

50376  
1982  
153

50376  
1982  
153

N° d'ordre 315

**THESE**

présentée

à

l'Université des Sciences et Techniques de Lille

pour obtenir

**LE GRADE DE DOCTEUR INGENIEUR**

par

*Olivier HARDOUIN DUPARC*

INGENIEUR ISEN

**QUELQUES PROPRIETES VIBRATIONNELLES EN LIMITE ELASTIQUE  
DES SURFACES DES CRISTAUX HEXAGONAUX ET CUBIQUES.  
INFLUENCE DES COUCHES SUPERFICIELLES.**

soutenue le 19 Novembre 1982, devant la commission d'examen :



Messieurs : **R. FOURET** Président  
**B. DJAFARI-ROUHANI** Rapporteur  
**G. BENEDEK** Examineurs  
**L. DOBRZYNSKI**  
**B. ESCAIG**  
**F. GARCIA-MOLINER**  
**J. SAPRIEL**

*A Saint François d'Assise (1182-1226),  
pour son amour de la Nature et de la  
Pauvreté,*

*A Sainte Thérèse d'Avila (1515-1582),  
qui malgré une profonde passion pour  
la vie mondaine a su s'en dégager et  
dans l'ascétisme le plus pur accomplir  
une oeuvre immense et ineffaçable,*

*A mes Parents,*

Cette thèse a été préparée pour la majeure partie au Laboratoire d'Etude des Surfaces et Interfaces, L.A. 253 au C.N.R.S. J'en remercie tous ses membres pour leur attitude amicale à mon égard.

J'exprime ma profonde gratitude à Monsieur B. DJAFARI-ROUHANI qui m'a aidé à réaliser cette thèse. Je lui suis reconnaissant du soutien et de l'amitié qu'il m'a toujours témoignés.

Dans le même esprit, je remercie également Monsieur L. DOBRZYNSKI.

J'exprime ma reconnaissance à Monsieur le Professeur R. FOURET qui a accepté la présidence de ce jury.

Je remercie Monsieur le Docteur J. SAPRIEL du C.N.E.T. de Bagneux de l'intérêt qu'il a bien voulu porter à mon travail en acceptant de participer à mon jury.

Je remercie les Professeurs G. BENEDEK de Milan, B. ESCAIG de Lille et F. GARCIA-MOLINER de Madrid d'avoir accepté de participer à mon jury.

Je remercie tous les membres de l'équipe du Professeur F. GARCIA-MOLINER à l'Universidad Autonoma de Madrid-Canto Blanco pour leur accueil sympathique lors de mon séjour dans leur laboratoire au début de cette année 1982. Plus spécialement je remercie le Professeur V. VELASCO avec qui j'ai travaillé.

Je remercie l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord pour la formation d'Ingénieur qu'il m'a donnée et pour son aide à la réalisation de cette thèse.

Enfin, je remercie tout spécialement Madame B. DECOSTER et Madame M.T. LEMAN qui ont remarquablement effectué la frappe de cette thèse et des difficiles équations qu'elle contient.

## SOMMAIRE

	<u>Pages</u>
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 : MODES DE SURFACE .....	4
I - 1 INTRODUCTION.....	4
I - 2 RAPPEL : DEFINITION D'UNE ONDE DE SURFACE ET METHODE POUR OBTENIR SA PULSATION .....	5
I - 3 MODES DE SURFACE EN PRESENCE D'UNE COUCHE MINCE DEPOSEE..	8
I - 3a : Cristaux hexagonaux avec surface (0001) .....	8
I - 3b : Cristaux cubiques avec surface (001) : directions de propagation [100] et [110] .....	12
I - 4 MODES DE SURFACE EN PRESENCE D'UNE COUCHE DEPOSEE D'EPAISSEUR ARBITRAIRE .....	12
I - 4a : Cristaux hexagonaux .....	13
I - 4b : Cristaux cubiques .....	18
I - 5 DIFFUSION BRILLOUIN AVEC INFLUENCE D'UNE COUCHE MINCE DEPOSEE .....	22
CHAPITRE 2 : INFLUENCE DES COUCHES SUPERFICIELLES SUR L'INTERACTION ELASTIQUE DE DEFANTS ET LES DEPLACEMENTS QUADRATIQUES MOYENS DES ATO- MES (CAS DES CRISTAUX HEXAGONAUX).....	30
II- 1 INTRODUCTION .....	30
II- 2 INTERACTION ELASTIQUE D'UN DEFANT AVEC UNE SURFACE .....	32
II- 3 INTERACTION ELASTIQUE ENTRE DEUX DEFANTS .....	37
II- 4 DEPLACEMENTS QUADRATIQUES MOYENS DES ATOMES .....	43
CHAPITRE 3 : EXTENSION AU CAS DES SURFACES INHOMOGENES	48
III-1 INTRODUCTION .....	48
III-2 OBTENTIONS DES CONDITIONS AUX LIMITES EFFECTIVES .....	50

	<u>Pages</u>
III-3 DISCUSSIONS .....	55
III-4 NOTE SUR LES SANDWICHES A B C .....	57
 CONCLUSION .....	 61
 APPENDICE : LE FORMALISME DE L'ELASTICITE ET LES FONCTIONS DE GREEN .....	  65
A.1 FORMALISME GENERAL .....	65
A.1.1 : Introduction. Eléments physiques du problème : cas d'un substrat cristallin semi infini défini par $x_3 \geq 0$ .....	  65
A.1.2 : Fonctions de Green .....	72
A.2 CAS D'UN SUBSTRAT SURMONTE D'UNE COUCHE DEPOSEE .....	73
A.2.1 : Equations générales .....	73
A.2.2 : Cas d'une couche mince .....	74
A.2.2.1 : Obtention des conditions effectives de contraintes en $x_3 = 0$ .....	 74
A.2.2.2 : Calcul de la fonction de Green stati- que dans le cas hexagonal. ....	 76
 BIBLIOGRAPHIE .....	 85

