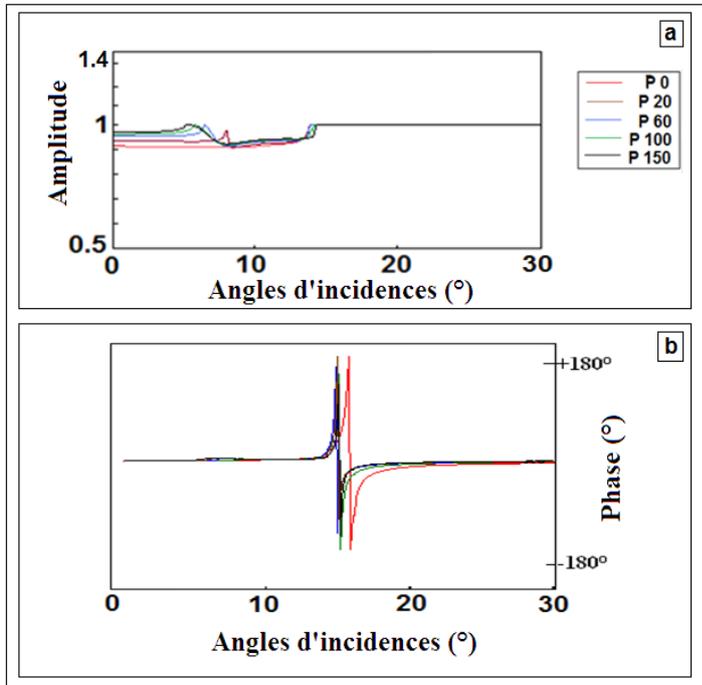


Figure II.3: Amplitudes et phases des coefficients de réflexion en fonction des angles d'incidence pour différentes pressions pour MgO_{<100>}.

b) Analyse des coefficients pour MgO _{<110>}

Nous avons suivi la même procédure précédente pour le MgO_{<110>}. Les résultats ainsi obtenus sont représentés sur la figure (II.4) pour le coefficient de réflexion aussi bien pour l'amplitude (figure II.4a) que pour la phase (figure II.4b).

Nous remarquons qu'il existe un changement de l'amplitude au niveau des angles critiques d'excitation des modes longitudinal, transversal et celui de Rayleigh pour chaque coefficient.

Pour la phase, nous observons une diminution brusque des angles d'excitation correspondants au mode de Rayleigh pour $P = 20$ GPa. Cette diminution devient plus faible lorsque la pression appliquée augmente.

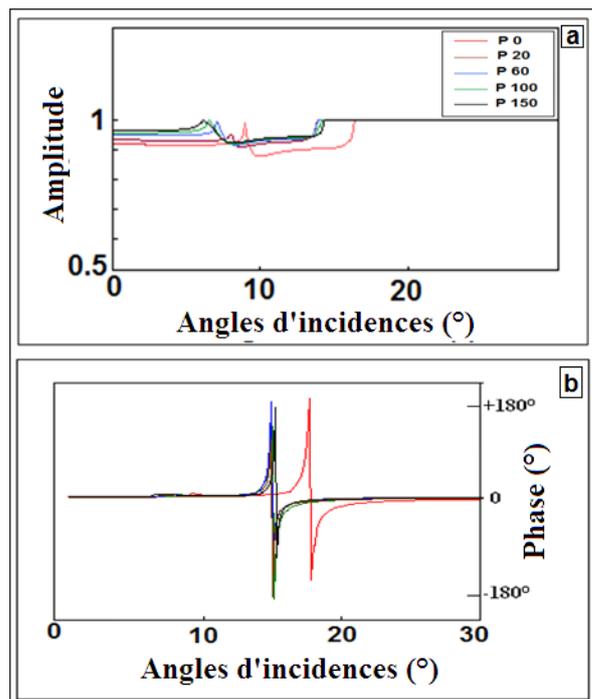


Figure II.4 : Amplitudes et phases des coefficients de réflexion $R(\theta)$ en fonction des angles d'incidences pour différentes pressions pour $\text{MgO}_{\langle 110 \rangle}$

c)Analyse des coefficients pour $\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$

Nous avons déterminé les coefficients de réflexion du MgO suivant la direction $\langle 111 \rangle$, le réseau de courbe (II.5) illustre la variation des amplitudes et des phases des différents modes en fonction des angles d'incidences pour différentes pressions (0, 20, 60, 100 et 150GPa) pour le $\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$.

La figure (II.5a) montre les variations en modules de $R(\theta)$, pour la structure $\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$, on peut remarquer qu'en augmentant la pression, l'amplitude de la génération du mode longitudinal augmente alors que la phase, illustrée dans la courbe (II.5b), tend vers les petits angles.

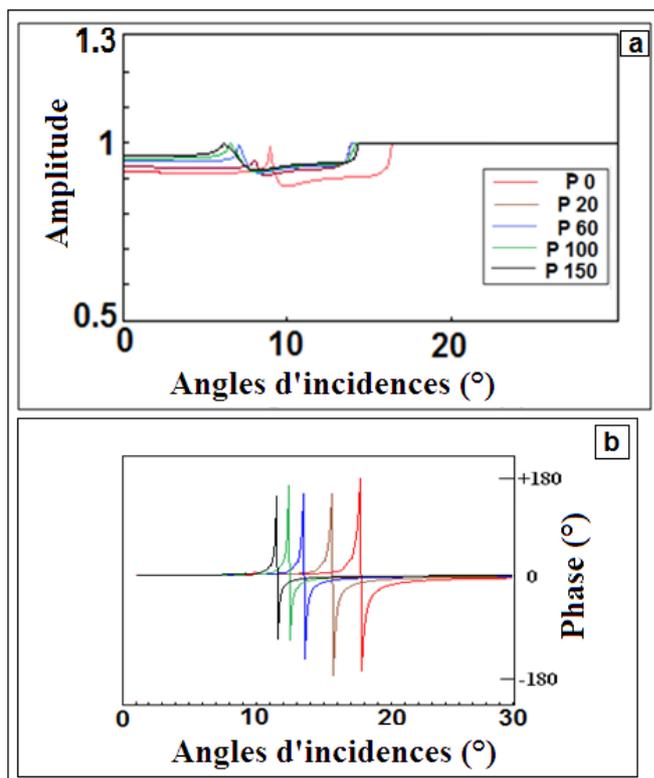


Figure II.5 : Amplitude et phase de $R(\theta)$ pour $\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$ à différentes pressions.

II.3.2 Effet de la pression sur les signatures acoustiques et les spectres de FFT

a) La structure eau/ $\text{MgO}_{\langle 100 \rangle}$

La signature acoustique est la courbe obtenue en enregistrant la variation d'amplitude, V , du signal en fonction du déplacement, z , de la lentille vers l'échantillon [7]. Le réseau de courbes (II.6) représente les signatures acoustiques (II.6a) ainsi que les courbes traitées par FFT (II.6b) obtenues pour le $\text{MgO}_{\langle 100 \rangle}$.

La figure (II.6a) représente les signatures acoustiques de la structure eau/ $\text{MgO}_{\langle 110 \rangle}$ obtenues pour les pressions allant de 0 à 150 GPa. Une analyse rigoureuse montre qu'il existe une différence entre ces $V(z)$ aussi bien en amplitude qu'en période :

- ✓ En amplitude : la courbe correspondante à $p = 150$ GPa présente une atténuation plus rapide pour les faibles valeurs de pression, donc l'absorption des ondes de surfaces est plus importante en appliquant une grande pression suivant la direction $\langle 100 \rangle$.
- ✓ En période : un décalage des maxima (et des minima) est très remarquable entre les courbes dans l'intervalle [0 - 60] GPa.

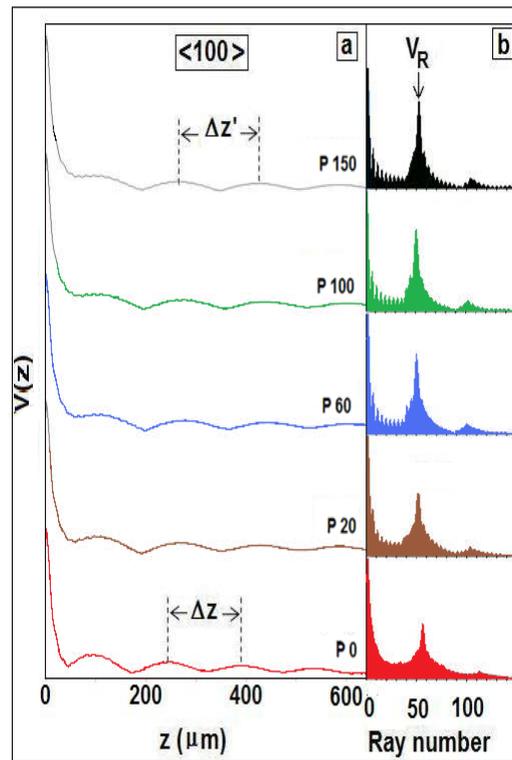


Figure II.6 : $V(z)$ et spectres de FFT pour différentes pressions pour $\text{MgO}_{\langle 100 \rangle}$.

b) La structure eau/ $\text{MgO}_{\langle 110 \rangle}$

Le signal acoustique qui provient de l'échantillon est le résultat des interférences de plusieurs types d'ondes au niveau du transducteur [7]. L'investigation de la tension de sortie $V(z)$ délivrée par le capteur présente des pseudos oscillations qui constituent la signature acoustique du matériau étudié [8].

La figure (II.7a) regroupe les signatures acoustiques de la structure eau/ $\text{MgO}_{\langle 110 \rangle}$ déterminées pour différentes pressions de 0 à 150 GPa. Cette figure montre qu'il existe des oscillations des $V(z)$, cependant, l'amplitude et les périodes spatiales de ces dernières dépendent de la pression.

Nous avons trouvé que les périodes Δz varient de 115.2 μm pour pression nulle jusqu'à 160 μm pour $P = 150 \text{ GPa}$.

Aussi, nous avons remarqué qu'à $z = 0$, toutes les courbes de $V(z)$ ont le même comportement, puis, en augmentant la distance de défocalisation la différence est devenue considérable.

L'analyse des $V(z)$ montre qu'il existe une différence entre ces $V(z)$ aussi bien en amplitude qu'en période, et une atténuation rapide de ces dernières.

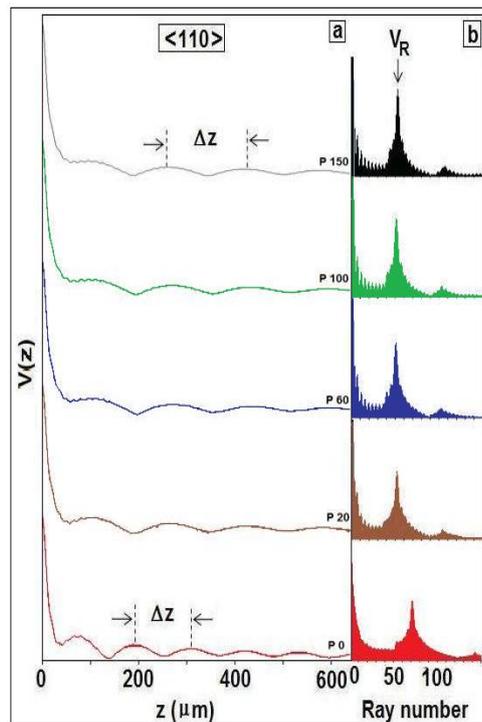


Figure II.7 : $V(z)$ et spectres FFT pour différentes pressions pour $MgO_{\langle 110 \rangle}$.

c) La structure eau/ $MgO_{\langle 111 \rangle}$

Les résultats de la structure eau/ $MgO_{\langle 111 \rangle}$ sont illustrés par les figures (II.8) sous les mêmes conditions que les courbes précédentes. Des observations similaires aux structures précédentes : eau/ $MgO_{\langle 100 \rangle}$ et eau/ $MgO_{\langle 110 \rangle}$ peuvent être formulées pour (II.8a). Pour la figure (II.8b), lorsque la pression augmente de 0 à 150 GPa, nous remarquons un déplacement très rapide du pic principal vers les grandes vitesses.

