

CALCUL DU DEPHASAGE A LA REFLEXION ET DES INDICES OPTIQUES DE L'ALLIAGE AMORPHE Pd₃₀Y₇₀ A PARTIR DE LA MESURE DE SA REFLEXION

Reçu le 05/11/2000 - Accepté le 19/05/2002

Résumé

Les couches minces de l'alliage amorphe de composition Pd₃₀Y₇₀ sont déposées par pulvérisation cathodique sur des substrats en silice, sous un vide de 10⁻⁷ Torr. Les couches obtenues sont opaques et par conséquent leur transmission est nulle. Le spectre de réflexion de Pd₃₀Y₇₀ est mesuré dans le domaine d'énergie entre 0,5 et 6,2 eV. Cette mesure sert au calcul du déphasage à la réflexion de l'alliage à partir de l'intégrale de Kramers-Kronig. Les valeurs mesurées de la réflexion et les valeurs calculées du déphasage à la réflexion permettent de remonter aux constantes optiques (indices de réfraction et d'extinction) de l'alliage et à sa structure électronique à partir des spectres d'absorption optique calculés.

Le spectre d'absorption optique de Pd₃₀Y₇₀ amorphe est dominé par deux structures dont l'une est due aux états 4d de Pd centrée autour de 4 eV et l'autre aux états 4d de Y aux basses énergies.

Mots clés: Couches minces, constante optique, absorption optique, déphasage à la réflexion, alliages métalliques, structure électronique.

Abstract

The thin layers of the amorphous alloy Pd₃₀Y₇₀ are deposited by sputtering method on silica substrate in vacuum of 10⁻⁷ Torr. The deposited films are thick enough to neglect their transmission. We measured the reflection spectrum of Pd₃₀Y₇₀ in energy range between 0,5 and 6,2 eV. This measurement is used to calculate the reflection shift of this alloy using the Kramers-Kronig integral. The measured values of the reflection and the calculated values of the reflection shift between 0,5 and 6,2 eV, permit to obtain the optical index (refraction and extinction indexes) of the alloy and its optical absorption which constitute a like-Ness of its electronic state density.

The optical absorption spectrum of amorphous Pd₃₀Y₇₀ is dominated by two structures, namely 4d states of Pd centered around 4 eV and 4d states of Y in the low energies.

Key words: Thin layers, optical index, optical absorption, reflection shift, metallic alloys, electronic structure.

H. BELBAH

A. MEDDOUR

institut Génie des Procédés

Centre Universitaire 08 mai 1945

B.P. 401, Guelma 24000, Algérie

Les formules des couches minces et la réflexion mesurée permettent de calculer la constante diélectrique d'une couche mince d'un matériau diélectrique d'une couche mince d'un matériau qui constitue sa réponse suite à son excitation par une radiation électromagnétique et l'image de sa densité d'états électronique [1].

Les couches que nous avons traités sont suffisamment épaisses de manière à ce que leurs transmissions soient nulles; par conséquent, la seule mesure photométrique accessible est la réflexion. Le calcul de l'absorption optique est effectué à partir de la mesure de la réflexion et du déphasage à la réflexion (calculé à partir de l'intégrale de Kramers-Kronig [2-4]) en utilisant la méthode des trapèzes.

Les valeurs calculées du déphasage et celles de la réflexion mesurées permettent de calculer les constantes optiques (l'indice de réfraction n et l'indice d'extinction k) en résolvant un système de deux équations non linéaires par la méthode de Newton-Raphson. Ces équations font intervenir la réflexion mesurée et le déphasage calculé. Dans cet article, nous présentons les éléments de la théorie des couches minces, ainsi que les formules de la réflexion et du déphasage à la réflexion valables pour les couches opaques. Nous présentons également les méthodes suivies pour le calcul du déphasage à la réflexion et de l'absorption optique et nous terminons par une présentation des résultats de la structure électronique calculée pour le cas de l'alliage amorphe Pd₃₀Y₇₀ riche en Y.

THEORIE DE L'OPTIQUE DES COUCHES MINCES

On entend par optique des couches minces, l'étude des propriétés optiques sur un matériau déposé en couche mince. Les mesures optiques

ملخص

وضعت الطبقات الرقيقة لسبيكة Pd₃₀Y₇₀ الغير متبلورة بطريقة الرش المهبطي على صفيحة من السيليس تحت فراغ قدره 10⁻⁷ تور. الطبقات المتحصل عليها سميكة ذات نفوذ منعدم. سجل طيف الانعكاسية لسبيكة Pd₃₀Y₇₀ في مجال طاقي ممتد من 0.5 إلى 6.2 إلكترون فولط. قيم الانعكاسية المقاسة استعملت لحساب فرق الطور للانعكاسية السبيكة بحساب تكامل من خلال علاقة كرامرز-كرونغ. القيم المقاسة للانعكاسية و القيم المحسوبة لفرق الطور تسمح بحساب الثوابت الضوئية (معامل الانكسار و الامتصاص) و البنية الإلكترونية للسبيكة من خلال أطراف الامتصاص الضوئي المحسوبة. طيف الامتصاص الضوئي للسبيكة الغير متبلورة Pd₃₀Y₇₀ يحتوي على بنيتين: الأولى ناتجة عن الحالات الإلكترونية 4d لمعدن Pd المتمركزة بالقرب من 4 إلكترون فولط، و الأخرى ناتجة عن الإلكترونات 4d لمعدن Y في مجال الطاقات الضعيفة.