## INTRODUCTION

La présence d'une couche déposée ou d'inhomogénéités à la surface d'un cristal modifie les propriétés physiques statiques et dynamiques de ce cristal. Nous avons choisi d'étudier ici, en nous plaçant dans le cadre de la limite élastique, l'influence d'une couche déposée en surface sur quelques propriétés vibrationnelles du nouveau système : vitesse des ondes de surface, déplacements carrés moyens des atomes du substrat, ainsi que l'énergie élastique d'interaction d'un défaut ponctuel avec la surface et la couche déposée ou l'interaction de deux défauts ponctuels entre eux. Les matériaux cristallins que nous avons étudiés sont des cristaux de symétrie hexagonale (avec surface (0001)) ou de symétrie cubique (avec surface (001)). On tient compte ainsi de la symétrie des cristaux réels qui ne sont plus approximés par un modèle isotrope. D'autre part, la surface (0001) des cristaux hexagonaux est isotrope en limite élastique, ce qui rend encore possible l'obtention de formules analytiques parfaitement générales et facilement interprétables pour toutes les propriétés susmentionnées dans le cas où la couche déposée est mince (c'est-à-dire d'épaisseur  $h$  faible par rapport à la longueur d'onde  $\lambda$ ). Pour la raison inverse, la surface (001) des cristaux cubiques étant anisotrope, il est intéressant d'étudier la modification des vitesses des ondes de cette surface selon des directions données du vecteur de propagation parallèle à la surface  $\vec{k}_{//}$ . En outre, cette dernière surface présente aussi parfois l'existence dans certaines directions de propagation d'une "pseudo

onde" de surface qui est en fait une résonance de volume également détectable expérimentalement par diffusion Brillouin.

Dans le chapitre 1, nous avons ainsi étudié la dispersion des vitesses des ondes de surface en fonction de l'épaisseur  $h$  de la couche déposée. Lorsque cette dernière est mince, on peut, pour les cristaux hexagonaux, obtenir des formules purement analytiques. Dans le cas où l'épaisseur est arbitrairement grande, nous avons complété cette étude par une résolution numérique sur des cas concrets des principales combinaisons possibles de cristaux hexagonaux, et en prenant l'exemple des alliages  $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  déposés sur Ga As pour les cristaux cubiques. Nous avons également examiné la modification des profils des intensités de diffusion Brillouin dans le cas des épaisseurs faibles. L'intérêt de cette étude est qu'elle permet l'investigation des pseudo ondes de surface qui peuvent exister sur certaines surfaces cubiques.

Dans le chapitre 2, nous étudions l'influence des couches superficielles sur l'interaction élastique de défauts ponctuels et les déplacements quadratiques moyens des atomes. En considérant le cas des couches minces déposées à la surface (0001) des cristaux hexagonaux, nous avons obtenu des résultats écrits sous forme explicite. Une telle étude n'ayant encore jamais été réalisée pour les cristaux hexagonaux, nous avons à chaque fois donné séparément la contribution due uniquement à la surface sans adsorbat, la contribution due à la couche déposée mince et, lorsqu'il y avait lieu, la contribution due au volume.

Le chapitre 3 constitue enfin une généralisation de la plupart des résultats précédents au cas de plusieurs couches superficielles de nature différente tant que l'épaisseur totale de ces couches reste faible devant  $\lambda$ . Notons qu'une telle division en une série successive de couches superficielles peut également simuler la présence d'inhomogénéités au voisinage d'une surface. Bien que de telles inhomogénéités apparaissent effectivement lors de traitements spéciaux des métaux comme la trempe ou l'écrouissage, c'est la première fois que le problème des inhomogénéités de surface est ainsi traité.

Dans la conclusion, nous résumons les principaux résultats que nous avons obtenus, et nous indiquons les perspectives d'avenir qui

existent dans le prolongement de la présente étude.

Tout au long du travail que nous avons réalisé au niveau de cette thèse, nous avons utilisé le formalisme des fonctions de Green. Nous consacrons donc à ce formalisme un appendice assez important où sont développés les méthodes et les résultats particuliers dont nous avons eu besoin pour réaliser nos calculs.

## CHAPITRE 1

### MODES DE SURFACE

#### I - 1 INTRODUCTION

Les ondes acoustiques de surface ont trouvé depuis une quinzaine d'années de nombreuses applications pratiques dans plusieurs domaines tels que la réalisation de filtres passe-bande, de lignes à retard ou de mémoires, de moyens de contrôle non destructif des surfaces (cf. [1]) et aussi de guides d'onde dans le cas des systèmes à plusieurs interfaces (cf. [2,3]).

En présence d'une couche déposée à la surface, la vitesse d'une onde acoustique de surface subit une modification qui dépend de la nature de la couche et de son épaisseur  $h$ . De nouveaux modes de surface peuvent même éventuellement apparaître par rapport au cas de la surface propre [2,4-7]. Expérimentalement, la variation de fréquence de ces ondes peut être détectée même si le taux de recouvrement de surface n'est que de quelques centièmes d'une monocouche adsorbée si on génère la propagation de cette onde sur un substrat piézoélectrique [8]. Une autre méthode de mesure de vitesse de ces ondes acoustiques de surface est la diffusion Brillouin [9].