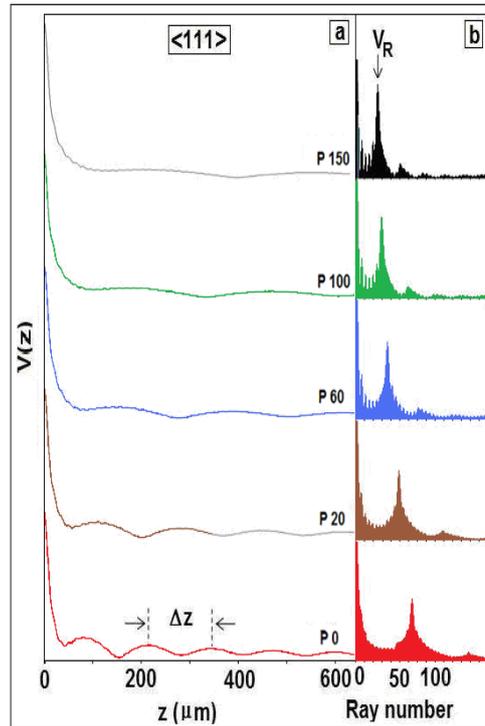


Figure II.8 : $V(z)$ et spectres FFT pour différentes pressions pour $\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$.

II.3.3 Effet de la pression sur la vitesse de Rayleigh

a) Variation de la vitesse de Rayleigh en fonction de P pour $\text{MgO}_{\langle 100 \rangle}$

La vitesse de propagation des ondes de surfaces (V_R) est bien déterminée des pics principaux (figure II.6a) via la relation (I.14). Nous avons également calculé la vitesse de Rayleigh par la relation de Viktorov [9], V_{RC} , afin de pouvoir estimer résultats obtenus.

La figure (II.9) regroupe les variations de la vitesse de Rayleigh (V_{RC} et V_R) en fonction de la pression. Les résultats obtenus par les deux relations (I.13) et (I.14) sont en très bon accord.

On observe facilement que la vitesse de Rayleigh est plus grande pour les pressions comprises entre 40 et 80 GPa que pour les autres valeurs de pression. Ceci est dû au fait que la forte pression fait rapprocher les atomes les uns des autres.

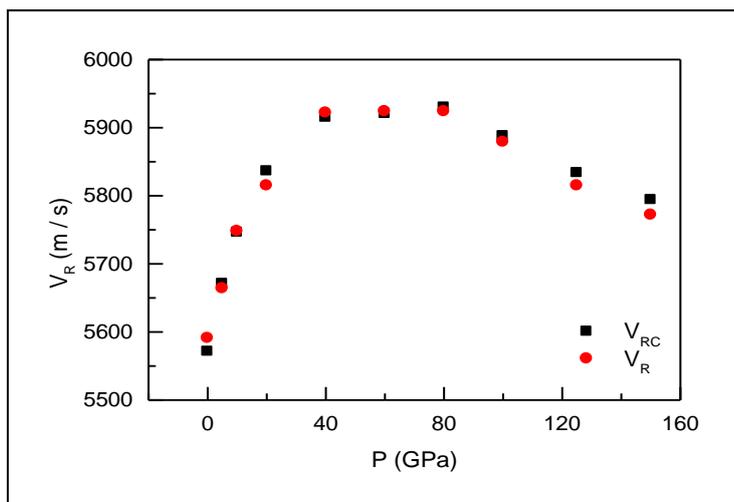


Figure II.9 : Dispersion des vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour $MgO_{\langle 100 \rangle}$.

b) Variation de la vitesse de Rayleigh en fonction de P pour $MgO_{\langle 110 \rangle}$

Pour en déduire les paramètres acoustiques de la structure eau/ $MgO_{\langle 110 \rangle}$, nous avons étudié l'effet de la pression sur la dispersion de la vitesse de Rayleigh, V_R . La variation de cette dispersion est illustrée dans la figure (II.10). On observe trois régions distinctes pour la pression:

- ✓ $P < 60$ GPa : on remarque une augmentation très brusque de V_R .
- ✓ $60 < P < 100$ GPa : correspond à la saturation des courbes pour laquelle les valeurs de V_R tendent vers une constante.
- ✓ $P > 100$ GPa : on constate une diminution faible de V_R .

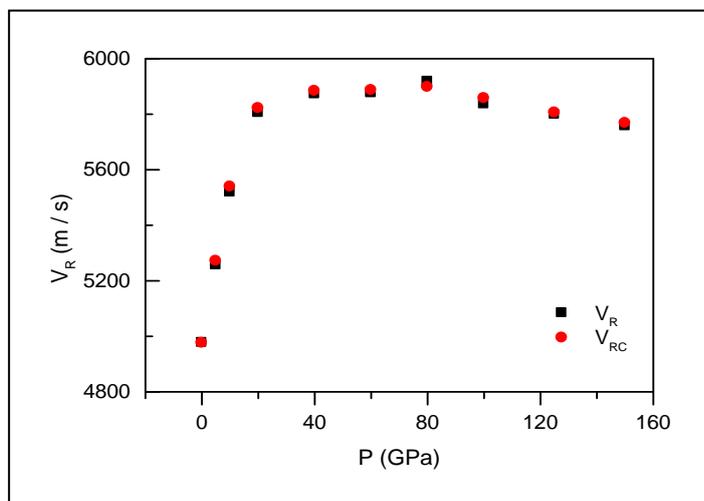


Figure II.10 : Dispersion des vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour $MgO_{\langle 110 \rangle}$.

c) Variation de la vitesse de Rayleigh en fonction de P pour $\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$

Les vitesses correspondantes au mode de Rayleigh en fonction de la pression (sous les mêmes conditions que précédemment) sont calculées et les résultats sont représentés dans la figure (II.11). On remarque qu'il y'a une augmentation de V_R avec la pression. Il est clair que lorsqu'on applique une certaine pression sur un matériau celui-ci va subir un changement structurale i.e. la distance interatomique diminue donc la propagation des ondes de surface est plus grande en rapprochant les atomes menant à une augmentation de V_R .

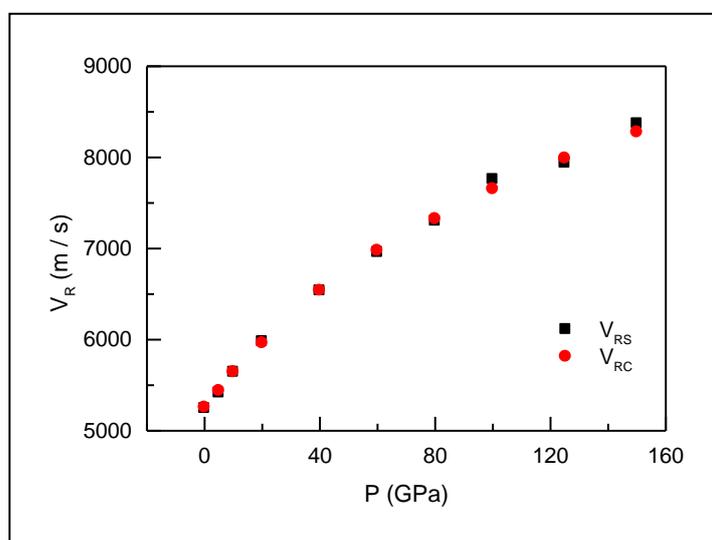


Figure II.11 : Dispersion des vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour $\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$.

II.4 CALCUL DES CONSTANTES ÉLASTIQUES

Dans un solide homogène et isotrope, de densité ρ , les vitesses des ondes longitudinales, V_L et transversales V_T , sont reliées aux modules élastiques (module de Young, E et de cisaillement, G) par les relations (I.16) et (I.17)[10] rapportées dans le premier chapitre, section (I.10). En plus, le module d'Young, E est un paramètre mécanique fondamental pour prédire l'influence de la pression sur les matériaux. Pour cela, nous avons calculé les modules élastiques ; module de Young (E) et celui de cisaillement (G), en utilisant ces relations; pour les quatre structures : $\text{eau}/\text{MgO}_{\text{iso}}$, $\text{eau}/\text{MgO}_{\langle 100 \rangle}$, $\text{eau}/\text{MgO}_{\langle 110 \rangle}$ et $\text{eau}/\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$ pour chaque valeur de pression.

Nous rassemblons les résultats obtenus dans le tableau (II.2). D'après ce tableau, nous remarquons que la pression fait augmenter ces constantes ; plus le matériau devient compact plus le module élastique devient grand. Aussi, nous observons que l'évolution générale des modules d'élasticité E et G [11] est importante pour les pressions inférieurs à P= 100 GPa et puis cette augmentation devient lente pour le reste d'intervalle de pressions, aussi bien pour le cas isotrope que celui anisotrope. Cet effet est plus prononcé sur le matériau MgO_{<100>}.

Tableau II.2 : Modules élastiques pour MgO isotrope et anisotrope (en GPa).

P (GPa)	MgO_{<100>}		MgO_{<110>}		MgO_{<111>}		MgO_{iso}	
	E	G	E	G	E	G	E	G
0	290.0	138.8	256.8	100.2	283.2	112.9	290.4	121.8
5	321.2	142.0	293.9	116.6	310.6	125.0	315.7	131.2
10	346.8	146.2	330.2	133.1	340.9	138.9	343.2	141.7
20	385.5	154.0	381.2	154.0	394.5	163.4	392.6	160.4
40	439.2	166.0	428.2	166.0	500.7	214.8	479.1	192.3
60	473.5	174.1	460.3	174.1	594.5	262.8	552.0	218.5
80	502.6	181.8	488.9	181.8	681.7	305.3	616.9	241.6
100	519.9	185.7	506.3	185.7	767.4	350.3	675.7	261.9
125	536.6	189.6	523.4	186.6	862.8	404.8	740.8	284.5
150	552.0	193.7	539.0	193.7	948.9	458.5	802.9	307.3

Nous pouvons conclure que, si on applique de la pression sur n'importe quel matériau dans son état solide, ce matériau va se déformer d'une façon individuelle i.e. le comportement élastique d'un matériau mis sous pression diffère d'un autre lorsqu'on lui applique la même pression.

II.5 COMPARAISON DES RÉSULTATS DU MgO ISOTROPE ET ANISOTROPE

II.5.1 Influence de l'anisotropie et de la pression sur l'efficacité de génération

La figure (II.12) montre l'efficacité de génération du mode de Rayleigh (représentée par la hauteur du pic principal) pour le MgO isotrope et anisotrope, sans charge (Figure II.12a) et sous pression maximale de 150 GPa (Figure II.12b).

Nous remarquons un glissement de la position du pic principal qui indique une variation dans la valeur de la vitesse de Rayleigh correspondante pour chaque type de matériau en lui y appliquant de la pression.

La courbe montrant les variations des efficacités des modes de générations des quatre matériaux, $\text{MgO}_{\langle 100 \rangle}$, $\text{MgO}_{\langle 110 \rangle}$, $\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$ et MgO_{iso} représente l'évolution de la longueur du pic principal pour chaque cas (avec et sans charge), dont on observe que la génération la plus efficace du mode de Rayleigh est obtenue pour la direction $\langle 111 \rangle$ pour le matériau chargé ou non. Bien que cette efficacité reste importante pour ce matériau ($\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$) en raison qu'il est rapide, bien qu'elle diminue pour les autres cas soit isotrope ou anisotrope.

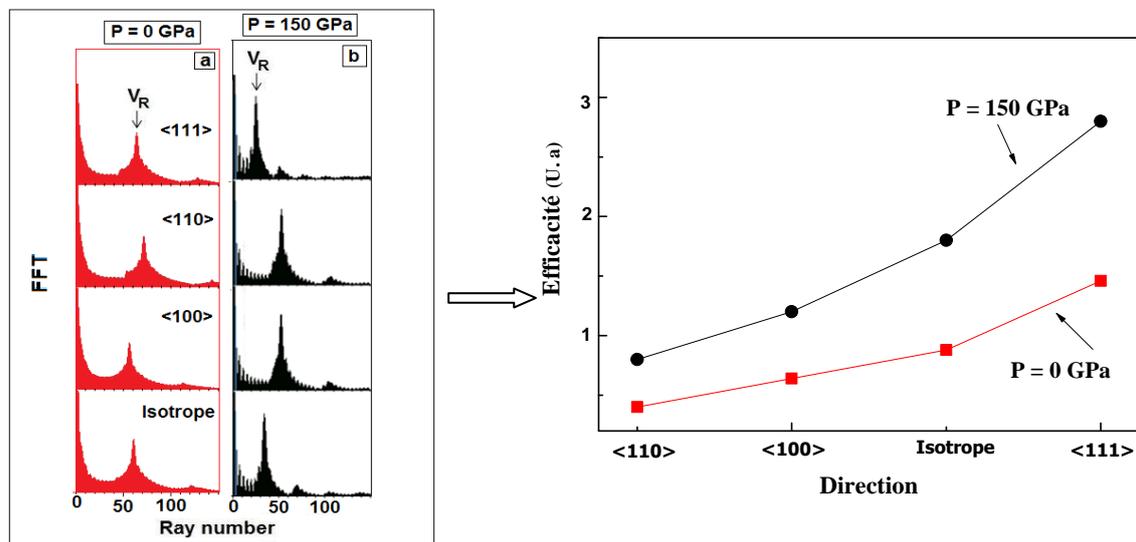


Figure II.12 : Comparaison des courbes des spectres de FFT pour MgO isotrope et anisotrope

II.5.2 Influence de la pression sur les vitesses de Rayleigh normalisées

Afin de mettre en évidence l'effet de la pression sur les vitesses de Rayleigh, V_R , nous avons mené une investigation comparative des vitesses normalisées correspondantes aux MgO isotrope ainsi que MgO anisotrope, en utilisant la relation suivante :

$$V_{Rn} = (V_R - V_{R0}) / V_{R0} \quad (\text{II.1})$$

Les valeurs ainsi trouvées sont regroupées dans la figure (II.13) qui illustre les variations des vitesses normalisées en fonction de la pression.

