

Séminaire du LCP-A2MC

Le modèle de percolation pour la compréhension de base des spectres Raman des cristaux mixtes : Universalité apparente et application(s) possible(s)

Olivier Pagès

Résumé :

A l'émergence de la science des matériaux au début du XX^{ème} siècle, Wolfgang Pauli indique que les physiciens devraient porter leur attention sur des systèmes simples avec lesquels il est possible de pousser la modélisation à l'échelle des constituants ultimes de la matière, c'est-à-dire des atomes eux-mêmes. Les semiconducteurs de première génération, à caractère monoatomique, tels que le silicium (Si) et le germanium (Ge), élaborés dès les années cinquante avec une pureté à 10N (99.99999999 %) sont idéaux de ce point de vue : un seul type d'atome, disposé sur un réseau régulier, qui plus est cubique – l'ordre est parfait ! Avec ces systèmes les physiciens disposent d'un « objet géométrique » qui peut être testé expérimentalement et modélisé à l'échelle de ses constituants élémentaires. Même confort avec les semiconducteurs binaires de la seconde génération dérivés du Si et du Ge, tels que ZnSe et GaAs, où cations et anions alternent sur un réseau cubique régulier. Les problèmes apparaissent au tournant des années soixante avec l'émergence des cristaux mixtes de la même famille, de type $A_{1-x}B_x(C)$. La substitution atomique $A \leftrightarrow B$ est non seulement responsable d'un désordre chimique mais aussi d'une distorsion du réseau, qui n'est plus régulier désormais. L'ordre est perdu ! La problématique centrale dès lors est l'accès à la nature de la substitution atomique, à savoir si celle-ci est idéalement aléatoire ou bien due à des effets locaux d'agrégation ou de dispersion des espèces A et B.

Pour aborder cette question de façon expérimentale il faut pouvoir disposer d'une sonde locale. La constante de force de la liaison chimique, détectée à l'échelle du laboratoire au moyen des spectroscopies optiques vibrationnelles telles que la diffusion Raman ou l'absorption infrarouge, est bien adaptée de ce point de vue. Précisément, au cours de la dernière décennie notre équipe a développé un modèle phénoménologique dit de « percolation » qui permet une description apparemment unifiée du comportement Raman/infrarouge de « ces systèmes complexes idéalement simples » que constituent les cristaux mixtes semiconducteurs dérivés du Si. Dans ce séminaire nous explorons deux possibilités d'applications sous-tendues par l'approche de percolation:

- (i) Dans quelle mesure celle-ci peut-elle permettre de formaliser l'aptitude présumée intrinsèque (cf. ci-avant) des spectroscopies optiques vibrationnelles à sonder la nature de la substitution atomique $A \leftrightarrow B$?
- (ii) quelle information nouvelle peut-on attendre de cette approche concernant la dynamique de réseau d'un cristal mixte semiconducteur à l'approche d'une transition de phase structurale induite sous pression ?

Mardi 6 mars 2018 à 14h00

Salle de Réunion de Chimie – I.C.P.M.

1, boulevard Arago, Metz-Technopôle