Dans le cas où l'épaisseur  $h$  est faible par rapport à la longueur d'onde de la vibration acoustique excitée, on peut, dans certains cas,

obtenir des formules analytiques pour les expressions donnant la dispersion des ondes de surface au premier ordre en  $hk_{//}$  (où  $k_{//}$  est le module du vecteur d'onde parallèle à la surface  $\vec{k}_{//}$ ). Ces cas sont, outre la surface des milieux isotropes, la surface (0001) des milieux hexagonaux et les directions [100] et [110] de la surface (001) des milieux cubiques. Nous établissons ces formules analytiques dans le paragraphe I-3, après avoir rappelé ce qu'est une onde de surface.

Dans le cas d'une épaisseur quelconque, l'obtention de la variation en fréquence des modes de surface doit se faire numériquement, et c'est ce que nous faisons au paragraphe I-4, où nous présentons et commentons les résultats de ces calculs.

Dans le paragraphe I-5, nous examinons le spectre de la diffusion Brillouin et sa modification due à la présence d'une couche déposée d'épaisseur mince.

## I - 2 RAPPEL : DEFINITION D'UNE ONDE DE SURFACE ET METHODE POUR OBTENIR SA PULSATION.

On dira qu'une onde de surface de pulsation  $\omega$  donnée "existe" pour telle surface de tel matériau (le verbe "existe" signifiant ici que, si on génère une vibration de pulsation en un point donné de la surface, cette vibration se propagera théoriquement sans atténuation le long de cette surface) si et seulement si on peut trouver une fonction du type

$$\vec{U} = \vec{U}(\vec{k}_{//} | \omega | x_3) e^{i(\vec{k}_{//} \cdot \vec{x}_{//} - \omega t)} \quad (1.1)$$

assujettie aux conditions de limite à la surface et qui soit solution de l'équation de mouvement dans le volume. Nous écrirons ici cette équation en milieu élastique avec l'approximation de Hooke sur les contraintes [11] :

$$L_s \vec{U} = 0$$

où  $L_s$  est une matrice 3x3 dont les éléments sont définis par

$$L_{s_{\alpha\mu}} = -\delta_{\alpha\mu} \rho \frac{\partial^2}{\partial t^2} + C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu} + \delta(x_3) C_{\alpha 3\mu\nu} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \quad (1.2a)$$

Dans cette expression, les indices grecs varient de 1 à 3 et la sommation est sous entendue pour tout indice doublé conformément à la règle d'Einstein. Les  $C_{\alpha\beta\mu\nu}$  sont les constantes de forces élastiques du matériau et  $\rho$  est sa densité.  $\delta(x_3)$  est l'habituelle fonction de Dirac. Les coordonnées  $x_1, x_2, x_3$ , sont définies par rapport à un repère affine orthonomé direct  $(O, \hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$  où  $O$  est un point de la surface et  $\hat{x}_3$  indique la direction perpendiculaire à la surface telle que le substrat semi infini se trouve dans le demi espace  $x_3 \geq 0$ . Dans l'équation (1.1), on a  $\vec{x}_{//} = (x_1, x_2, 0)$  et  $\vec{k}_{//} = (k_1, k_2, 0)$ .  $e^{i(\vec{k}_{//} \cdot \vec{x}_{//} - \omega t)}$  exprime donc le fait que l'on recherche une onde qui se propage parallèlement à la surface et  $\vec{U}(\vec{k}_{//} | \omega | x_3)$  est le vecteur amplitude de cette onde. Ses composantes doivent être "rapidement" décroissantes avec la distance  $x_3$  à la surface, justifiant ainsi l'appellation d'"onde de surface" donnée à cette onde qui n'aura de fait une amplitude non négligeable qu'à la surface et en son voisinage immédiat.

La détermination de ces ondes de surface revient donc à rechercher des fonctions décroissantes  $\vec{U}(\vec{k}_{//} | \omega | x_3)$ , solutions de l'équation

$$\ell_s(\vec{k}_{//} | \omega | x_3) \cdot \vec{U}(\vec{k}_{//} | \omega | x_3) = 0 \quad (1.3)$$

où  $\ell_s(\vec{k}_{//} | \omega | x_3)$  est la transformée de Fourier de  $L_s$  par rapport à  $\vec{x}_{//}$  et au temps  $t$ , à laquelle on a en outre fait subir une rotation amenant  $\vec{k}_{//}$  en parallèle avec l'axe  $\hat{x}_1$ . Cette dernière transformation a pour simple but d'introduire des simplifications au niveau de  $\ell_s(\vec{k}_{//} | \omega | x_3)$  lorsque le plan  $(\hat{x}_1, \hat{x}_2)$  est isotrope.