الكلمات المفتاحية: الطبقات الرقيقة، الثابت الضوئي، الامتصاص الضوئي، فرق طور الانعكاسية، الحساب الرقمي، السبائك المعدنية، البنية الإلكترونية.

les plus souvent effectuées sont la réflexion R , la transmission T et l'absorption A ; dans notre cas, seuls la réflexion et le déphasage ellipsométrique (à une longueur d'onde donnée), sont mesurés. Dans ce qui suit, nous présentons les formules de la réflexion R et du déphasage à la réflexion d'une couche mince ($T \neq 0$); nous effectuerons, ensuite, des approximations pour exprimer ces mêmes grandeurs dans le cas d'une couche opaque ($T=0$).

Réflexion R et déphasage à la réflexion δ_r d'une couche mince en incidence normale

La couche mince est située entre l'air qui constitue le milieu d'entrée et un substrat transparent qui joue le rôle du milieu de sortie. Les indices respectifs du milieu d'entrée, de sortie et de la couche sont les suivants :

$$\tilde{n}_0 = n_0, \quad \tilde{n}_s = n_s \quad \text{et} \quad \tilde{n} = n - ik$$

n et k sont respectivement les indices de réfraction et d'extinction du matériau.

La réflexion en intensité R d'une couche mince, dans le cas général, est donnée en fonction des caractéristiques du milieu d'entrée et de sortie par l'équation suivante [5,6].

$$R = \frac{abe^{k\gamma} + cde^{-k\gamma} + 2r \cos n\gamma + 2s \sin n\gamma}{bde^{k\gamma} + ace^{-k\gamma} + 2t \cos n\gamma + 2u \sin n\gamma} \quad (1)$$

$$\text{avec :} \quad \gamma = \frac{4\pi d}{\lambda} \quad 2\beta = \gamma(n - ik) = \Delta - i\alpha$$

$$a = (n_0 - n)^2 + k^2 \quad b = (n + n_s)^2 + k^2$$

$$d = (n_0 + n)^2 + k^2 \quad c = (n - n_s)^2 + k^2$$

$$r = (n_0^2 + n_s^2)(n^2 + k^2) - n_0^2 n_s^2 - (n^2 + k^2)^2 - 4k^2 n_0 n_s$$

$$t = (n_0^2 + n_s^2)(n^2 + k^2) - n_0^2 n_s^2 - (n^2 + k^2)^2 + 4k^2 n_0 n_s$$

$$s = 2k(n_s - n_0)(n^2 + k^2 + n_0 n_s)$$

$$u = 2k(n_s + n_0)(n^2 + k^2 - n_0 n_s)$$

Le déphasage à la réflexion est donné par l'équation (2) ci-dessous:

$$tg \delta_r = \frac{abe^{k\gamma} - ace^{-k\gamma} + 2r \cos n\gamma + 2s \sin n\gamma}{bde^{k\gamma} + dce^{-k\gamma} + 2t \cos n\gamma + 2u \sin n\gamma} \quad (2)$$

avec :

$$a = 2kn_0, \quad b = (n + n_s)^2 + k^2, \quad c = (n - n_s)^2 + k^2,$$

$$d = n_0^2 - n^2 - k^2, \quad r = -4n_0 n_s n k, \quad s = -2n_0 n (n^2 - n_s^2 + k^2)$$

$$t = (n_0^2 + n^2 + k^2)(n^2 - n_s^2 + k^2), \quad u = -2(n_0^2 + n^2 + k^2)kn_s$$

Les équations (1) et (2) sont celles qui seront utilisées pour calculer la constante diélectrique mais après les avoir adaptées au cas des couches épaisses.

Expressions de la réflexion R et du déphasage à la réflexion δ_r pour une couche opaque

Les équations (1) et (2) prennent une autre forme si la couche est épaisse. Dans ces conditions, le substrat ne joue plus de rôle. Les expressions de la réflexion R et du déphasage δ_r se simplifient en effectuant des

approximations partant du fait que la réflexion est maximale. Les conditions donnant une réflexion maximale sont telles que:

$$\begin{cases} \sin n\gamma = 0 \\ \cos n\gamma = -1 \end{cases}, \quad n\gamma = (2n_r + 1)\pi$$

$$\text{d'où:} \quad \gamma = \frac{(2n_r + 1)\pi}{n} = \frac{4\pi d}{\lambda}$$

Sachant aussi que les termes $e^{-k\gamma}$, r et t figurant dans les équations (1) et (2) sont négligeables devant $e^{k\gamma}$, les expressions de R et de δ_r deviennent:

$$R = \frac{(1-n)^2 + k^2}{(1+n)^2 + k^2} \quad (3)$$

$$\delta_r = \arctg \frac{2k}{1 - (n^2 + k^2)} \quad (4)$$

Les équations (3) et (4) sont celles qui seront utilisées dans le calcul des indices optiques de $\text{Pd}_{30}\text{Y}_{70}$.