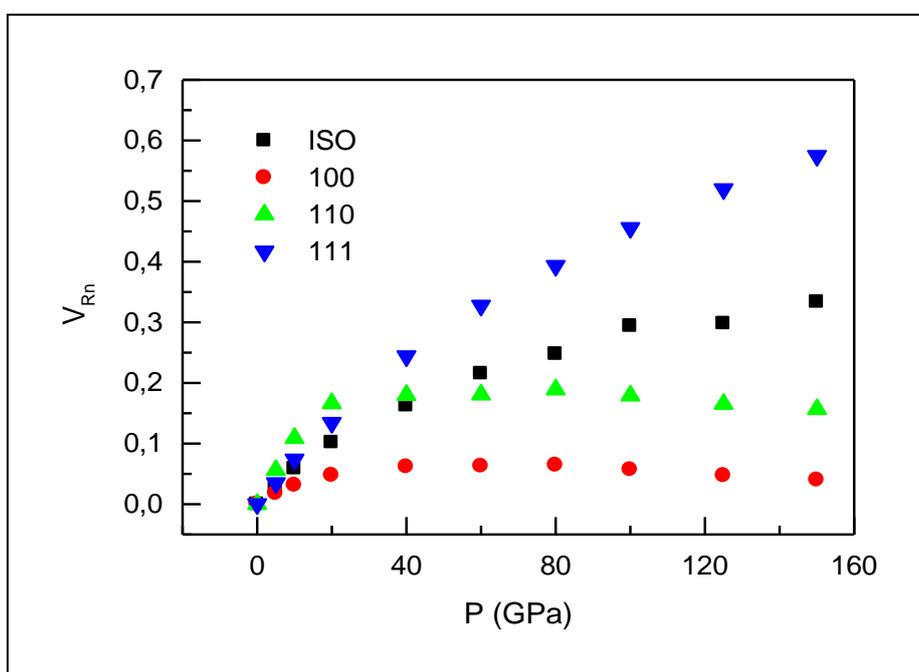


Figure II.13 : Dispersion de V_{Rn} en fonction

Nous remarquons:

- ✓ Une variation normalisée des vitesses est presque la même pour $P < 20$ GPa,.
- ✓ Un écart important est produit entre les courbes de dispersion des vitesses normalisées pour les quatre cas pour $P > 20$ GPa.
- ✓ Une légère diminution pour les deux directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$ par rapport aux cas de la direction $\langle 111 \rangle$ et le cas isotrope
- ✓ La valeur la plus importante correspond à la direction $\langle 111 \rangle$ qui est la plus dense.

II.6 CONCLUSION

L'étude de l'effet de la pression sur les propriétés acoustiques du MgO isotrope et anisotrope ($R(\theta)$, $V(z)$, spectres de FFT et vitesses de Rayleigh, V_R) a fait l'objet de ce chapitre. L'investigation a mené à plusieurs résultats dont les plus importants sont mentionnés ci-dessous.

- ✓ La variation de la pression et des directions cristallographiques entraînent un changement des angles critiques des modes longitudinal, θ_L , transversal, θ_T , et celui de Rayleigh, θ_R sont évalués pour MgO_{iso} , $\text{MgO}_{\langle 100 \rangle}$, $\text{MgO}_{\langle 110 \rangle}$ et pour $\text{MgO}_{\langle 111 \rangle}$.
- ✓ Nous avons trouvé, pour les signatures acoustiques, qu'à pression nulle et faible défocalisation, les courbes de $V(z)$ possèdent la même variation. Cependant, en augmentant la pression et en changeant la direction, la période Δz montre un décalage variant de 128.2 μm pour $\langle 111 \rangle$ jusqu'à 135 μm pour MgO isotrope.
- ✓ pour les spectres FFT, le mode le plus dominant est celui de Rayleigh ; la variation de la pression, pour chaque direction considérée, entraîne une variation de la vitesse de Rayleigh ; la valeur maximale correspond à $V_R = 8371$ m/s pour $\langle 111 \rangle$, ensuite à $V_R = 7171$ m/s pour MgO isotrope et $V_R = 5772$ m/s pour $\langle 100 \rangle$ et enfin $V_R = 5757$ m/s pour $\langle 110 \rangle$ à $P = 150$ GPa.
- ✓ Les modules élastiques de Young, E , et de cisaillement, G , sont calculés.
- ✓ Enfin une étude comparative des résultats obtenus sur MgO isotrope et anisotrope est présentée à la fin de ce chapitre.

CHAPITRE III

Étude de l'effet de la pression sur les propriétés acoustiques des oxydes métalliques et des semi-conducteurs

III. 1 INTRODUCTION

L'étude de l'effet de l'application de pressions élevées aux matériaux intéresse de nos jours de nombreux chercheurs [1,2] de type aussi bien fondamental que d'application. Dans cette étude, nous nous intéressons à l'influence des fortes pressions sur les propriétés élastiques des oxydes métalliques : BaO, CaO, SrO et CdO et des semi-conducteurs : GaN, GaP et GaAs ; via des simulations basées sur l'interaction ondes élastiques - matière. L'application de pressions à ces matériaux conduit à des transitions de phases aussi bien des oxydes que des semi-conducteurs. Ainsi, nous avons mené une investigation détaillée afin de quantifier l'effet pression – élasticité.

Notons que les oxydes de structure NaCl se transforment à une structure CsCl sous l'application de pressions élevée. Par exemple pour BaO et SrO, les transitions de phase sont respectivement atteintes à $P_t = 27.28$ et 39.72 GPa [3]. Cependant pour CaO, la transition de phase apparaît à partir de 63 GPa [4].

La structure de l'état fondamental de CdO à pression ambiante est de type NaCl (B1). Récemment, Liu et al. ont montré que le CdO qui présente la phase B1, peut se transformer à la phase CsCl (B2) sous haute pression [5]. Ils ont constaté que la transition de phase de la structure B1 à la B2 pour CdO se produit à 90 GPa

Aussi, les paramètres acoustiques de GaY isotropes ont été étudiés sous pression variable afin de déterminer la vitesse de Rayleigh qui d'un grand intérêt. Les composés à base de Gallium, GaY (Y = N, P et As) sont des matériaux qui cristallisent dans la phase zinc Blende (B3) à une pression nulle. Lorsqu'une pression y appliquée, ces matériaux présentent une transition de phase de B3 (Zinc Blende) à B1 (Rock salt) respectivement à 41, 22 et 17 GPa [6].

Finalement, nous nous sommes intéressés à la quantification de la relation liant les pressions de transitions et les distances interatomiques correspondantes pour les différents matériaux considérés dans ce présent travail.

III.2 ÉTUDE DE L'EFFET DE LA PRESSION SUR LES PROPRIÉTÉS ACOUSTIQUES DES MATÉRIAUX XO (X= Ba, Ca, Sr, Mg et Cd)

III.2.1 Effet de la pression sur les coefficients de réflexion

Les recherches expérimentaux et les calculs théoriques ont prouvé qu'il ya des nouvelles structures qui apparaisse sous l'effet pressions élevées. Ceci conduit à l'instabilité de la phase cristalline de ces matériaux. Pour des raisons purement scientifiques, nous avons analysé les changements que subissent plusieurs paramètres élastiques afin de comprendre les variations structurelles de ces matériaux.

Nous avons commencé par le calcul des coefficients de réflexion en utilisant un logiciel de simulation, élaboré dans notre laboratoire. Les data nécessaires pour cette simulation sont regroupés dans le tableau (III.1) et qui sont calculés à partir des relations (I.10), (I.11) et (I.12) rapportées dans le premier chapitre.

Tableau III.1 : Paramètres élastiques pour différentes pressions pour BaO, CaO et SrO.

P(GPa)	BaO			CaO			SrO		
	ρ (g/cm ³)	V _L (m/s)	V _T (m/s)	ρ (g/cm ³)	V _L (m/s)	V _T (m/s)	ρ (g/cm ³)	V _L (m/s)	V _T (m/s)
0	5903	4629.5	2655.6	3321.3	7482.4	4390.1	4948.8	5693.3	3364.8
5	6273,1	5219.5	2970.4	3474.1	8345.6	5008.5	5209.2	6221.5	3704.8
10	6602,0	5673.0	3184.7	3610.0	8801.3	5263.4	5438.2	6635.7	3953.9
15	6871,9	5998.8	3342.6	3723.4	9269.2	5549.5	5630.0	7018.1	4183.8
20	7129,2	6274.7	3485.5	3830.7	9651.7	5790.4	5822.1	7342.1	4368.5
25	7351,2	6450.7	3588.0	3930.5	10008.3	6014.9	5984.0	7647.7	4563.8
30	7567,1	6587.9	3667.3	4020.9	10347.2	6191.1	6139.9	7947.5	4743.6
35	7767,1	6643.9	3714.0	4105.4	10629.2	6377.4	6288.2	8214.9	4895.8
40	8009,5	6676.1	3762.6	4341.5	10691.0	6419.1	6427.0	8456.6	5025.5

Nous montrons sur les figures (III.1) et (III.2) les courbes obtenues par la relation (I.7) des coefficients de réflexion, $R(\theta)$ en fonction de l'angle d'incidence, θ_i pour les matériaux BaO, CaO et SrO et pour MgO et CdO mis sous pression respectivement. Pour la bonne lecture, en considérant la même courbe, nous avons séparé l'amplitude de la phase. Ensuite, nous avons superposé les parties réelles et les parties imaginaires en fonction des angles d'incidences, l'amplitude est illustrée à gauche (III.1a), (III.2a) et la phase à droite (III.1b) et (III.2b) respectivement.

Nous constatons à partir des figures (III.1a) et (III.2a) que lorsque la pression augmente les valeurs des trois angles critiques; θ_L , θ_T et θ_R diminuent mais plus rapidement pour les matériaux BaO et SrO que pour le CaO et MgO. Nous remarquons aussi une diminution brusque de ces angles pour le CdO dans l'intervalle [0 - 10 GPa]. Cette diminution devient plus lente dans le reste de l'intervalle des pressions]10 - 40 GPa].

Les figures (III.1b) et (III.2b) illustre que pour les oxydes considérés : CaO, SrO, MgO et CdO, tous les modes sont générés à des angles inférieurs à 30° . Pour l'angle critique d'excitation du mode de Rayleigh, qui est le plus dominant, nous constatons une diminution de ce dernier pour tous les matériaux en y appliquant la pression.

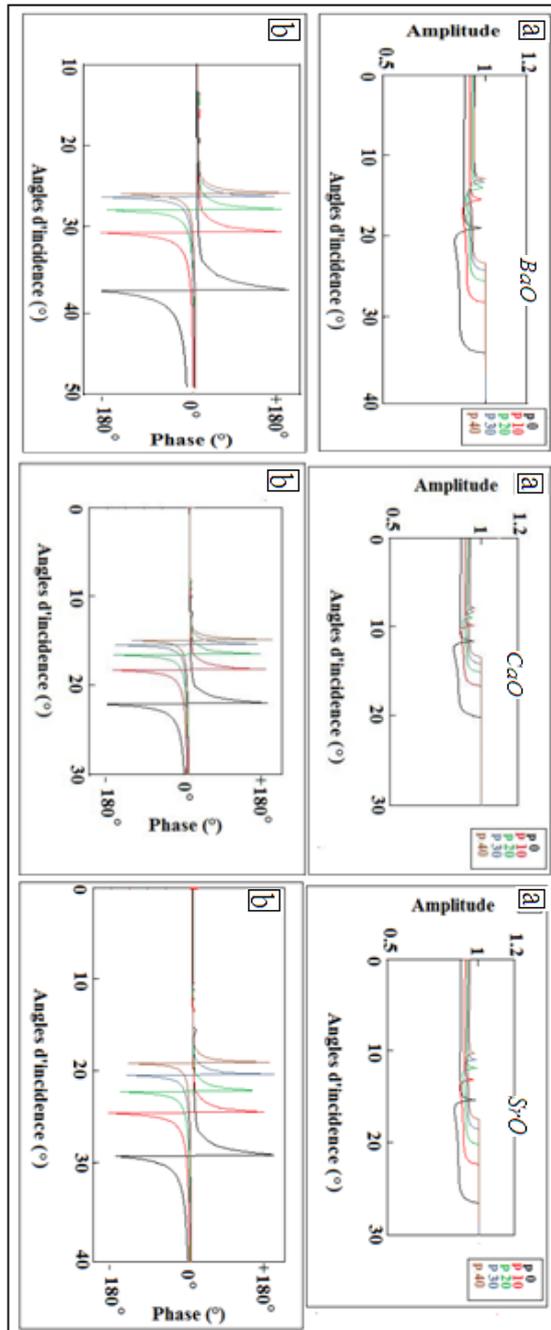


Figure III.1 : a) Amplitude, b) Phase en fonction des angles d'incidences pour BaO, CaO et, SrO.