La résolution de (1.3) est en fait équivalente à la résolution d'une équation de mouvement dans le volume accompagnée d'une équation exprimant les conditions aux limites que doivent respecter les solutions (nous prenons ici le cas d'une surface libre, ce qui revient à écrire que les contraintes doivent être nulles à la surface). Ces deux équations matricielles peuvent être écrites de la manière suivante :

$$\mathcal{L}_s^v(\vec{k}_{//} \omega | x_3) \vec{U}(\vec{k}_{//} \omega | x_3) = 0 \quad x_3 > 0 \quad (1.4a)$$

$$\mathcal{L}_s^c(\vec{k}_{//} \omega | x_3) \vec{U}(\vec{k}_{//} \omega | x_3) = 0 \quad x_3 = 0 \quad (1.4b)$$

La solution  $\vec{U}(\vec{k}_{//} \omega | x_3)$  de l'équation de volume (1.4a) qui décroît avec  $x_3$  a pour composantes

$$U_\mu(\vec{k}_{//} \omega | x_3) = \sum_{\nu=1}^3 A_{\mu\nu} e^{-\alpha_\nu k_{//} x_3} \quad \mu = 1, 2, 3 \quad (1.5)$$

où les  $\alpha_\nu$  sont les zéros à partie réelle positive du déterminant caractéristique de l'équation algébrique d'ordre 6 en résultant de l'introduction d'une solution exponentielle de la forme  $\vec{U}(\vec{k}_{//} \omega | x_3) = \vec{A} e^{-\alpha k_{//} x_3}$  dans l'équation (1.4a).  $k_{//}$  est bien entendu le module de  $\vec{k}_{//}$ . A chaque valeur de  $\alpha_\nu$  correspond un vecteur propre  $(A_{1\nu}, A_{2\nu}, A_{3\nu})$ . Il n'y a donc que trois  $A_{\mu\nu}$  à déterminer (une pour chaque valeur de  $\nu$ ) pour compléter la caractérisation de (1.5).

Ces solutions  $\vec{U}_\alpha(\vec{k}_{//} \omega | x_3)$  devant également satisfaire à l'équation aux limites (1.4b), ceci permet en fait la détermination des  $A_{\mu\nu}$ . La condition d'existence d'une onde de surface est donc finalement que l'équation (1.4b) appliquée au vecteur  $\vec{U}(\vec{k}_{//} \omega | x_3)$  défini par (1.5) admette une solution non triviale pour les  $A_{\mu\nu}$ , ce qui revient à annuler son déterminant caractéristique. Les solutions  $\omega$  de cette équation caractéristique sont les pulsations des ondes de surface. Dans le cas où nous nous sommes situés, et qui est le cas d'une surface libre et plane, il se révèle qu'il n'existe qu'une seule onde de surface qu'on appelle onde de Rayleigh, et dont la polarisation est sagittale (v.g. on a  $U_2 = 0$  si  $U_1$  est la composante parallèle au vecteur de propagation  $\vec{k}_{//}$  et  $U_3$  la composante perpendiculaire à la surface). On note  $\omega_R$  la pulsation de l'onde de Rayleigh et  $C_R$  sa vitesse de phase définie par  $\omega_R = C_R k_{//}$ .

Le raisonnement que nous avons développé ci-dessus pour obtenir les pulsations des ondes de surface reste valable si, au lieu d'utiliser le vecteur  $\vec{U}$ , on avait utilisé une fonction de Green D définie par

$$L_s(\vec{x}; t) \cdot D(\vec{x}, \vec{x}'; t-t') = \delta(\vec{x}, \vec{x}') \delta(t-t') \text{Id}_3 \quad (1.6)$$

où  $\text{Id}_3$  est la matrice identité de dimension 3.

Ce raisonnement est également généralisable au cas de surfaces recouvertes de couches adsorbées, et cela a été fait pour les milieux isotropes et, partiellement, pour les milieux cubiques [10]. Nous faisons dans les deux paragraphes qui suivent cette généralisation au cas des milieux hexagonaux en considérant la surface (0001) et au cas des milieux cubiques en considérant la surface (001). La méthode que nous venons d'esquisser rapidement se trouve expliquée avec plus de détails au niveau de l'appendice. C'est dans l'appendice également que l'on trouvera les expressions explicites des matrices  $\ell^V$  et  $\ell_S^C$  (par convention, tout ce qui caractérise la couche déposée est indicé prime). Notamment, pour la surface (0001) des cristaux hexagonaux, on constate que les termes matriciels 12, 21, 23 et 32 sont nuls, et ceci est en fait une conséquence de l'isotropie de cette surface en limite élastique. Il se produit alors au niveau de la résolution des équations pour la recherche des modes de propagation un découplage entre les modes sagittaux (v.g. de polarisation comprise dans le plan sagittal qui est lui-même défini par le vecteur d'onde  $\vec{k}_{//}$  parallèle à la surface et la normale  $\vec{x}_3$  à la surface) et les modes transverses (v.g. de polarisation perpendiculaire au plan sagittal).

### I - 3 MODES DE SURFACE EN PRESENCE D'UNE COUCHE MINCE DEPOSEE.

Dans le cas d'une couche mince d'épaisseur  $h$ , et conformément à un raisonnement [7] que nous rappelons dans l'appendice, il suffit, pour avoir les nouveaux modes de propagation de surface, de remplacer au niveau de l'équation (1.4b) la matrice  $\ell_S^C$  par  $\ell_{sa}^C$  où  $\ell_{sa}^C$ , au premier ordre en  $hk_{//}$ , est donnée par

$$\ell_{sa}^C = \ell_S^C + h M' \quad (1.7)$$

où  $M'$  dépend de la nature de la couche déposée.

#### I - 3a Cristal hexagonal avec surface (0001)

On trouvera les expressions des matrices  $\ell^V$ ,  $\ell_S^C$  et  $M'$  relatives à l'hexagonal dans l'appendice (A.12).