CALCUL NUMERIQUE DU DEPHASAGE A LA REFLEXION

Éléments nécessaires au calcul du déphasage à la réflexion

Il s'agit de résoudre l'intégrale de Kramers-Kronig qui est une relation de causalité entre la réflexion $R(\omega)$ et le déphasage $\theta(\omega)$, ω étant l'énergie de l'onde. Comme la réflexion est une grandeur complexe, le milieu étant absorbant, elle s'écrit donc sous la forme:

$$\tilde{R}(\omega) = |\tilde{R}(\omega)| e^{i\theta(\omega)} = \sqrt{R(\omega)} e^{i\theta(\omega)}$$

La relation liant $\theta(\omega)$ à $R(\omega)$ à une énergie ω_0 donnée est [2-4]:

$$\theta(\omega_0) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{d \ln R(\omega)}{d \ln \omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| \frac{d\omega}{\omega} \quad (5)$$

Le calcul du déphasage à la réflexion à partir de (5) nécessite la connaissance de toutes les valeurs de la réflexion pour les énergies allant du zéro à l'infini. Dans notre cas, la réflexion est mesurée entre les énergies ω_a et ω_b qui représentent respectivement les énergies de début et fin de la mesure; les mesures entre zéro à ω_a et entre ω_b à l'infini ne sont pas accessibles. Dans ces conditions, il est plus simple de présenter l'intégrale comme la somme de trois intégrales comme suit :

$$\theta(\omega_0) = \int_0^\infty = \int_0^{\omega_a} + \int_{\omega_a}^{\omega_b} + \int_{\omega_b}^\infty = I_1 + I_2 + I_3 \quad (6)$$

Seule l'intégrale I_2 peut être directement calculée, les deux autres sont calculées en utilisant les valeurs de R extrapolées à partir des formules suivantes [1,7] :

$$\omega \in (0, \omega_a), \quad R(\omega) = 1 - \alpha \sqrt{\omega} \quad (7)$$

$$\omega \in (\omega_b, \omega_n), \quad R(\omega) = R(\omega_b) \left(\frac{\omega_b}{\omega} \right)^S \quad \text{avec } S > 0 \quad (8)$$

$$\omega \in (\omega_n, \omega_m) , \quad R(\omega) = \frac{1}{16} \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^4 \quad (9)$$

α et S sont des paramètres à ajuster et ω_p la fréquence du plasma.

L'intégrale I_1 qui s'appuie sur les valeurs de la réflexion calculées à partir de (7), n'influe pas beaucoup sur l'amplitude du déphasage ; la deuxième I_2 constitue la partie principale de (5) et elle est calculée directement entre les énergies ω_a et ω_b ; I_3 est calculée à partir de (8) et (9) et influe considérablement sur la valeur calculée du déphasage. Le paramètre S de (8), est ajusté en égalisant le déphasage ellipsométrique mesuré $\psi(\omega_0)$ au déphasage calculé $\theta(\omega_0)$ à une énergie ω_0 . Soit:

$$\theta(\omega_0) = \psi(\omega_0) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{d \ln R(\omega)}{d \ln \omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| \frac{d\omega}{\omega}$$

ou encore:

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\omega_a} \frac{d \ln R(\omega)}{d \ln \omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| \frac{d\omega}{\omega} \\ &- \frac{1}{2\pi} \int_{\omega_a}^{\omega_b} \frac{d \ln R(\omega)}{d \ln \omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| \frac{d\omega}{\omega} + \frac{S}{2\pi} \int_{\omega_b}^{\omega_n} \frac{1}{\omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| d\omega \\ &- \frac{4}{2\pi} \int_{\omega_n}^{\omega_m} \frac{1}{\omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| d\omega = \psi(\omega_0) \end{aligned}$$

La valeur de S est donc calculée à partir de (10):

$$S = \frac{\psi(\omega_0) - \left[-\frac{1}{2\pi} \int_0^{\omega_a} \frac{d \ln R(\omega)}{d \ln \omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| \frac{d\omega}{\omega} - \frac{1}{2\pi} \int_{\omega_a}^{\omega_b} \frac{d \ln R(\omega)}{d \ln \omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| \frac{d\omega}{\omega} - \frac{4}{2\pi} \int_{\omega_n}^{\omega_m} \frac{1}{\omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| d\omega \right]}{\frac{1}{2\pi} \int_{\omega_b}^{\omega_n} \frac{1}{\omega} \ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| d\omega} \quad (10)$$

Calcul numérique du déphasage à la réflexion

Après calcul des valeurs de R dans les régions $0 \rightarrow \omega_a$ et $\omega_b \rightarrow \infty$, le calcul de l'intégrale entière devient possible par la méthode des trapèzes. Nous rappelons que le déphasage peut être aussi calculé à partir d'une autre méthode basée sur l'algorithme de Bode [2,3].

