

Avis de Soutenance

Rami HAJJ HUSSEIN Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés :
*Étude Raman des alliages (Ge,Si), (Zn,Be)Se et Zn(Se,S) via le modèle de percolation :
agrégation vs. dispersion et phonon-polaritons*

Le lundi 07 juillet 2014 à 13:00

Adresse : **Bâtiment ISEA, Amphithéâtre 1**
7 Rue Marconi, Technopôle, 57070, METZ

Devant le jury :

M. François DEMANGEOT	MCF-HDR, Toulouse III	Rapporteur
M. Bernard JUSSERAND	DR-CNRS, INPS-Paris VI	Rapporteur
M. Alain POLIAN	DR-CNRS, Emérite, IMPMC-Paris VI	Examineur
M. Patrick SIMON	DR-CNRS, CEMHTI- Orléans	Examineur
M. Vitor TORRES	Prof. des universités-Université d'Aveiro, Portugal	Examineur
M. Olivier PAGES	Prof. des universités, LCP-A2MC, Metz	Directeur
M. Andrei POSTNIKOV	Prof. des universités, LCP-A2MC, Metz	Co-directeur

Mots clés : Semi-conducteurs, alliages, Raman, Percolation, agrégation /dispersion, phonon-polaritons.

Résumé : Les tenants et aboutissants du modèle phénoménologique de percolation (multi-mode par liaison) développé sur site pour la compréhension de base des spectres de vibration Raman et infrarouges des alliages semiconducteurs de structure zincblende (II-VI & III-V) et diamant (IV-IV) sont explorés plus avant dans des registres novateurs avec les systèmes $Ge_{1-x}Si_x$ (diamant), $Zn_{1-x}Be_xSe$ (zincblende) et $ZnSe_{1-x}S_x$ (zincblende). La version du modèle de percolation élaborée pour l'alliage GeSi de structure diamant (3 liaisons, 6 modes/phonons), plus élaborée que la version standard originellement développée pour les alliages zincblende (2 liaisons, 3 phonons), est utilisée comme version modèle pour formaliser à travers l'introduction d'un paramètre d'ordre κ ad hoc, une aptitude intrinsèque des spectres de vibration, révélée par le modèle de percolation, à 'mesurer' la nature du désordre d'alliage, en termes de substitution aléatoire, ségrégation locale ou dispersion locale. L'alliage de percolation $Zn_{0,67}Be_{0,33}Se$ est utilisé comme système modèle pour étudier, à l'aide d'un montage inhabituel de diffusion Raman en avant, la dispersion des phonons transverses optique au tout proche voisinage du centre Γ de la zone de Brillouin. A cette limite, ces modes acquièrent un champ électrique semblable à celui d'une onde électromagnétique pure, i.e. un photon, et se voient désignés sous la terminologie de phonon-polaritons. Une spécificité inexplorée des phonon-polariton d'alliage, à savoir leur renforcement à l'approche de Γ , est étudiée plus avant avec les alliages $Zn_{0,47}Be_{0,53}Se$ et $ZnSe_{0,68}S_{0,32}$, et effectivement observée avec le second alliage. Une étude infrarouge a récemment révélé dans la littérature un comportement vibrationnel multi-mode déconcertant pour la liaison courte (Zn-S) de l'alliage ZnSeS. Nous montrons que ce comportement peut être expliqué dans le cadre d'une version généralisée du modèle de percolation, plus élaborée que la version standard, qui prend en compte l'effet de la dispersion phonon en plus de l'effet de la contrainte locale. Par ailleurs l'étude fine du comportement phonon-polariton de la liaison longue (Zn-Se) de l'alliage représentatif $ZnSe_{0,68}S_{0,32}$ par diffusion Raman en avant révèle un comportement bimodal insoupçonné, qui fait écho à celui de la liaison courte (Zn-S). Cela établit expérimentalement que le schéma de percolation (multi-phonon par liaison) est générique et s'applique à toutes les liaisons d'un alliage donné, en principe. Enfin, nous explorons le comportement du doublet Zn-S de l'alliage ZnSeS à l'approche de la transition de phase zincblende→rocksalt (~14 GPa) par diffusion Raman en avant sous pression, i.e. dans le régime phonon-polariton. Le mode Zn-S basse fréquence s'affaiblit et converge vers le mode haute fréquence sous pression, comme observé plus tôt en rétrodiffusion pour le doublet Be-Se de l'alliage ZnBeSe. Il semble s'agir d'un comportement intrinsèque du doublet de percolation pour la transition de phase considérée. Ces comportements sont discutés sur la base d'une modélisation des spectres Raman enregistrés pour des processus de diffusion en arrière (géométrie usuelle) et en avant (en fonction de l'angle de diffusion) dans le cadre du formalisme de la réponse diélectrique linéaire. L'attribution des modes Raman est réalisée via des calculs ab initio (code SIESTA) menés sur site avec des motifs d'impureté prototypes. Les prédictions du modèle de percolation concernant la dépendance du spectre Raman de GeSi vs. κ sont confrontées à un calcul ab initio direct des spectres Raman (code AIMPRO), mené en collaboration, à partir de supercellules couvrant une série représentative de valeurs de κ .