La dispersion de fréquence du mode sagittal sera donnée par l'équation suivante, qui fait intervenir un déterminant d'ordre 2 :

$$\begin{vmatrix} -C_{44} \left( \alpha_1 + \frac{C_{44} (\alpha_1^2 + \gamma_1^2)}{(C_{13} + C_{44}) \gamma_1} \right) + & -C_{44} \left( \alpha_2 + \frac{C_{44} (\alpha_2^2 + \gamma_2^2)}{(C_{13} + C_{44}) \gamma_2} \right) + \\ + h \left[ \frac{\rho' \omega^2}{k_{//}} - (C'_{11} - \frac{C_{13}^2}{C_{33}}) \right] & + h \left[ \frac{\rho' \omega^2}{k_{//}} - (C'_{11} - \frac{C_{13}^2}{C_{33}}) \right] \\ C_{13} + \frac{C_{33} C_{44} (\alpha_1^2 + \gamma_1^2)}{(C_{13} + C_{44})} - & C_{13} + \frac{C_{33} C_{44} (\alpha_2^2 + \gamma_2^2)}{(C_{13} + C_{44})} - \\ - h \frac{\rho' \omega^2 C_{44} (\alpha_1^2 + \gamma_1^2)}{k_{//}^2 (C_{13} + C_{44}) \alpha_1} & - h \frac{\rho' \omega^2 C_{44} (\alpha_2^2 + \gamma_2^2)}{k_{//}^2 (C_{13} + C_{44}) \alpha_2} \end{vmatrix} = 0 \quad (1.8)$$

où l'on a adopté comme notations :

$$\alpha_1^2 = \frac{1}{2} \left[ x + (x^2 - 4y^2)^{1/2} \right], \quad \alpha_2^2 = \frac{1}{2} \left[ x - (x^2 - 4y^2)^{1/2} \right] \quad (1.9a)$$

$$\gamma_1^2 = \left( \frac{\rho \omega^2}{k_{//}^2} - C_{11} \right) / C_{44}, \quad \gamma_2^2 = \left( \frac{\rho \omega^2}{k_{//}^2} - C_{44} \right) / C_{33} \quad (1.9b)$$

$$x = -\gamma_1^2 - \gamma_2^2 - \frac{(C_{13} + C_{44})^2}{C_{33} + C_{44}} \quad \text{et} \quad y^2 = \gamma_1^2 \gamma_2^2 \quad (1.9c)$$

$\rho$  étant la densité du substrat et les  $C_{ij}$  ses constantes élastiques de forces en notation condensée de Voigt. Les  $\rho'$  et  $C'_{ij}$  se rapportent à la couche déposée.

Parallèlement, la dispersion pour le mode transverse sera déduite de l'équation suivante, qui fait intervenir un déterminant d'ordre 1 :

$$C_{44} \alpha_t + h C'_{44} \alpha'_t = 0 \quad (1.10)$$

avec

$$\alpha_t^2 = \frac{C_{11} - C_{12}}{2 C_{44}} - \frac{\rho \omega^2}{C_{44} k_{//}^2} \quad \text{et} \quad \alpha'_t{}^2 = \frac{C'_{11} - C'_{12}}{2 C'_{44}} - \frac{\rho' \omega^2}{C'_{44} k_{//}^2} \quad (1.11)$$

Pour une surface propre, l'équation (1.8) conduit à l'onde de Rayleigh bien connue  $\omega = C_R k_{//}$ . En présence d'une fine couche adsorbée ( $hk_{//} \ll 1$ ), nous cherchons une solution à l'équation (1.8) sous la forme:

$$\omega^2 = C_R^2 k_{//}^2 (1 - \gamma hk_{//}) + o(hk_{//}) \quad (1.12)$$

avec  $\gamma = N/D$  (1.13)

ce qui donne

$$N = (C'_{11} - \frac{C'_{13}{}^2}{C'_{33}}) \frac{C_{33} C_{44}}{C_{13} + C_{44}} (T_2 - T_1) + \rho' C_R^2 \frac{C_{44}}{C_{13} + C_{44}} \left[ C_{44} \left( \frac{\alpha_2}{\alpha_1} T_1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} T_2 \right) + C_{33} (T_1 - T_2) \right] \quad (1.14)$$

$$D = (D_1 + D_2 + D_3 + D_4) \rho C_R^2 \quad (1.15)$$

$$D_1 = \frac{C_{13} C_{44}}{4} \left( \frac{\Delta \alpha_2^2}{\alpha_2} - \frac{\Delta \alpha_1^2}{\alpha_1} \right) \quad (1.15a)$$

$$D_2 = \frac{C_{33} C_{44}^2}{(C_{13} + C_{44})} \left[ \frac{\Delta \alpha_2^2}{4 \alpha_2} T_1 - \frac{\Delta \alpha_2^2}{4 \alpha_1} T_2 + \alpha_2 \left( \frac{\Delta \alpha_1^2}{2} - \frac{1}{C_{44}} \right) - \alpha_1 \left( \frac{\Delta \alpha_2^2}{2} - \frac{1}{C_{44}} \right) \right] \quad (1.15b)$$

$$D_3 = \frac{C_{13} C_{44}^2}{(C_{13} + C_{44})} \left[ \frac{\Delta \alpha_1^2}{4 \alpha_1^3} (\alpha_1^2 - \gamma_1^2) - \frac{\Delta \alpha_2^2}{4 \alpha_2^3} (\alpha_2^2 - \gamma_1^2) + \frac{k_{//}^2}{C_{44}} \left( \frac{1}{\alpha_2} - \frac{1}{\alpha_1} \right) \right] \quad (1.15c)$$