La méthode des trapèzes est celle que nous avons utilisée pour calculer le déphasage à la réflexion à partir de (5). Comme la valeur de l'intégrale I_1 ($0 \rightarrow \omega_a$) n'influe pas sur la valeur du déphasage, (6) peut être écrite comme suit:

$$\theta(\omega_0) = \int_{\omega_a}^{\omega_b} + \int_{\omega_b}^{\infty} = I_2 + I_3$$

I_2 et I_3 , sont calculées par la méthode des trapèzes [8].

Ecrivons l'équation (5) sous la forme suivante:

$$\theta(\omega_0) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} f(\omega) d\omega ,$$

$$\text{avec: } f(\omega) = \left[\frac{d \ln R(\omega)}{d \ln \omega} \right] \frac{1}{\omega} \left[\ln \left| \frac{\omega + \omega_0}{\omega - \omega_0} \right| \right] \quad (11)$$

Nous calculons les valeurs de $f(\omega_i)$ à $\omega = \omega_0$, pour toutes les valeurs ω_i variant entre ω_a et ω_n en prenant $f(\omega_0)$ égale à zéro pour $\omega_i = \omega_0$.

La fonction $K = \frac{d \ln R(\omega)}{d \ln \omega}$, qui n'est autre que la dérivée de la fonction $\ln R(\omega)$ par rapport à l'énergie ω , peut être écrite pour chaque valeur ω_i , selon (12) :

$$K_i = K(\omega_i) = \frac{\omega_i}{R(\omega_i)} \frac{R(\omega_{i+1}) - R(\omega_i)}{\omega_{i+1} - \omega_i} \quad (12)$$

Dans le programme, chaque valeur de K_i est calculée entre les points ω_i et ω_{i+1} dont les valeurs correspondantes de la réflexion sont respectivement $R(\omega_i)$ et $R(\omega_{i+1})$. Pour ω_0 donnée, nous calculons tous les points $f(\omega_i)$. L'intégrale sera donc le résultat de la somme des aires des trapèzes élémentaires dont chacun est délimité par les points ω_{i-1} et ω_i , où la fonction $f(\omega)$ prend respectivement les valeurs $f(\omega_{i-1})$ et $f(\omega_i)$. L'écart $\Delta\omega = \omega_i - \omega_{i-1}$ doit être le plus petit possible pour évaluer avec une bonne précision la valeur de $\theta(\omega_0)$. La surface élémentaire d'un trapèze entre ω_i et ω_{i-1} est:

$$A_{i-1,i} = \frac{1}{2} (\omega_i - \omega_{i-1}) \times (f(\omega_i) + f(\omega_{i-1}))$$

La surface totale est obtenue en additionnant les surfaces élémentaires des trapèzes. Soit:

$$A(\omega_0) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (\omega_i - \omega_{i-1}) \times (f(\omega_i) + f(\omega_{i-1}))$$

Le déphasage est alors:

$$\theta(\omega_0) = -\frac{1}{2\pi} A(\omega_0) \quad (13)$$

CALCUL DES CONSTANTES OPTIQUES

Le calcul du déphasage à la réflexion $\theta(\omega)$ et la mesure de la réflexion permettent de calculer les constantes optiques n et k par résolution numérique d'un système de deux équations non linéaires par la méthode de Newton-Raphson [6,9-11]. Ces équations sont les suivantes:

$$\left. \begin{aligned} \delta(n, k) - \theta_{kk} &= 0 \\ R(n, k) - R_{mes} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

$R(n, k)$ et $\delta(n, k)$ sont ω_0 calculées à partir des équations

(3) et (4) ; θ_{kk} et R_{mes} sont respectivement le déphasage calculé et la réflexion mesurée.

Il s'agit de résoudre le système (14) à une énergie ω par approximations successives ; pour cela, nous lisons les valeurs de $R(\omega)$ et $\theta_{kk}(\omega)$ à chaque énergie ω , variant entre ω_a et ω_b , et nous proposons une valeur (n_0, k_0) de départ pour le couple (n, k) ; nous calculons, ensuite, $R(n_0, k_0)$ et $\delta(n_0, k_0)$ à partir de (3) et (4) ; ensuite, nous effectuons les différences suivantes :

$$\left. \begin{aligned} \Delta\theta &= \delta(n_0, k_0) - \theta_{kk} \\ \Delta R &= R(n_0, k_0) - R_{mes} \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Les valeurs de $\Delta\theta$ et de ΔR , à une énergie ω donnée, sont comparées à une certaine précision ε ; si les inégalités, $|\Delta R| < \varepsilon$ et $|\Delta\theta| < \varepsilon$ sont satisfaites, les valeurs n_0 et k_0 proposées seront retenues, sinon on varie sensiblement les valeurs de n_0 et de k_0 en rajoutant les quantités Δn_0 et Δk_0 figurant dans (16) et calculées à partir de (17).