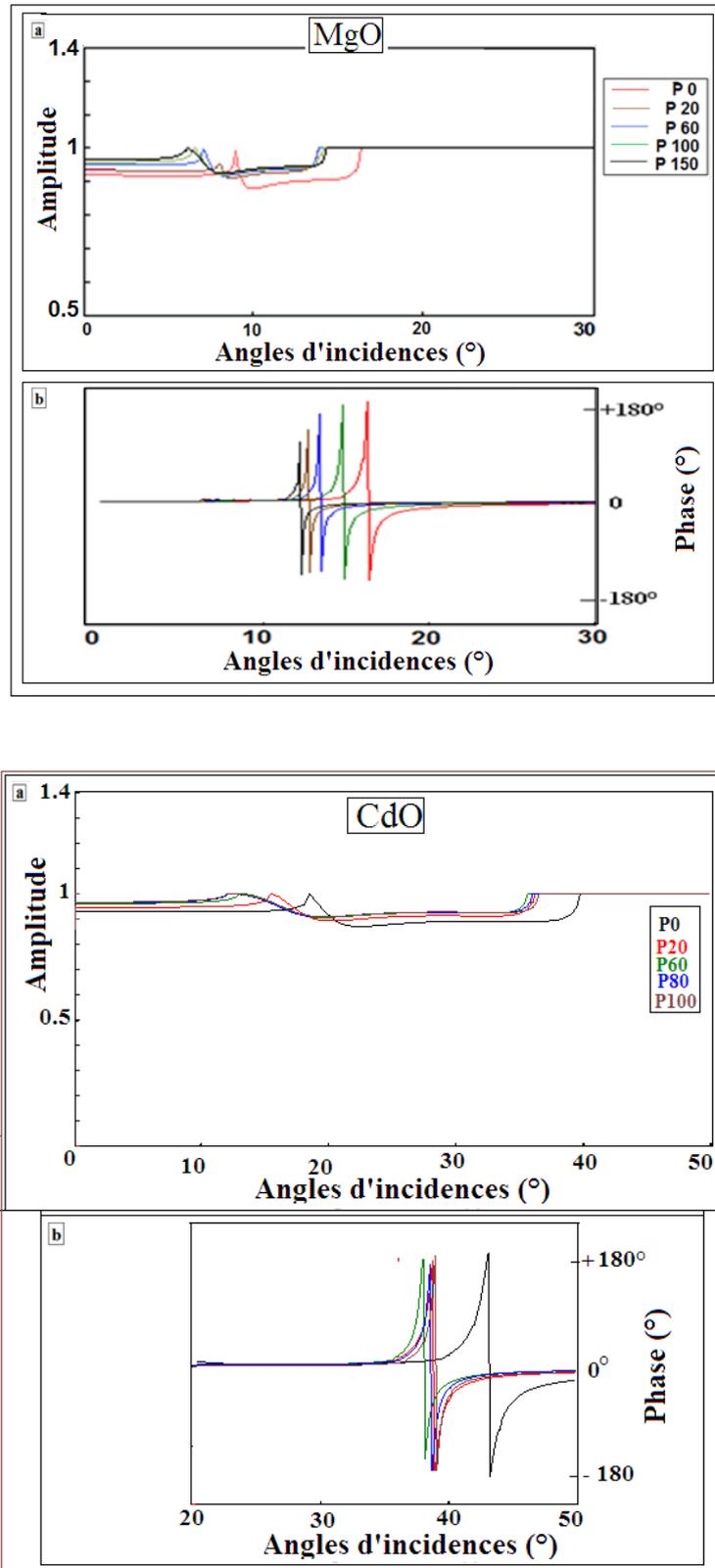


Figure III.2: Coefficients de réflexion $R(\theta)$ en fonction des angles d'incidences pour MgO et CdO

III.2.2 Effet de la pression sur les signatures acoustiques et les spectres FFT

La signature acoustique, $V(z)$, représente le signal de sortie. Elle varie avec la distance [7], z , de dé-focalisation, lentille - l'échantillon. Ce signal est donné par la relation (I.9). Son calcul nécessite la connaissance du pouvoir réflecteur des structures considérées, en fonction de l'angle d'incidence, $R(\theta)$. Le model le plus utilisé reste celui de Sheppard et Wilson [8].

Le traitement de la signature acoustique s'effectue par transformée de Fourier rapide, FFT. A partir de la raie principale du spectre du FFT on peut déterminer non seulement la vitesse de propagation du mode correspondant mais également son efficacité de génération. [9].

Les courbes obtenues sont montrées sur les figures (III. 3a) et (III.4a) dont nous remarquons clairement que toutes les courbes de $V(z)$ présentent un comportement oscillatoire dû aux interférences constructives et destructives des modes de propagation. Cependant, ces signatures acoustiques varient d'une pression à une autre. Nous constatons qu'il existe une différence entre ces $V(z)$ aussi bien en amplitude qu'en période.

En amplitude, la courbe s'atténue rapidement pour $P = 40$ GPa pour les matériaux BaO, CaO et SrO, ainsi que pour les pressions : $P = 150$ GPa , $P = 100$ GPa (pour le MgO et CdO respectivement).

En période, nous observons un décalage vers la gauche plus rapide des maxima successifs au début qu'à la fin pour les cinq matériaux sans exception.

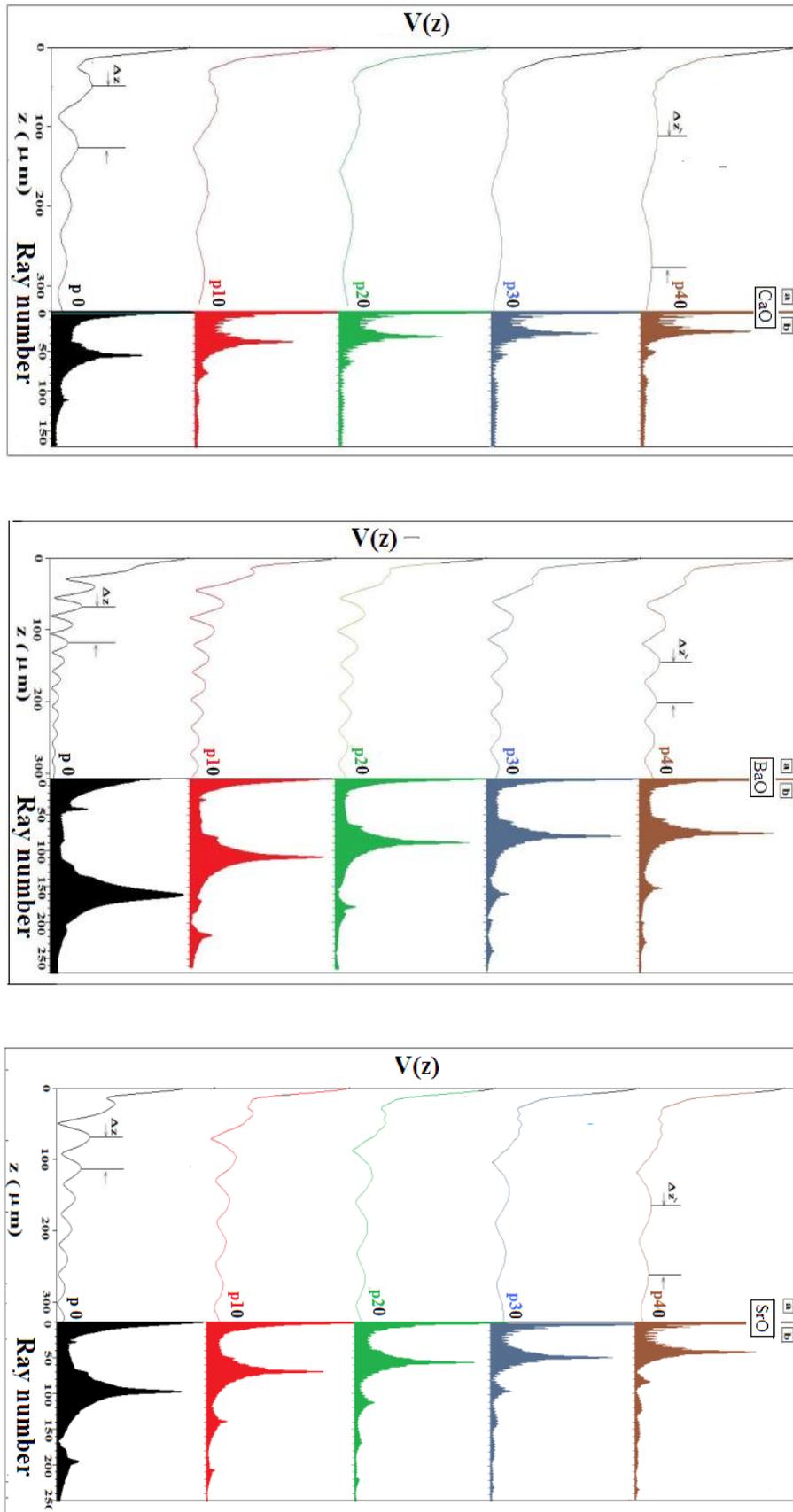


Figure III.3 : Effet de la pression sur $V(z)$ et spectres de FFT pour BaO, CaO et SrO.

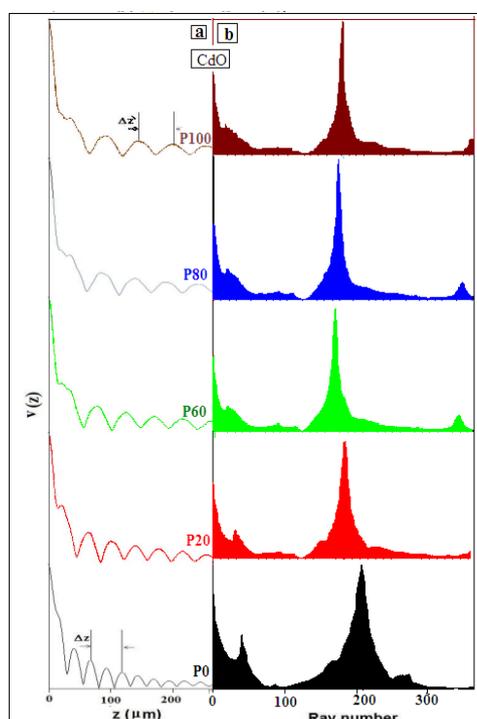
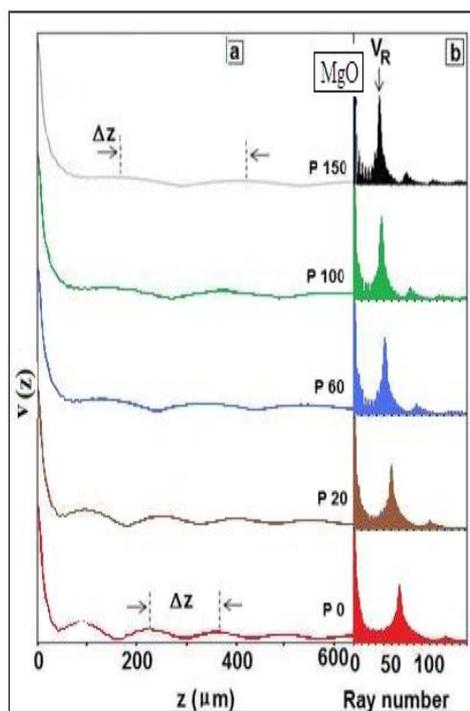


Figure III.4 : Variations des a) $V(z)$ et b) spectres de FFT pour MgO et CdO

L'analyse spectrale des courbes $V(z)$ via FFT fournit la période spatiale des pseudos oscillations. Les figures (III.3b) et (III.4b) montrent les spectres de FFT des courbes de $V(z)$ des figures (III.3a) et (III.4a) respectivement.