$$D_4 = \frac{C_{33} C_{44}^3}{(C_{13} + C_{44})^2} \left[ \Delta \alpha_1^2 \left( \frac{1}{4 \alpha_1} - \frac{1}{2 \alpha_2} \right) T_2 - \Delta \alpha_2^2 \left( \frac{1}{4 \alpha_2} - \frac{1}{2 \alpha_1} \right) T_1 - \frac{\Delta \alpha_1^2}{4} \frac{\gamma_1^2}{\alpha_1^3} T_2 + \frac{\Delta \alpha_2^2}{4} \frac{\gamma_1^2}{\alpha_2^3} T_1 + \frac{1}{C_{44}} \left( \frac{\alpha_1^2}{\alpha_2} - \frac{\alpha_2^2}{\alpha_1} + \alpha_2 - \alpha_1 + \frac{2 \gamma_1^2}{\alpha_2} - \frac{2 \gamma_1^2}{\alpha_1} \right) \right] \quad (1.15d)$$

Dans ces expressions, on a

$$T_1 = \alpha_1^2 + \gamma_1^2, \quad T_2 = \alpha_2^2 + \gamma_1^2 \quad (1.16)$$

$$\Delta\alpha_{1,2}^2 = \frac{C_{33} + C_{44}}{C_{33}C_{44}} + \frac{x(C_{33} + C_{44}) - 2(C_{44} + C_{11} - 2\rho C_R^2)}{C_{33}C_{44}(\alpha_1^2 - \alpha_2^2)} \quad (1.17)$$

et les quantités  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\gamma_1$  et  $x$  doivent être prises pour  $\omega = C_R k_{//}$ .

On peut constater que, en passant à la limite des milieux isotropes ( $C_{12} = C_{13}$ ,  $C_{11} = C_{33} = C_{12} + 2C_{44}$  pour le substrat, et des relations similaires pour la couche déposée) on retrouve le résultat [ 7 ] :

$$\gamma = \frac{(4C'_{44}/C_{11})(C'_{11} - C'_{44})\beta_t - \rho' C_R^2(\beta_t + \beta_1)}{2C_{44} \left[ 1 + \beta_t^2 - \beta_t \beta_1 \left( \frac{1}{\beta_1^2} + \frac{1}{C'_{11}/C_{44} - 1 + \beta_t^2} \right) \right]} \quad (1.18)$$

avec

$$\beta_t^2 = 1 - \frac{C_R^2}{C_t^2} \quad \beta_1 = 1 - \frac{C_R^2}{C_1^2} \quad (1.19)$$

où  $C_t$  et  $C_1$  sont les vitesses acoustiques transverse et longitudinale.

La relation de dispersion pour le mode transverse (onde de Love) se déduit de l'Eq. (1.10). A la condition que  $C_t > C'_t$ , où

$$C_t = \left( \frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{et} \quad C'_t = \left( \frac{C'_{11} - C'_{12}}{2\rho'} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.20)$$

cette équation admet comme solution

$$\omega^2 = C_t^2 k_{//}^2 (1 - \eta h^2 k_{//}^2) + o(h^2 k_{//}^2) \quad (1.21)$$

avec

$$\eta = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} \left( \frac{C'_{11} - C'_{12}}{C_{11} - C_{12}} - \frac{\rho'}{\rho} \right)^2 \quad (1.22)$$

Pour les matériaux isotropes,  $\eta$  devient  $\eta = \left( \frac{C'_{44}}{C_{44}} - \frac{\rho'}{\rho} \right)^2$ .

I - 3b Cristal cubique avec surface (001) : directions de propagation [100] et [110].

Les expressions des matrices  $\ell^V$ ,  $\ell_S^C$  pour les milieux cubiques avec surface (001) sont également données dans l'appendice (A.1.2). On constate qu'en général, le découplage entre les modes sagittaux et les modes transverses n'est pas possible sauf pour deux directions particulières qui sont la direction [100] ( $\leftrightarrow \theta = 0$ , où  $\theta$  est l'angle que fait la direction de propagation de l'onde avec l'axe [100]) et la direction [110] ( $\leftrightarrow \theta = \frac{\pi}{4}$ ). Pour ces deux directions donc, il est encore possible d'obtenir des formules de dispersion sous forme explicite dans le cas d'une couche adsorbée mince. On constate en fait que les matrices  $\ell^V$  et  $\ell_S^C$  pour  $\theta = 0$  ou  $\theta = \frac{\pi}{4}$  sont formellement semblables aux matrices  $\ell^V$  et  $\ell_S^C$  du cas hexagonal, à un changement adéquat près de certaines constantes élastiques. Il en sera par conséquent de même pour les formules de dispersion correspondantes et nous pouvons nous contenter d'indiquer uniquement les substitutions (des constantes élastiques) à faire dans les formules (1.12 - 1.17) et (1.20 - 1.22) :

- direction [100]

- . mode sagittal : il faut substituer  $C_{12}$  à  $C_{13}$  et  $C_{11}$  à  $C_{33}$  .
- . mode transverse : il faut substituer  $C_{44}$  à  $\frac{C_{11} - C_{12}}{2}$  .

- direction [110]

- . mode sagittal : il faut substituer  $\frac{2C_{44} + C_{12} + C_{11}}{2}$  à  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  à  $C_{13}$  et  $C_{11}$  à  $C_{33}$  .
- . mode transverse : il n'y a rien à changer.

I - 4 MODES DE SURFACE EN PRESENCE D'UNE COUCHE DEPOSEE D'EPaisseur ARBITRAIRE.