$$\left. \begin{aligned} \Delta R_0 &= \left(\frac{\partial R}{\partial n} \right)_0 (\Delta n)_0 + \left(\frac{\partial R}{\partial k} \right)_0 (\Delta k)_0 \\ \Delta\theta_0 &= \left(\frac{\partial \delta}{\partial n} \right)_0 (\Delta n)_0 + \left(\frac{\partial \delta}{\partial k} \right)_0 (\Delta k)_0 \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Les valeurs de Δn_0 et Δk_0 sont les suivantes :

$$\Delta n_0 = \frac{\begin{vmatrix} \Delta R_0 & \left(\frac{\partial R}{\partial k} \right)_0 \\ \Delta\theta_0 & \left(\frac{\partial \delta}{\partial k} \right)_0 \end{vmatrix}}{\Delta}, \quad \Delta k_0 = \frac{\begin{vmatrix} \left(\frac{\partial R}{\partial n} \right)_0 & \Delta R_0 \\ \left(\frac{\partial \delta}{\partial n} \right)_0 & \Delta\theta_0 \end{vmatrix}}{\Delta} \quad (17)$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} \left(\frac{\partial R}{\partial n} \right)_0 & \left(\frac{\partial R}{\partial k} \right)_0 \\ \left(\frac{\partial \delta}{\partial n} \right)_0 & \left(\frac{\partial \delta}{\partial k} \right)_0 \end{vmatrix}$$

Δ est le Jacobien dont la valeur ne doit pas être nulle pour éviter les solutions triviales. Les valeurs de n et k seront donc n_1 et k_1 tels que $n_1 = n_0 + \Delta n_0$ et $k_1 = k_0 + \Delta k_0$.

Le système (15) est résolu à nouveau avec un nouveau couple (n_1, k_1) . Si les inégalités $|\Delta R| < \varepsilon$ et $|\Delta\theta| < \varepsilon$ sont satisfaites, le couple (n_1, k_1) est retenu, sinon on calcule d'autres accroissements Δn_1 et Δk_1 et en refait un nouveau calcul avec de nouvelles valeurs $n_2 = n_1 + \Delta n_1$ et $k_2 = k_1 + \Delta k_1$, et ainsi de suite.

Après avoir déterminé les valeurs de n et de k à ω donnée, elles serviront comme valeurs de départ pour résoudre le système (15) au point qui suit son précédent. Les indices n et k retenus serviront au calcul des parties réelle (18) et imaginaire (19) de la constante diélectrique et de l'absorption optique (20) :

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2 \quad (18)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk \quad (19)$$

$$A = \frac{2nk}{\lambda} = \frac{\varepsilon_2}{\lambda} \quad (20)$$

RESULTATS ET DISCUSSION

Le programme élaboré a permis de calculer le déphasage à la réflexion et les constantes optiques de l'alliage métallique amorphe de composition $\text{Pd}_{30}\text{Y}_{70}$ (Pd: Palladium et Y: Yttrium) préparé par pulvérisation cathodique à partir d'une cible cristalline du composé Pd_2Y_5 . Nous rappelons que les dépôts ont été effectués sur un substrat en verre à la température ambiante sous un vide de 10^{-7} Torr. La réflexion de l'alliage $\text{Pd}_{30}\text{Y}_{70}$ est mesurée à l'air libre sur un spectrophotomètre CARY 17 entre 0,4774 eV et 6,2 eV ; elle est représentée sur la figure 1. Sa valeur maximale (à $\omega_a = 0,4774$ eV) vaut 0,596 ; elle est considérée faible à cause de la forte diffusion des états s p de Pd par les états 4d de l'yttrium présents au voisinage du niveau de Fermi.

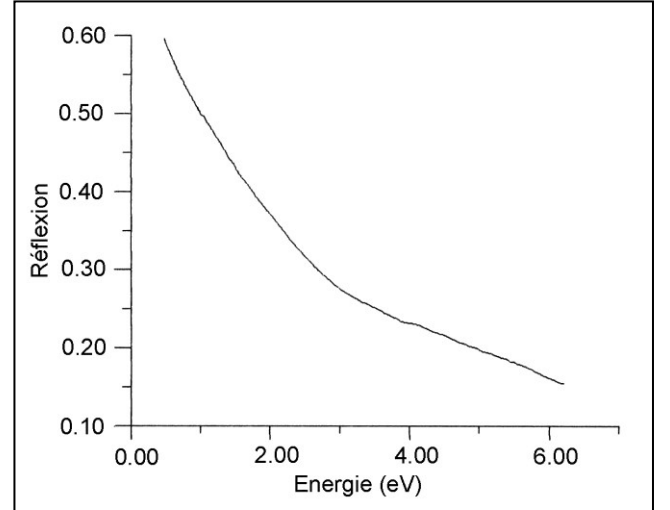


Figure 1 : Courbe de la réflexion mesurée de $\text{Pd}_{30}\text{Y}_{70}$ [12].

