

Résumé :

Les « cermets » sont des matériaux hétérogènes composés de grains métalliques de tailles nanométriques figés dans un isolant, ou posés sur un substrat de verre. Ces matériaux sont caractérisés par une géométrie fractale et une absorption « anormale » dans la gamme de fréquences du proche infrarouge et du visible. Notre étude numérique concerne leurs propriétés optiques et morphologiques. En premier lieu, nous nous sommes attachés dans ce mémoire, à présenter la théorie de la percolation, ainsi que les grandeurs et les modèles essentiels qui nous ont permis d'étudier statistiquement les couches métalliques semi-continues. Nous présentons ensuite l'élaboration d'un nouveau programme, fondé sur un algorithme de Monte-Carlo et un potentiel inter-atomique semi-empirique, permettant de simuler les différents stades de la croissance de films minces d'*or*. Cette simulation est, à notre connaissance, la seule à donner des résultats quasiment identiques aux clichés pris par microscopie électronique à transmission de ces couches.

La seconde partie de cette thèse est, quant à elle, consacrée à l'étude optique des cermets. En modélisant les grains d'*or* par des sphères métalliques polarisables posées sur un réseau carré de sites et en nous plaçant dans l'approximation quasi-statique, nous avons calculé l'interaction d'une onde sonde avec ces surfaces. Enfin, nous avons étendu notre étude aux échantillons à trois dimensions, en les modélisant par des réseaux aléatoires de liens et, en résolvant rigoureusement grâce à une nouvelle méthode numérique, l'hamiltonien de Kirchhoff dans ces systèmes. Nos résultats montrent qu'à deux dimensions, la localisation des champs exaltés à la surface des cermets dépend de la polarisation de l'onde incidente et que sous certaines conditions, les réseaux 3D peuvent se comporter comme des réseaux 2D.

Cette analyse des systèmes tridimensionnels ouvre des perspectives nouvelles pour une meilleure compréhension de l'activité optique des cermets.