Le problème est celui de la dispersion des différents modes qui apparaissent avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche déposée. Ce problème peut être résolu numériquement par la recherche des

pôles de la fonction de Green du système. Il peut aussi être résolu à partir des équations du mouvement et cela a déjà été fait pour les matériaux isotropes et les matériaux cubiques dans des directions de haute symétrie [5,10]. Nous allons nous intéresser ici à la surface (0001) des cristaux hexagonaux et au cas de la direction quelconque pour la surface (001) des cristaux cubiques.

#### I - 4a Cristaux hexagonaux avec surface (0001)

Pour les cristaux hexagonaux, nous allons examiner quelques exemples qui donneront les différents cas possibles d'association substrat-couche adsorbée. Les modes sagittaux et les modes transverses étant découplés, nous les traiterons séparément. Nous noterons  $C_m$  et  $\tilde{C}_m$  les vitesses des bas de bandes de volume pour la polarisation transverse et pour la polarisation sagittale respectivement :

$\tilde{C}_m = \sqrt{(C_{11} - C_{12})/2\rho}$  et  $C_m = \sqrt{C_{44}/\rho}$  pour les matériaux donnés à la table 1.1 (pour d'autres matériaux,  $C_m$  peut avoir une valeur différente de  $\sqrt{C_{44}/\rho}$ ). Cela tient au fait que l'onde de volume qui possède la fréquence la plus basse n'est pas forcément l'une des deux ondes de volume transversales de direction de propagation parallèle au plan de la surface. Cependant, pour les cristaux hexagonaux, ces cas sont rares et même alors,  $C_m$  reste très proche de  $\sqrt{C_{44}/\rho}$  (e.g. Be et Zn, cf. [12]). Lorsque nous traiterons les cristaux cubiques avec surface (001), nous donnerons un exemple de matériau pour lequel la vitesse de bas de bande de volume peut, dans certaines directions de  $\vec{k}_{//}$  fixées, être significativement inférieure à la plus basse des vitesses des deux ondes de volumes transverses correspondantes.)  $C_R$  sera la vitesse de l'onde de Rayleigh (polarisation sagittale). Nous noterons donc ainsi ces vitesses caractéristiques du substrat. Pour les vitesses caractéristiques de la couche, nous reprendrons les mêmes notations indicées prime :  $\tilde{C}'_m$ ,  $C'_m$  et  $C'_R$ . Nous noterons enfin  $C_s$  la vitesse de l'onde de Stoneley qui est une onde de polarisation sagittale qui existe à certaines interfaces entre deux cristaux semi-infinis [12].

Faisons ici une remarque préventive générale avant de commenter les différents exemples choisis. Prenons un substrat tel que l'on ait  $\tilde{C}_m < C_m$ . Si l'onde de Rayleigh qui est pourtant de polarisation sagittale, est telle que sa vitesse soit supérieure à  $C_m$ , elle ne sera alors

TABLE 1.1

Cristal	$C_{11}$	$C_{33}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{44}$	$\rho$ en $\text{g.cm}^{-3}$	$C_m$	$C_R$	$\tilde{C}_m$
	en $10^{10} \text{ N.m}^{-2}$						en $\text{km.s}^{-1}$		
Ti	16,24	18,07	9,20	6,90	4,67	4,506	3,22	3,015	2,79
CdS	8,565	9,36	5,32	4,63	1,49	4,824	1,76	1,701	1,83
Y	7,79	7,69	2,85	2,10	2,431	4,45	2,34	2,19	2,36
Zr	14,34	16,48	7,26	6,53	3,20	6,50	2,22	2,13	2,33
Mg	5,97	6,17	2,62	2,17	1,64	1,71	3,10	2,92	3,13
Sc	9,93	10,96	4,57	2,94	2,77	2,99	3,04	2,9	2,99
Co	30,7	35,81	18,5	10,3	7,53	8,71	2,94	2,83	2,65

Les  $C_{ij}$  et  $\rho$  sont tirés de la référence [7].

en réalité qu'une résonance de volume (un "pseudo mode de surface" [5] ) car, en fait, dans le cadre d'un modèle atomique, les différentes polarisations ne sont pas découplées et ceci place le mode de Rayleigh au dessus de la fréquence minimum des phonons de volume. Un exemple d'une telle situation est donné à la figure 1.1 : les modes de Rayleigh dus à la couche de Cds adsorbée sur du Ti ne sont en fait que des pseudo ondes de surface sur certaines régions de l'axe des  $hk_{//}$  (et en particulier pour  $h = 0$ ). Le même raisonnement peut s'appliquer si  $C_m < \tilde{C}_m$ , pour les ondes de surface transverses lorsqu'elles existent (cf. plus bas pour la discussion de leur existence).

Discutons maintenant, dans le cadre de la limite élastique, la dispersion des ondes de surface pour chaque polarisation en commençant par les modes sagittaux (fig. 1.1 - 1.4). Ceci sera fait principalement au vu des deux points suivants : (i) les valeurs relatives de  $C_m$  et  $C'_m$  et (ii) l'existence éventuelle d'une onde de Stoneley.