Pour compléter le spectre de réflexion de l'alliage afin de rendre possible le calcul du déphasage, nous avons extrapolé les valeurs de la réflexion à partir de (7) (prolongement IR), pour les faibles énergies, et de (8) pour les grandes énergies. Sur la figure 2 est représentée la courbe de réflexion entre 0 et 50 eV de l'alliage $\text{Pd}_{30}\text{Y}_{70}$ amorphe ; au-delà de 50 eV, les valeurs calculées sont nulles. Les paramètres α et S sont ajustés à partir de (7) et (8) respectivement ; leurs valeurs sont les suivantes : $\alpha = 0.585$ et $S = 2.03$. Nous rappelons que S est ajusté à $\lambda = 4000\text{\AA}$ et que la valeur du déphasage éllipsométrique correspondante est égale à -0.692 .

Déphasage à la réflexion de $\text{Pd}_{30}\text{Y}_{70}$

Le déphasage à la réflexion de l'alliage amorphe $\text{Pd}_{30}\text{Y}_{70}$ est calculé par la méthode des trapèzes à partir des données de la réflexion de la figure 2. Les résultats obtenus sont comparés à ceux obtenus, sur le même matériau par la méthode basée sur l'algorithme de Bode.

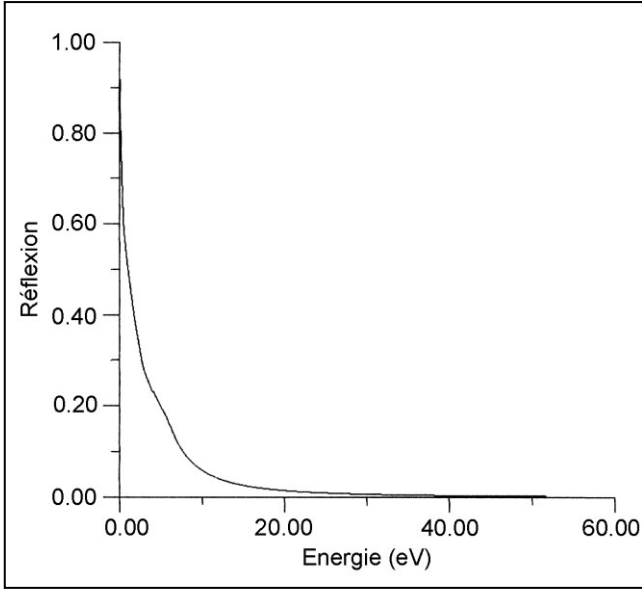


Figure 2: Courbe de la réflexion de Pd₃₀Y₇₀ mesurée (entre 0,4774eV et 6.2eV) et complétée avec prolongement IR ($\alpha = 0,585$) et UV lointain ($S = 2,03$).

Sur la figure 3 sont représentées les courbes du déphasage calculées pour $S = 2,03$, avec et sans prolongement IR. Les résultats obtenus sont comparés à ceux de la référence [12]. Aux basses énergies, la courbe avec prolongement IR s'éloigne des deux autres; ceci s'explique par le fait que le prolongement ne doit pas être pris en considération à cause de la présence des états électroniques 4d de Y au voisinage du niveau de Fermi. Si le prolongement IR est ignoré, on note un bon accord entre la référence et notre résultat. Aux grandes énergies, les trois courbes ont la même allure et présentent un écart insignifiant.

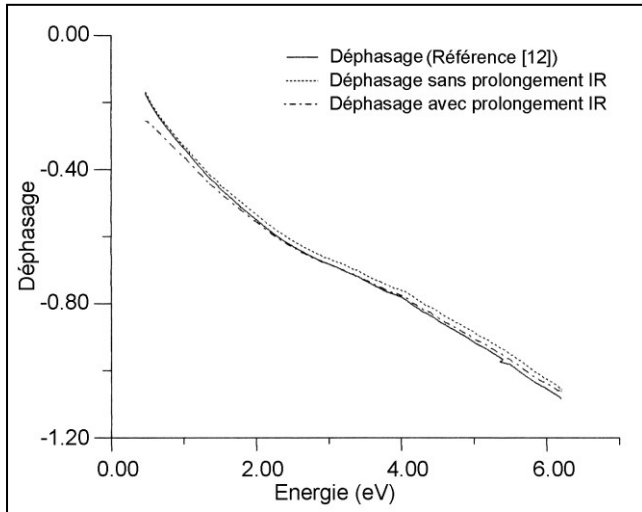


Figure 3: Courbes du déphasage calculées avec prolongement IR (---), sans prolongement IR (.....), comparées à la réf. [12] (—).