Les variations dans le comportement des $V(z)$ entraînent nécessairement des variations dans les spectres de FFT. Nous observons l'existence d'un pic principal représentant le mode le plus dominant qui est celui de Rayleigh. L'efficacité de ce mode est représentée par sa hauteur [10], elle est plus importante pour la pression 40 GPa pour BaO CaO et SrO, et pour la pression 150 GPa, 100 GPa pour MgO et CdO respectivement. Nous remarquons également un petit décalage pour la raie principale en raison de différence entre les vitesses des modes de propagation.

III.2.3 Effet de la pression sur les vitesses de Rayleigh

A partir des spectres de FFT correspondantes aux différentes pressions et matériaux, nous avons déterminé la vitesse de Rayleigh, V_R , pour chaque combinaison. Le décalage des raies principales dans les spectres FFT entraîne une variation de V_R . Les résultats obtenus sont regroupés dans les tableaux (III.2) et (III.3).

Tableau III.2 : Périodes spatiales et vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour BaO, CaO et SrO.

P (GPa)	0	5	10	15	20	25	30	35	40
$\Delta z_{\text{BaO}}(\mu\text{m})$	26.4	32.4	37.8	42	46	48.9	51.2	52.3	53.8
$\Delta z_{\text{CaO}}(\mu\text{m})$	73.7	96.2	107.8	120.5	128.6	142.1	147.4	159.6	165.1
$\Delta z_{\text{SrO}}(\mu\text{m})$	42	51.4	58.9	66.3	79	79.3	85.8	91.7	97.9
$V_{R,\text{BaO}}(\text{m/s})$	2500	2741	2945	3090	3225	3319	3393	3427	3473
$V_{R,\text{CaO}}(\text{m/s})$	4036	4592	4853	5124	5290	5554	5654	5880	5978
$V_{R,\text{SrO}}(\text{m/s})$	3092	3397	3625	3837	4174	4181	4343	4486	4629

On note qu'il y'a une augmentation rapide de la vitesse de Rayleigh V_R en fonction de la pression. Cette variation peut se justifier par les structures cristallines de ces matériaux qui sont devenues plus compactes en les comprimant.

Nous avons déterminé les périodes spatiales, Δz , séparant deux maxima (ou deux minima) successifs. Les données ainsi obtenues sont regroupées dans les tableaux (III.2) et (III.3).

Tableau III.3 : Périodes spatiales et vitesses de Rayleigh en fonction de la pression pour MgO et CdO

P(GPa)	0	10	20	40	60	80	100	150
$\Delta z_{MgO}(\mu m)$	135	151.6	164.4	183.4	200.7	211.6	227.8	242.1
$\Delta z_{CdO}(\mu m)$	19.7	23.1	24	24.8	24.9	24.3	22.9	-
$V_{R,MgO} (m/s)$	5378	5694	5924	6252	6536	6709	6958	7171
$V_{R,CdO}(m/s)$	2201	2336	2396	2451	2438	2412	2376	-

III.2.4 Détermination des constantes élastiques

Afin de compléter cette étude, nous avons calculé les modules élastiques : de Young (E) ainsi que celui de Cisaillement (G) pour chaque valeur de la pression, en utilisant les formules (I.16) et (I.17) [11].

Les résultats obtenus sont représentés par la figure (III.5). On remarque que la pression fait augmenter les constantes élastiques. En effet, ces courbes présentent une :

- i. Zone presque linéaire, qui présente une augmentation des valeurs de E plus rapide dans l'intervalle de pression allant de 0 jusqu'à 40 GPa pour les matériaux MgO et CdO.
- ii. Zone de saturation pour le reste d'intervalle des pressions, dans laquelle l'évolution se stabilise à des valeurs plus proches pour le CdO.

- iii. Evolution plus grande pour les trois oxydes: BaO, CaO et SrO en augmentant la pression appliquée.

En deuxième vue, la courbe montrant l'évolution du module de cisaillement, G en fonction de la pression, possède une allure comparable à celle des vitesses transversales, V_T pour tous les matériaux étudiés. Nous trouvons ainsi que les variations apparentes du module d'Young, E avec les variations de pressions pour les mêmes matériaux sont pratiquement les mêmes évolutions que celles des modules de cisaillement.

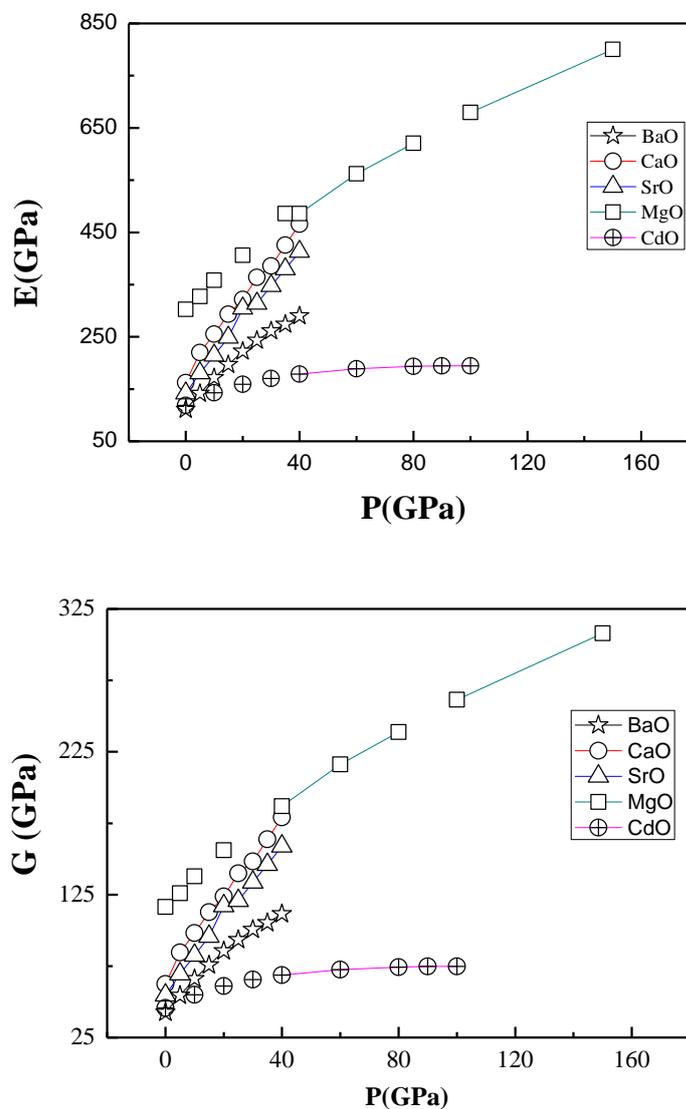


Figure III.5 : Variations des constantes élastiques, E et G , en fonction de la pression.

Faisons le fitting de ces courbes, nous avons déduit une variation de la forme suivante :

$$C = C_0 + A_i P + A_j P^2 \quad (\text{III.1})$$

Avec : $C = E$ ou G , $C_0 = E_0$ ou G_0 et A_i A_j sont des constantes caractéristiques des matériaux qui sont regroupées dans le tableau (III.4)

Tableau III.4 : Paramètres caractéristiques pour les modules E et G des oxydes étudiés.

Paramètres	BaO	CaO	SrO	MgO	CdO
E_0	110.2	170.9	141.5	309.5	123.2
A_i	6.7	8.3	7.9	4.8	1.8
A_j	- 0.05	- 0.03	- 0.03	- 0.01	- 0.01
G_0	42.4	65.7	54.4	118.5	47.4
A_i	2.6	3.2	3.03	1.8	0.7
A_j	-0.02	-0.01	-0.01	-0.03	-0.004

III.2.5 Étude de la transition de phase dans les oxydes métalliques

Si on parle de matériaux différents: ça implique que nous avons des atomes différents ; l'énergie d'interaction entre ces atomes est différente, ces matériaux n'ont pas la même résistance, donc leur comportement élastique est différent (matériau plus dur ou plus mou). Dans notre cas, oxydes métalliques nous avons :

- ✓ L'augmentation du caractère ionique dans la liaison avec l'oxygène de Ca vers Ba fait augmenter l'énergie de liaison. La transition de phase est alors facilitée par la rupture de liaison lorsqu'on applique une pression et évolue de CaO vers BaO de manière décroissante.
- ✓ Plus la distance interatomique est grande, plus la pression de transition est petite [12].

Tous ces oxydes sont stables dans la structure de B1 à la température ambiante et à pression atmosphérique.

Cependant, lorsque la pression augmente, ils subissent une transition de la phase B1 à la phase B2, ceci est confirmé par différentes techniques [13&14].

a) Calcul de la distance interatomique

Pour bien expliquer le phénomène de transition de phase, nous avons choisi de calculer les distances interatomiques des matériaux considérés en utilisant un logiciel de simulation appelé Hyperchem. Les structures des molécules ont été obtenues à l'aide de ce logiciel de modélisation moléculaire HyperchemTM Release 6.5 for windows [15].

Tous les calculs ont été menés dans le cadre du formalisme RHF (formalisme noté RHF pour Restricted Hartree-Fock), dont on emploie fréquemment les mêmes orbitales spatiales pour les électrons de spin α et les électrons de spin β), sans interaction de configuration à l'aide de la méthode semi empirique AM1 (Austin method1); Méthode semi-empiriques de calcul pour optimiser la structure moléculaire)du même logiciel.

Les structures atomiques ont été optimisées à l'aide de l'algorithme Polak-Ribiere avec le critère d'une racine du carré moyen du gradient égale à $0,001 \text{ kcal.mol}^{-1}$. Les géométries exactes obtenues ont été abordés pour le calcul des distances interatomiques des composés d'études BaO, CaO, SrO, MgO et CdO.

b) Relation entre la pression de transition et la distance interatomique

La figure (III.6) montre la variation des distances interatomiques, a en fonction des pressions de transition, P_t des matériaux suivants : CaO, SrO, BaO, CdO et MgO, (les valeurs des P_t sont respectivement: (69.3 [4], 39.72, 27.28 [3], 119.07 [5]et 205) GPa [6]).

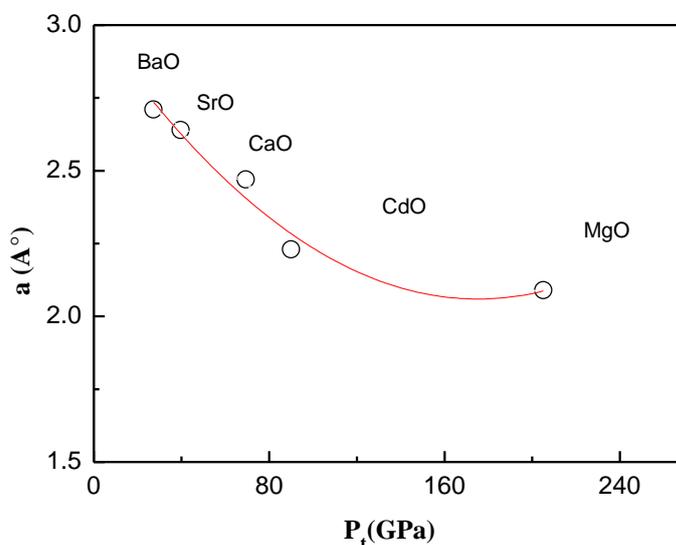


Figure III .6 : Variations des distances interatomiques en fonction des pressions de transition.

Cette variation peut être écrite sous la forme suivante :

$$a = 3 - 10^{-2} P + 3 \cdot 10^{-5} P^2 \quad (\text{III.2})$$

Finalement, on peut dire que la transition de phase des matériaux étudiés est bien expliquée par la relation(III.2) entre les pressions de transition pour les matériaux de même type d'atome centrale et leurs distances interatomiques.

III.3 PROPRIÉTÉS ÉLASTIQUES DES MATÉRIAUX GaY SOUS PRESSION

III.3.1 Analyse des coefficients en fonction de la pression

Afin de bien comprendre l'influence de la pression sur les propriétés élastiques des matériaux GaY (Y= N, p & As), nous avons commencé par la détermination des coefficients de réflexion en utilisant un logiciel de simulation, élaboré dans notre laboratoire. Nous montrons sur la figure (III.7) les courbes obtenues par la relation (I.7) des coefficients de réflexion, $R(\theta)$ en fonction de l'angle d'incidence, θ , à différentes pressions [0 – 45GPa].

Pour plus de clarté dans la représentation des courbes, nous avons suivi la même procédure que précédemment. La figure (III.7a) montre les variations en amplitude et la figure (III.7b) illustre les variations de la phase en fonction des angles d'incidences.