Calcul des constantes optiques

Le calcul du déphasage à la réflexion est suivi par le calcul des constantes optiques n et k de Pd₃₀Y₇₀. Nous

rappelons que les valeurs de n et k calculées dépendent des valeurs initiales $n_0 = 1.02$ et $k_0 = 2.02$, choisies à $\lambda = 26000\text{\AA}$.

Nous avons représenté sur la figure 4 les courbes n et k obtenues pour $S = 2.03$; les deux indices donnent une idée sur la réponse du matériau. Il en est de même pour la constante diélectrique, sachant qu'elle est reliée à l'indice de réfraction complexe [1] par l'équation $\tilde{n} = \sqrt{\tilde{\epsilon}}$. Pour cela, on a représenté les parties réelle ϵ_1 et imaginaire ϵ_2 de la constante diélectrique en fonction de n et k , sur les figures 5 et 6 respectivement. Pour mieux observer la réponse du matériau, il est plus commode de représenter l'absorption optique $\left(\frac{\epsilon_2}{\lambda} = \frac{2nk}{\lambda}\right)$.

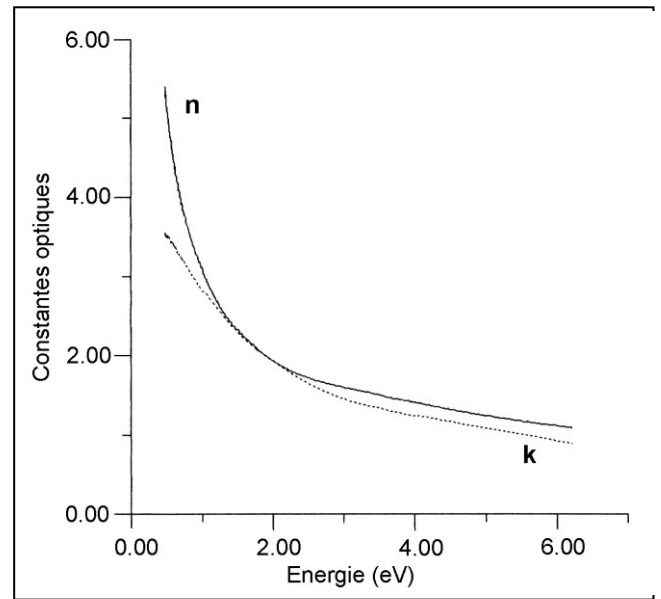


Figure 4: Courbes de n et k calculées (pour $S = 2.03$) par la méthode des trapèzes.

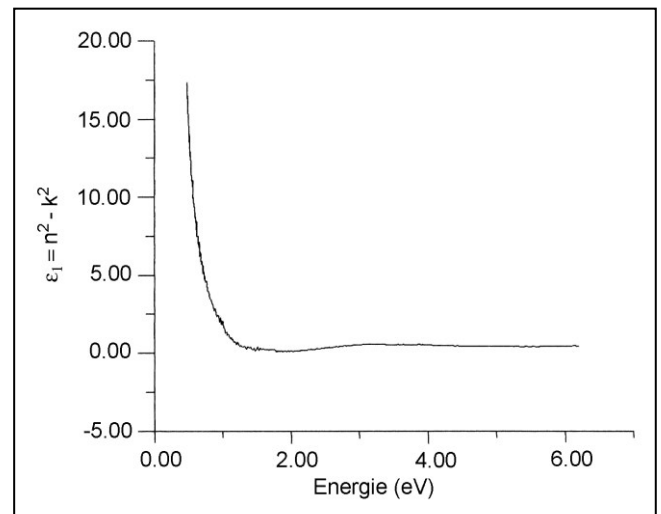


Figure 5: Partie réelle de la constante diélectrique calculée à partir des valeurs de n et k de la figure 4.

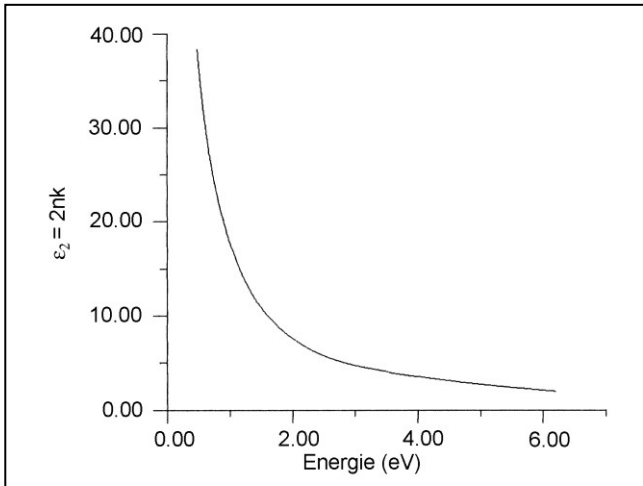


Figure 6: Partie imaginaire de la constante diélectrique calculée à partir des valeurs de n et k de la figure 4.

Sur la figure 7, nous avons représenté ϵ_2 / λ calculée à partir des données de la courbe 4 ; on observe sur le spectre d'absorption optique une large structure située entre 3 et 6 eV et une seconde qui se développe aux basses énergies centrée autour de 1 eV. La structure centrée autour de 4 eV appartient à Pd et représente ses états électroniques 4d. Cette bande, presque pleine dans Pd pur [13], est remplie dans l'alliage Pd₃₀Y₇₀ par hybridation du type sp-d. La deuxième structure qui se développe aux basses énergies, centrée à environ 1 eV, représente l'image de la densité des états 4d pleins dans Y qui sont presque vides dans Y pur [14]; elle est due aux transitions électroniques entre les états 4d de Y et le niveau de Fermi.

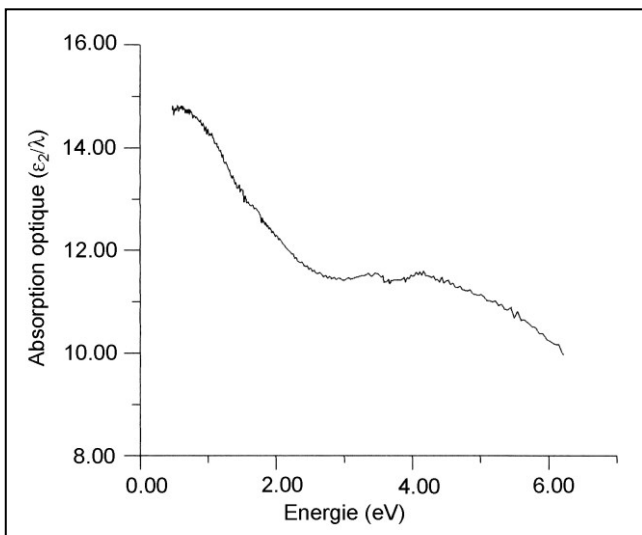


Figure 7: Courbe de l'absorption optique calculée à partir des données de la figure 4.

CONCLUSION

Le spectre d'absorption optique de l'alliage amorphe Pd₃₀Y₇₀ a été calculé dans une gamme d'énergie allant de 0,5 eV à 6,2 eV. Les grandeurs utilisées pour effectuer ce calcul sont la réflexion mesurée et le déphasage à la réflexion, calculés numériquement à partir de la relation de Kramers-Kronig. On a observé deux structures dont la première est due au palladium située entre 3 et 6 eV provenant de ses états 4d et la deuxième qui se développe aux basses énergies provenant des états 4d de l'Yttrium. La forte interaction des états de type sp de Pd avec les états 4d de Y au voisinage du niveau de Fermi se traduit par une diminution de l'absorption optique aux basses énergies contrairement à ce qui doit se passer dans le métal pur. Il serait recommandable d'effectuer des mesures de la réflexion en-dessous de 0,5 eV et calculer ensuite l'absorption optique pour observer son profil et avoir une idée claire sur la structure qui apparaît aux basses énergies.

REFERENCES

- [1]- Wooten F., "Optical Properties of Solids", Academic Press, New York and London, (1972), p. 43 et 116.
- [2]- Rivory J., "Etude comparative de la structure électronique des alliages entre métaux nobles par spectroscopie optique", Thèse d'état, Paris VI, (1975).
- [3]- Bode H.W., "Network Analysis and Feedback design", Van D., Nostrand I., New York, (1945), p. 337.
- [4]- Roessler D.M., "Journal of Applied Physics", 16, (1965), p. 119
- [5]- Abelès F., Advanced Optical Technic in Optics of Thin Films, Ed. A. C. S. Van Heel, North-Holland Amsterdam, (1967), p. 141
- [6]- Abelès F., Tèye M.L., *Surface Sci.*, 5 (1966), p. 325.
- [7]- Ellis H. W., Stevenson J. R., "Journal of Applied Physics", 46, (1975), p. 3066
- [8]- Khima R., "Applications Mathématiques par le Basic et le Fortran", O.P.U. Alger (1991), p.73.
- [9]- Boumahrat M., Gourdin A., "méthodes numériques appliquées", O.P.U. Alger (1993), p. 46.
- [10]- Sibony M., Mardon J.C.L., "Systèmes linéaires et non linéaires", Herman, Paris, 2 (1982), p. 54.
- [11]- Meddour A., Nadji A.R., "Calcul de la constante diélectrique du manganèse (Mn) et de l'alliage Al₈₈Mn₁₂ à partir des mesures photométriques de la réflectance et de la transmittance", *Sciences et Technologie*, Univ. Constantine, N°13, Juin (2000), pp. 47-52
- [12]- Meddour A., "Structures électroniques d'alliages métalliques amorphes et quasi-cristallins. Systèmes binaires PdY et AlMn", Thèse d'état, Paris VI, (1988).
- [13]- Moruzzi V.L., Janak j.F., Williams A.R., "Calculated electronic properties of metals", Pergamon Press, Oxford (1979).
- [14]- Speier W., Fuggle J.C., Zeller R., Campagna M., *Phys. Rev. B*30, (1984), p. 6921. □