Les figures en amplitude (III.7a) montrent clairement:

- Une augmentation de l'amplitude de $R(\theta)$ lorsque l'angle d'incidence atteint les valeurs des angles critiques longitudinaux pour les trois matériaux.
- Une réduction de l'amplitude de $R(\theta)$ lorsque l'angle d'incidence atteint les valeurs des angles critiques transversaux.

Les courbes montrant les phases (III.7b), lorsque la phase du mode de Rayleigh varie de $(-\pi)$ à $(+\pi)$, on note:

- une réduction de la phase pour le même mode généré (θ_L , θ_T et θ_R).
- La hauteur de la fluctuation de phase correspondant à l'angle critique θ_L augmente légèrement en fonction de la pression.

Nous remarquons que tous les modes sont générés avec des angles inférieurs à 30° , ces angles dépendent fortement des conditions de simulation (en particulier du liquide de couplage) [16]. Il est clair que le mode de Rayleigh, qui montre un déphasage de 2π , est beaucoup plus important; par conséquent, il domine tous les autres modes qui pourraient exciter.

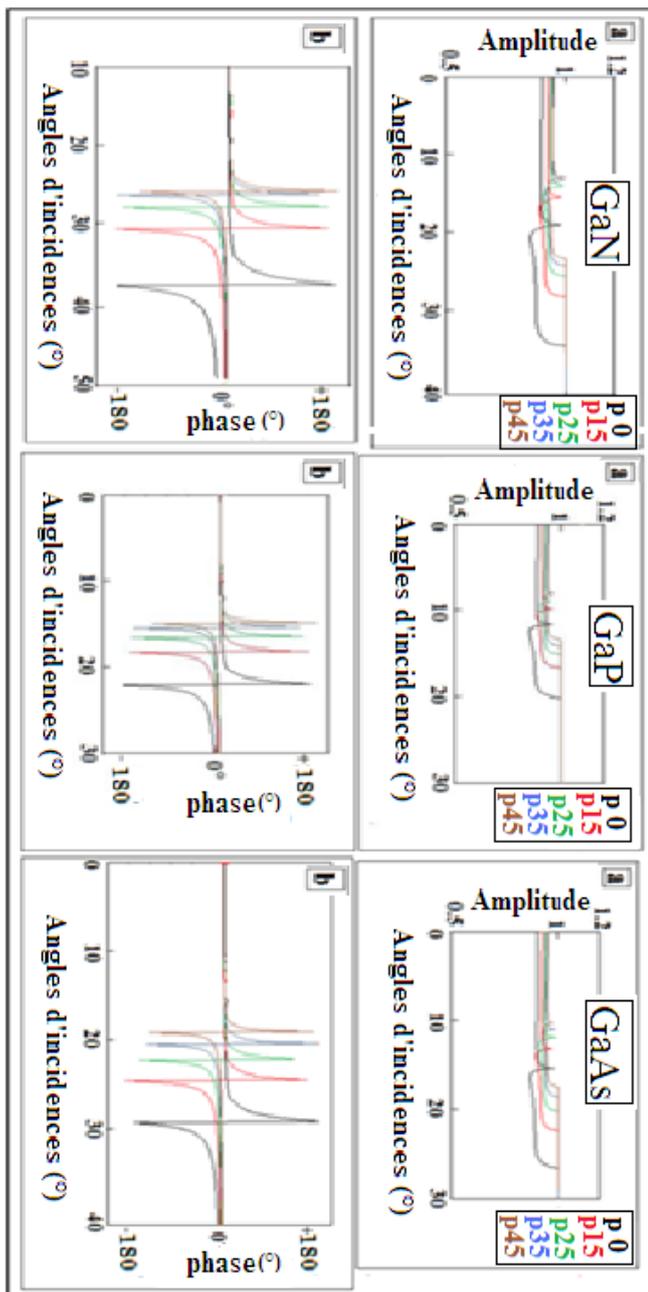


Figure III.7 : Variations de a) amplitude et b) Phase en fonction des angles d'incidences pour différentes pressions ; pour GaN, GaP et GaAs.

III.3.2 Variations des signatures acoustiques et des spectres de FFT

Nous avons calculé les signatures acoustiques en enregistrant la variation de l'amplitude, V , du signal en fonction du déplacement, z , à partir de la lentille vers l'échantillon [7]. Ces mêmes signatures sont calculées à partir du modèle Sheppard et Wilson [8] en utilisant la relation (I.9).

Les courbes ainsi calculées des structures: eau / GaN, eau / GaP et eau / GaAs avec différentes valeurs de la pression (allant de 0 jusqu'à 45 GPa) sont représentées sur la figure(III.8) ; les courbes (III.8a) montrent les variations de $V(z)$ et (III.8b) montrent les spectres de FFT pour différentes pressions.

Il est clair que toutes les courbes de $V(z)$ présentent un comportement oscillatoire en raison des interférences constructives et destructives des différents modes de propagation. Cependant, ces signatures acoustiques varient d'une pression à l'autre ainsi que d'un matériau à l'autre. Il est à noter que, les $V(z)$ diffèrent en amplitude ainsi qu'en période:

- ✓ En amplitude, la courbe s'atténue rapidement pour $P = 45\text{GPa}$ ainsi pour le matériau GaP que pour GaAs et enfin pour GaN.
- ✓ En période, on observe au fur et à mesure quand les valeurs des pressions tendent vers $P = 45\text{GPa}$, la période apparente augmente.

Ces comportements sont bien illustrés par le réseau de courbes (III.8b) qui montre les spectres de FFT (transformée de Fourier rapide) des mêmes signatures $V(z)$ pour les trois matériaux.

Nous savons que toute variation de $V(z)$ implique nécessairement des variations des spectres de FFT. On observe l'existence d'un pic principal représentant le mode dominant qui est celui de Rayleigh. Cependant, l'efficacité de ce mode, représenté par sa hauteur [7], est plus importante pour la valeur $p=45\text{GPa}$, ainsi pour GaN que pour GaAs et GaP. On remarque aussi un petit décalage de cette raie vers les grandes vitesses de propagation. Ce décalage nous apparaît plus grand pour le GaN que pour les autres matériaux.

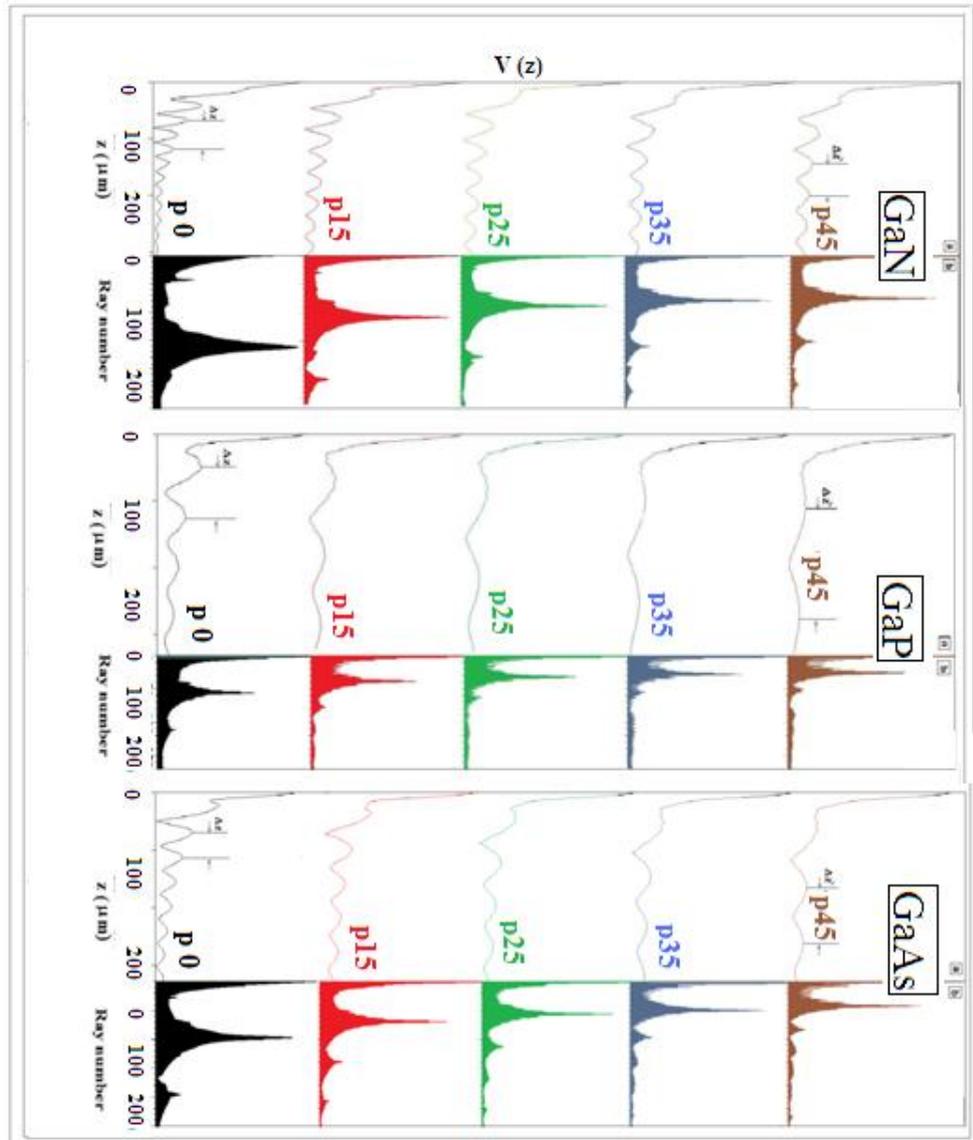


Figure III.8 : Variations de $V(z)$ et spectres de FFT avec la pression ;
pour GaN, GaP et GaAs.

III.3.3 Effet de la pression sur la vitesse de Rayleigh

Les ondes se propageant dans une structure liquide/solide sont appelés ondes de Rayleigh généralisées [11]. Après le calcul de toutes les données ($R(\theta)$, $V(z)$) et de son traitement par FFT), nous avons calculé les vitesses de Rayleigh sous pression à l'aide des deux relations (I.13) et (I.14) [10, 17].

Les valeurs obtenues des vitesses calculées et simulées (V_{RC} et V_{RS}) sont rassemblés dans la figure (III.9), où nous observons deux zones distinctes ; avant et après les transitions de phase. Avant atteindre les pressions de transition ($P_t = 41, 22$ et 17 GPa) respectivement [6], une diminution des valeurs des vitesses pour GaN, GaP et GaAs est observée quand la pression augmente alors qu'elles évoluent après ces valeurs de pressions de transition.

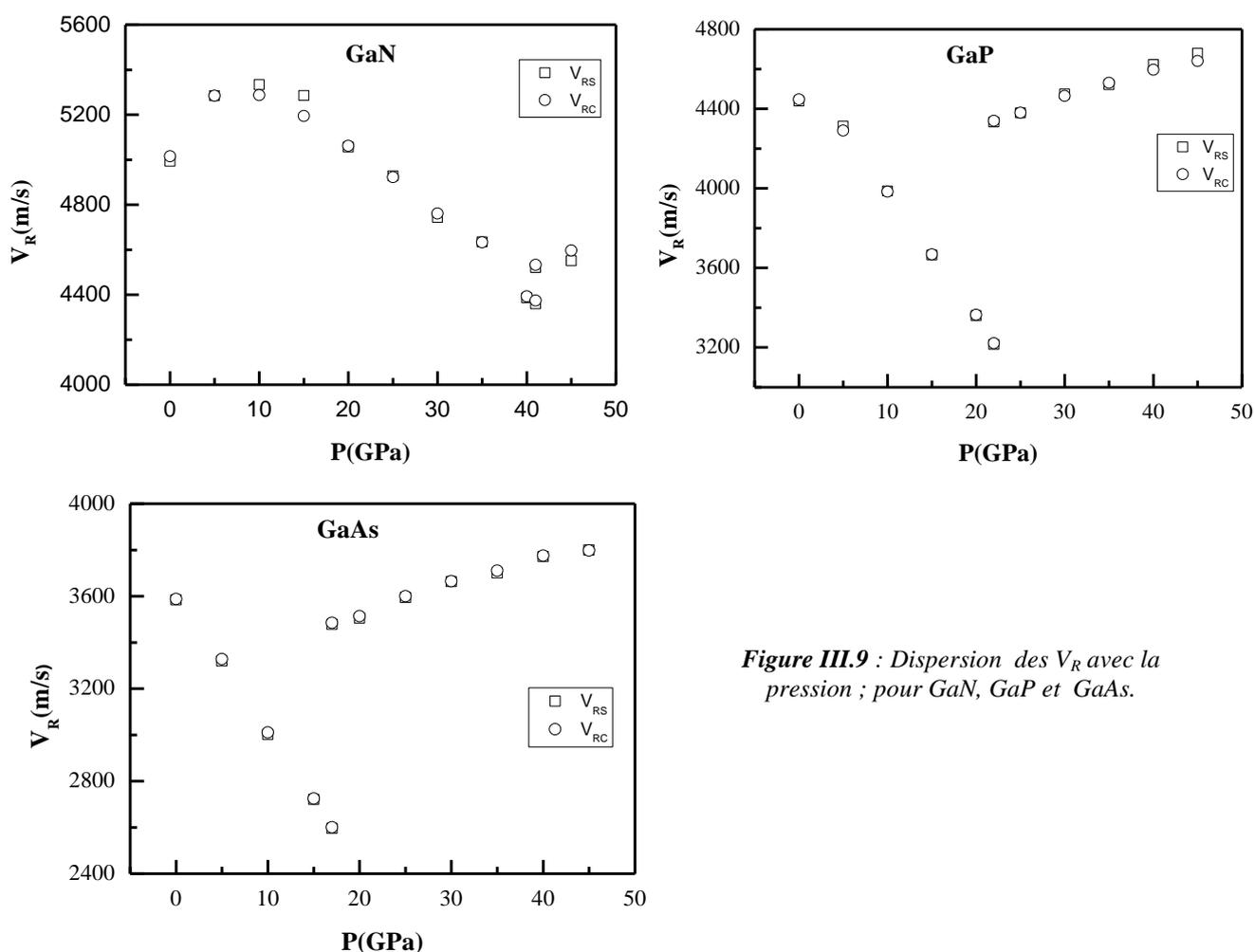


Figure III.9 : Dispersion des V_R avec la pression ; pour GaN, GaP et GaAs.

III.3.4 Influence de la pression sur les constantes élastiques

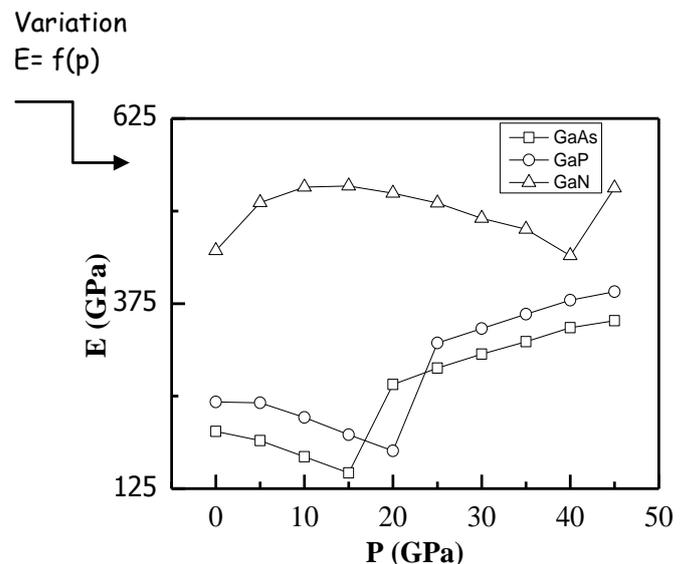
Nous avons déterminé les modules élastiques afin de compléter notre étude. Ces modules peuvent être exprimés en fonction des vitesses de propagation des ondes de modes longitudinaux et transversaux. Ainsi, nous avons calculé le module d'Young, E , et celui de cisaillement, G , pour les composés GaY sous diverses pressions, en utilisant les formules (I.16) et (I.17) [11].

Les modules de tous les matériaux, ainsi obtenus, sont regroupés dans le tableau (III.5). Il est à noter que l'application de la pression a fait croître ces constantes élastiques.

Les résultats obtenus montrent que l'application de la pression sur les matériaux GaN, GaP et GaAs allant de 0 à 45 GPa, fait augmenter le module de Young de 437 à 531 GPa, de 162 à 379 GPa et de 135 à 352 GPa et le module de cisaillement de 159 à 204 GPa, de 57 à 142 GPa et de 48 à 131 GPa pour GaN, GaP et GaAs, respectivement.

Tableau III.5 : Variations des constantes E et G (en GPa) en fonction de P .

P (GPa)	GaN		GaP		GaAs	
	E	G	E	G	E	G
0	446.4	181.2	242.2	95.3	202.3	79.8
5	511.3	209.3	240.8	91.9	189.8	71.4
10	532.3	213.9	221.2	81.8	167.9	61.1
15	533.9	210.3	197.9	71.4	146.2	52.1
20	524.1	202.4	176.1	62.5	265.7	100.5
25	510.7	194.1	321.7	121.8	287.8	108.6
30	490.2	183.61	341.3	129.1	306.6	115.5
35	475.5	176.5	360.7	135.8	323.5	121.2
40	439.6	160.4	379.6	142.3	342.2	128.1
45	531.3	204.7	391.1	146.4	351.7	131.5



A partir de la courbe montrant les variations du module d'Young, E en fonction de la pression, nous pouvons observer deux zones distinctes, avant et après changement de phase.

- ✓ La première zone de pression dans l'intervalle [0-41] GPa pour GaN, [0-22] pour GaP et [0- 17] pour GaAs, nous remarquons une diminution assez rapide des valeurs pour E dans cette zone.
- ✓ La deuxième zone dans les intervalles des pressions à partir des pressions des transitions jusqu'à la fin, nous constatons une augmentation brusque des valeurs de E en augmentant de pression.

Le comportement du module d'Young de ces matériaux est réellement le même pour l'évolution du module de cisaillement de ces mêmes matériaux en leur y appliquant de la pression.

III.3.5 Pression De Transition

Les pressions de transitions des matériaux GaN, GaP et GaAs sont 41, 22 et 17 GPa respectivement [6]. En outre, nous avons calculé la longueur de la liaison (a) et l'énergie de liaison (E_l) en utilisant des calculs d'HyperChem (par la mécanique moléculaire) et les résultats sont présentés dans le tableau (III.6).

Tableau III.6 : Paramètres caractéristiques pour les matériaux GaN, GaP et GaAs

Paramètres	GaN	GaP	GaAs
P_t (GPa)	41	22	17
E_l (Ua)	5588.55	9222.82	12231.66
a (Å°)	2.02	2.41	2.64

Nous pouvons en déduire à partir du tableau (III.6), que lorsque la distance de liaison entre les atomes augmente, il sera facile de casser cette dernière afin d'obtenir une nouvelle phase, i.e. la pression appliquée sera diminuée. Cette diminution peut être écrite sous la forme mathématique suivante:

$$a = a_0 + A_1 P + A_2 P^2 \quad (\text{III.3})$$

Avec a_0 et A_1 et A_2 sont des caractéristiques atomiques précises à chaque atome.

III.4 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons étudié les propriétés élastiques des matériaux (oxydes : BaO, CaO, SrO, MgO et CdO ainsi que les semi-conducteurs : GaN, GaP et GaAs) en utilisant un logiciel de simulation basé sur des ondes acoustiques. Nous avons déterminé les différents paramètres, $R(\theta)$, $V(z)$, spectres de FFT et V_R , en fonction des pressions progressives. Nous avons calculé aussi les modules d'élasticité ; module de Young, E , et celui de cisaillement, G sous pression. Ces modules sont confirmés avec deux méthodes. Il est montré que les constantes élastiques augmentent avec l'augmentation de pression.

Nous avons déduit que ces variations peuvent être écrites sous les formes suivantes :

$$C = C_0 + A_i P + A_j P^2 \quad \text{et} \quad a = a_0 - A_k P + A_l P^2$$

Avec a ; la distance interatomique du matériau considéré, $C = E$ ou G , $C_0 = E_0$ ou G_0 et A_i A_j
Sont des constantes caractéristiques des modules élastiques.

Conclusion Générale

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à l'investigation de l'effet de la pression sur les paramètres acoustiques des matériaux : XO (X= Ba, Ca, Sr, Mg et Cd) et GaY (Y= N, P et As).

Nous avons déterminé les coefficients de réflexion $R(\theta)$. Ensuite, nous avons calculé les signatures acoustiques $V(z)$ et leurs traitements par FFT. Par ailleurs, nous avons calculé la vitesse du mode de Rayleigh, V_R , à partir des périodes spatiales, Δz . Enfin, l'influence de la pression sur les modules élastiques de Young, E , et celui de cisaillement, G a été quantifiée. Ainsi, il a été constaté que :

- ✓ Pour les coefficients de réflexion : La variation de la pression entraîne un changement des angles critiques des modes longitudinal, θ_L , transversal, θ_T , et celui de Rayleigh, θ_R . Ce changement a été évalué pour chaque matériau.
- ✓ pour les signatures acoustiques : Nous avons trouvé, à pression nulle et faible défocalisation, les courbes de $V(z)$ possèdent la même variation. Cependant, en augmentant la pression, ces courbes s'atténuent rapidement pour le matériau GaP, GaAs que pour GaN, et pour CaO, MgO, SrO, BaO que pour CdO.
- ✓ pour les spectres FFT : Nous avons trouvé que le mode le plus dominant est celui de Rayleigh ; la variation de la pression entraîne une variation de la vitesse de Rayleigh, ces variations dépendent de la structure cristalline (moins ou plus compacte) ainsi de la direction étudiée (pour MgO anisotrope dans notre cas).

L'influence de la pression sur les modules d'élasticité (E et G) est très importante, car l'augmentation de la pression fait augmenter ces derniers pour tous les matériaux étudiés, qui sont devenus plus rigides et plus tenaces.

En perspective, nous comptons compléter cette étude par d'autres matériaux pour une généralisation des formules obtenues, dans l'objectif d'établir une loi générale qui relie les pressions de transitions aux distances interatomiques.

Références Bibliographiques

INTRODUCTION GÉNÉRALE

- [1] C.F. Quate, “*Microwave, acoustic and scanning microscopy in scanned image microscopy*”, (Ed. E. A. Ash), Academic press London, P. **23**, (1980)
- [2] H.K. Wickramasinghe, “*Scanning acoustic microscopy*”, J. Microsc. **129**, 1, 63, (1983)
- [3] A. Briggs, (ed) “*Advances in acoustic microscopy*” (Plenum, New-York, 1995)
- [4] J. Attal, N.T. Quang, G. Canbon and J.M. Saurel, “*Acoustic microscopy: Recent progress in imaging through opaque materials*”, Microsc. Semicond.Mattter., Conf. Oxford, P. 441, (1981)
- [5] R.A. Lemons, C.F. Quate, “*Acoustic microscope-scanning version*”, App. Phys. Lett., **24**, 163, (1974)
- [6] A. Korpel, L.W. Kessler, P.R. Palermo, “*An acoustic microscope opering at 100 MHz*”, Nature, **323**, 110, (1971)
- [7] L.W. Kessler, “*Acoustic Microscopy commentary: SLAM and SAM*”, IEEE Trans. Sonics Ultrasonics, SU-**32**,136, (1985)
- [8] Z. Hajoub “*Modélisation des rayons acoustiques pour les structures non-planes et étude des caractéristiques des modes de surface. Microanalyse des matériaux pour composants à ondes et à semi-conducteurs*”, Thèse de Doctorat d’Etat, UBMA, (1993)
- [9] R.D. Weglein, R.G Wilson, “*Characteristic material signature by acoustic microscopy*”, Electron. Lett.,**14**, 12,352, (1978).
- [10] J. Kushibiki, N. Chubachi and E. Tejina, “*Quantitative evaluation of materials by acoustic microscopy*”, Ultrason.Int., **89**,736, (1989).
- [11] C.J.R.Sheppard and T.Wilson, “*Effects of high angles of Convergence on $V(z)$ in the scanning acoustic microscopy*”, J. Appl. Phys. Lett. **38**, 884, (1981).
- [12] W. Parmonand and M.L. Bertoni, “*Ray interpretation of the materials signature in the acoustic microscope*”, Electron.Lett., **15**, 884, (1979).
- [13] E. Dieulesaint, D. Royer, « *Ondes Elastiques dans les Solides: Application au Traitement du Signal* », Ed Masson et Cie, (1974)
- [14] A. B. Wood, “*A Textbook of Sound*”, London, G. Bell and sons LTD, (1960)
- [15] R. T. Beyer, S. V. Letcher, “*Physical ultrasonics*”, Academic Press., New York and London, (1969)

- [16] H. Uberall, “*Surface Waves in Acoustic, in Physical Acoustics Principals and Methods*”, (Ed. Masson), Academic Press,1,(1970).
- [17] Kai Hong Chan, L. Bertoni, “*Ray Representation of Longitudinal Lateral Waves in Acoustic Microscopy*”, IEEE, Trans. Ultrason.Ferro. Freq. Cont. ,**38**, 1,27(1991)
- [18] G. W. Farnell,” *Properties of Elastic Surface Waves, in Physical Acoustics VI*”, (Ed. Masson),Academic Press, London,109 (1970).
- [19] A. Doghmane, S. Douafer, Z. Hadjoub, “*Investigation Of Pressure Effects On Elastic Parameters Of Isotropic And Anisotropic MgO*”, Journal Of Optoelectronics And Advanced Materials, **16**, 1339-1343, (2014).

.....

CHAPITRE I

- [1] L.Esaki ,& R.Tsu, “*Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors*”.IBM Journal of Research and Development, **14**, 61-65. (1970).
- [2] R. Castagne, J.P. Duchemin, M. Gloannec and Ch. Rumelhard., « *Circuits Integres en Arseniure de Gallium, Collection technique et scientifique des telecommunications* », Masson (1989)
- [3] D. Mendeleïev, « *Remarques sur la découverte du Gallium* ». Comptes-rendus hebdomadaires des séances de l’Académie des sciences, 969,(1875).
- [4] F.S. Galasso, “*Structure and properties of inorganic solids*”, 162-174, (1970)
- [5] J. Bolinsson, P. Caroff, B. Mandl and K. A Dick, « *Wurtzite–zincblende superlattices in InAs nanowires using a supply interruption method* », Nanotechnology, **22**,(2011).
- [6] S.Adachi, “*Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*”, Department of Electronic Engineering. Gumma University, Japon, (2005).
- [7] A. S. Barrière, A. Chaouki , G. Couturier , T. Seguelong, , C. Sribi & P. Alnot, « *Caractérisation physico-chimique et électrique de structures fluorure semi-conducteur III-V (passivation de GaAs et InP* »). Revue de physique appliquée, **23**, 63-70. (1988).
- [8] H. Mathieu, « *Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques* », Masson, (1987).
- [9] J. B. Goodenough, « *Les oxydes de métaux de transition* », Gauthier-Villars. (1971)

- [10] P. Vogl, H. P. Hjalmarson, and J. D. Dow, *Chem. Solids* **44**, 365 (1983).
- [11] S. Laval, « *Physique Des Semi-conducteurs III-V* », Institut D'électronique Fondamentale, Cnrs (Ura 022), Bat. 220. University Paris Sud, F-91405 Orsay Cedex, France, **1**, 35, (1990)
- [12] John H. Davies, “*The physics of low-dimensional semiconductors*”, Cambridge University Press, (1998).
- [13] N. M. Balzaretta and J. A. H. da Jornada, *Solid State Commun.* **99**, 943, (1996).
- [14] R. R. Reddy, S. Anjneyulu and C. L. N. Samara, “*Relationship between energy gap, refractive index, bond energy and the szigeti charge in polyatomic binary compounds and semiconductors*”. *J. Phys. Chem. Solids* **54**, 635, (1993)
- [15] N.M. Ravindra, P. Ganapathy and J. Choi, “*Energy gap–refractive index relations in semiconductors – An overview*”, *Infrared Physics & Technology* **50**, 21–29, (2007)
- [16] J.-M. Dorlot, J.-P. Bailon Et J. Masounave, « *Des matériaux* », Editions de l'Ecole Polytechnique de Montréal (1986).
- [17] F. Birch, « *Finite elastic strains of cubic crystals* », *Physical Review*, **17**, 809, (1947)
- [18] S. Adachi, “*Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*”, John Wiley & Sons, New York, (2005)
- [19] J. Zimmermann, « *Etude par la méthode Monté Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régime stationnaire et non stationnaire. Application à la simulation de composants submicroniques* », thèse de doctorat d'état, université de Lille 1, (1980)
- [20] Z. Hajoub “ *Modélisation des rayons acoustiques pour les structures non-planes et étude des caractéristiques des modes de surface. Microanalyse des matériaux pour composants à ondes et à semi-conducteurs*”, Thèse de Doctorat d'Etat, UBMA, (1993)
- [21] C.J.R. Sheppard And T. Wilson,” *Effects of high angles of Convergence on $V(z)$ in the scanning acoustic microscope*”, *J. Appl. Phys. Lett.* **38**, 858, (1981).
- [22] A. Ramdani, F. Augereau Et G. Despau, « *Etude De L'efficacité Des Modes De Lamb Dans La Signature Acoustique $V(Z)$ D'une Couche Mince Par La Théorie De La Résonance* », *J. Phys. Iii France* **6**, 571 (1996).
- [23] J. Kushibiki And N. Chubachi,” *Material Characterization By Line Focus Beam Acoustic Microscope*”, *IEEE Sonics Ultrasound*, SU-**32**, 189, (1985).

- [24] B. Ghebouli, M.A. Ghebouli, M. Fatmi, M. Benkerri, “*First-principles calculations of structural, elastic, electronic and optical properties of XO (X=Ca, Sr and Ba) compounds under pressure effect*”, *Materials Science in Semiconductor Processing* **13** 92–101, (2010)
- [25] A. Briggs, “*Acoustic Microscopy*”, (Clarendon Press, Oxford, 1992).
- [26] B. B. Karki, J L. Stixrude, S.J. Clark, M.C. Warren, G.J. Ackland, J And J. Crainj, “*Structure and elasticity of MgO at high pressure*”, *American Mineralogist*, **82**, 51, (1997).
- [27] F. Peng, Q. Liu , H. Fu, X. Yang, “ *First-principles calculations on phase transition and elasticity of CdO under pressure* ”, *Solid State Communications* **148** 6–9 (2008)
- [28] D. Varshney, G. Joshi, M. Varshney, S. Shriya, “*Pressure dependent elastic and structural (B3–B1) properties of Ga based Monopnictides,*” *Journal of Alloys and Compounds* **495**, 23–32, (2010)
- [29] H. Uberall, «*Surface Waves in Acoustics* », In *Physical Acoustics principals and Methods*”, ed. Masson, W. and Thurston, P.N, 1-57, Academic Press, (1970).
- [30] E. Dieulesaint And D. Royer, « *Ondes Élastiques dans les Solides : Application au Traitement du Signal* », Masson et Cie (1974).
- [31] F. Shena, W. Tana, Y. Zhaoc Et T. Masuokad, “*The Rayleigh-Stokes Problem for a Heated Generalized second grade fluid with fractional derivative model*”, *Nonlinear Analysis, Real world Applications* **7**, 1027, (2006).
- [32] I. A. Viktorov, “*Surface acoustic waves in solids*”, Moscow: Nauka, (1981).
- [33] J. Lemaitre J.L. Chaboche, « *Mécanique des matériaux solides* », Paris, Dunod, 544(ISBN 2-04-18618-2), (1988).
- [34] L.D. Landau et E.M. Lifchitz, «*Théorie De L'élasticité* », tome2, 1978(2ème Édition Révisée et Complétée De 1990
- [35] E. Dieulesaint And D. Royer, « *Ondes Élastiques dans les Solides : Application au Traitement du Signal* », Masson et Cie (1974).

CHAPITRE II

- [1] S. Tripathy, R .K.Soni, S.K.Ghozel And K.P.Jain, "*Optical properties of nano-silicon*" Bull. Mater, Sci.**24**, p.285, (2001).
- [2] B. Bushan(ed), "*Springer Handbook of Nanotechnology*", (Springer, Berlin, 2004).
- [3] B. B. Karki, J L. Stixrude, S.J. Clark, M.C. Warren, G.J. Ackland, J And J. Crainj, "*Structure and elasticity of MgO at high pressure*", American Mineralogist, **82**, 51-60, (1997).
- [4] A. Briggs, "*Acoustic Microscopy*", 90 (Clarendon Press, Oxford, 1992).
- [5] J. Kushibiki And N. Chubachi," *Material Characterization By Line Focus Beam Acoustic Microscope*", IEEE Sonics Ultrasound, **SU-32**, 189, (1985).
- [6] A. Briggs, (ed) "*Advances in acoustic microscopy*" (Plenum, New-York, 1995)
- [7] C.J.R.SHEPPARD And T.WILSON," Effects of high angles of Convergence on V(z) in the scanning acoustic microscope", J. Appl. Phys. Lett. **38**, 858, (1981).
- [8] Z. Hajoub "*Modélisation des rayons acoustiques pour les structures non-planes et étude des caractéristiques des modes de surface. Microanalyse des matériaux pour composants à ondes et à semi-conducteurs*", Thèse de Doctorat d'Etat, UBMA, (1993)
- [9] I. A. Viktorov, "*Surface acoustic waves in solids*", Moscow: Nauka, (1981).
- [10] E. Dieulesaint And D. Royer, « *Ondes Élastiques dans les Solides : Application au Traitement du Signal* », Masson et Cie (1974).
- [11] A. Doghmane, S. Douafer, Z. Hadjoub, "*Investigation Of Pressure Effects On Elastic Parameters Of Isotropic And Anisotropic MgO*", Journal Of Optoelectronics And Advanced Materials, **16**, 1339-1343, (2014).

CHAPITRE III

- [1] L. Shi, Y. Duan, L. Qin, “*Structural phase transition, electronic and elastic properties in TLX (X = N, P, As) compounds: Pressure-induced effects*”, Computational Materials Science **50**, 203–210, (2010)
- [2] M. Singh, A. Gour, S. Singh, “*High Pressure Phase Transition and Allied Behavior of Samarium Compounds*”, Acta Physica Polonica A, **123**, ISSU. 4, 709-713, (2013)
- [3] B. Ghebouli, M.A. Ghebouli, M. Fatmi, M. Benkerri, “*First-principles calculations of structural, elastic, electronic and optical properties of XO (X=Ca, Sr and Ba) compounds under pressure effect*”, Materials Science in Semiconductor Processing **13** 92–101, (2010)
- [4] L. Louail, O. Krachni, A. Bouguerra, F. Ali Sahraoui, “*Effect of pressure on structural and elastic properties of alkaline-earth oxide CaO*”, Materials Letters **60**, 3153–3155, (2006)
- [5] F. Penga, Q. Liu, H. Fu, X. Yang, “*First-principles calculations on phase transition and elasticity of CdO under pressure*, Solid State Communications **148**, 6–9, (2008)
- [6] D. Varshney, G. Joshi, M. Varshney, S. Shriya, “*Pressure dependent elastic and structural (B3–B1) properties of Ga based Monopnictides,*” Journal of Alloys and Compounds **495**, 23–32, (2010)
- [7] Z. Hajoub “*Modélisation des rayons acoustiques pour les structures non-planes et étude des caractéristiques des modes de surface. Microanalyse des matériaux pour composants à ondes et à semi-conducteurs*”, Thèse de Doctorat d’Etat, UBMA, (1993)
- [8] C.J.R. Sheppard and T. Wilson, “*Effects of high angles of Convergence on V(z) in the scanning acoustic microscope*”, J. Appl. Phys. Lett. **38**, 858, (1981).
- [9] A. Ramdani, F. Augereau et G. Despaux, « *Etude de l’efficacité des modes de Lamb dans la signature acoustique V(z) d’une couche mince par la théorie de la résonance* », J. Phys. III France **6**, 571 (1996).
- [10] J. Kushibiki and N. Chubachi, “*Material Characterization By Line Focus Beam Acoustic Microscope*”, IEEE Sonics Ultrasound, **SU-32**, 189, (1985).
- [11] E. Dieulesaint And D. Royer, « *Ondes Élastiques dans les Solides : Application au Traitement du Signal* », Masson et Cie (1974).
- [12] F.S. Galasso, “*Structure and properties of inorganic solids*”, 162-174, (1970).

- [13] Y. Deng, O.-H.Jia, X.-R. Chen, J. Zhu, “Phase transition and elastic constants of CaO from first-principle calculations”, *Physica B* **392**, 229–232. (2007)
- [14] I.de.P.R. Moreira, F. Illas, R.L. Martin, “Effect of Fock exchange on the electronic structure and magnetic coupling in NiO”, *Phys. Rev. B* **65**, 155102–155116. (2002)
- [15] HyperchemTM Release 6.5 for windows, Molecular Modelling system, 2000
- [16] I. Al-Surayhi, A. Doghmane And Z. Hadjoub “Investigation of Ag Doping Effects on $Na_{1.5}Co_2O_4$ Elastic Parameters” in: *Damage and Fracture Mechanics*, edited by Boukharouba *et al.*, 415 (Springer Verlag, 2009).
- [17] I. A. Viktorov, “Surface acoustic waves in solids”, Moscow: Nauka, (1981).