Pour les associations (Ti, Cds), représentées en fig. 1.1, et (Y, Zr), fig. 1.2, il n'y a pas d'onde de Stoneley. En  $hk_{//} = 0$ , la vitesse du premier mode de Rayleigh est exactement  $C_R$ , i.e. la vitesse de l'onde de Rayleigh du substrat. Pour les configurations Cds/Ti, Y/Zr et Zr/Y, pour lesquelles on a  $C'_R < C_m$ , cette vitesse tend vers  $C'_R$  (la vitesse de l'onde de Rayleigh de l'adsorbat) pour les grandes valeurs de  $hk_{//}$ . Pour la configuration Ti/Cds qui donne  $C_m < C'_R$ , le premier mode de Rayleigh rentre alors, pour  $hk_{//} \approx 0,6$ , dans la bande de volume du substrat, et, ce faisant, cesse d'être un mode de surface pour devenir ce que l'on pourrait appeler une résonance de volume [5]. Lorsque  $C'_m < C_m$ , comme pour Cds/Ti ou Zr/Y, une infinité de modes de Rayleigh d'ordre supérieur apparaissent avec l'augmentation de  $hk_{//}$  et leur vitesse tend progressivement vers  $C'_m$  pour  $hk_{//} \rightarrow \infty$ . Dans le cas contraire, illustré par Ti/Cds et Y/Zr où  $C'_m > C_m$ , il n'y a pas de modes additionnels de Rayleigh.

Pour les associations (W, Mg), fig. 1.3, et (Sc, Co), fig. 1.4, il existe une onde de Stoneley. Ainsi, pour  $hk_{//} \rightarrow \infty$ , la vitesse du premier mode de Rayleigh tend vers  $C'_R$  si  $C'_R < C'_S$  (e.g. W/Mg, Sc/Co et Co/Sc) ou vers  $C'_S$  si  $C'_S < C'_R$  (Mg/W). Sinon l'interprétation des courbes de dispersion pour ces différentes configurations possibles répond aux

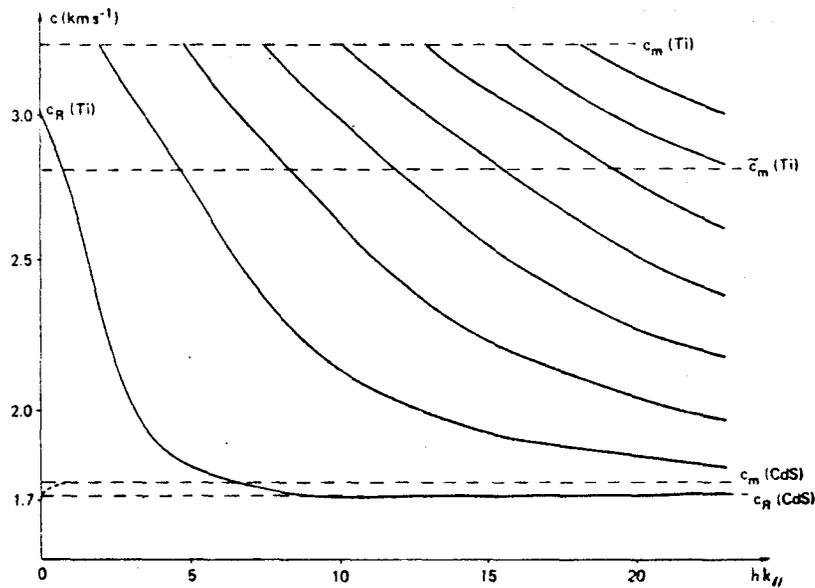


Figure 1.1. - Courbes de dispersions des modes de surfaces sagittaux pour les deux configurations possibles à partir du couple (Ti, CdS) : les courbes en trait plein se rapportent à une couche de CdS déposée sur un substrat de Ti tandis que les courbes en pointillées se rapportent au système Ti/CdS. Pour un cristal X,  $C_m(X)$  et  $\tilde{C}_m(X)$  sont les vitesses de bas de bandes de volume pour les polarisations sagittale et transverse respectivement ;  $C_R(X)$  est la vitesse de l'onde de Rayleigh. Les paramètres cristallins sont<sup>R</sup> donnés dans la table 1.1. (cf. page précédente).

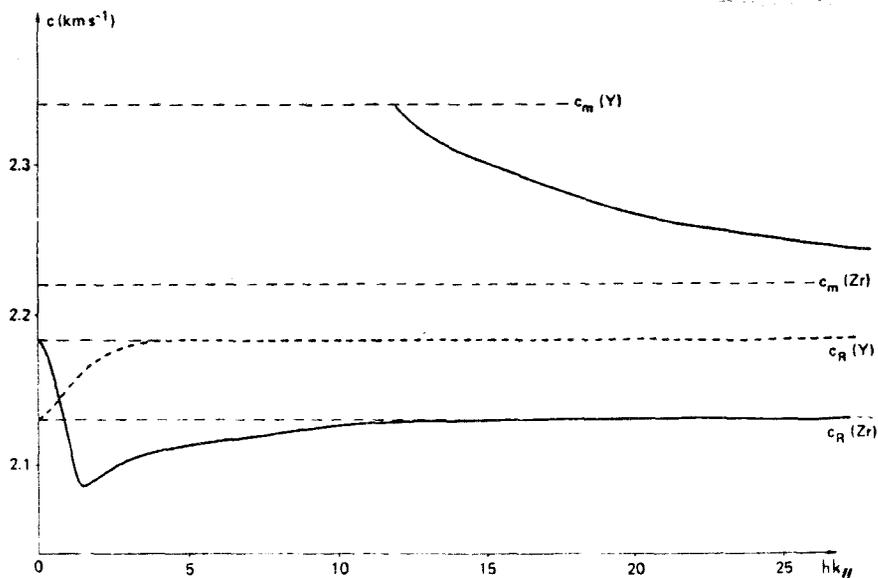


Figure 1.2. - même légende qu'en figure 1.1. pour le couple (Y, Zr).

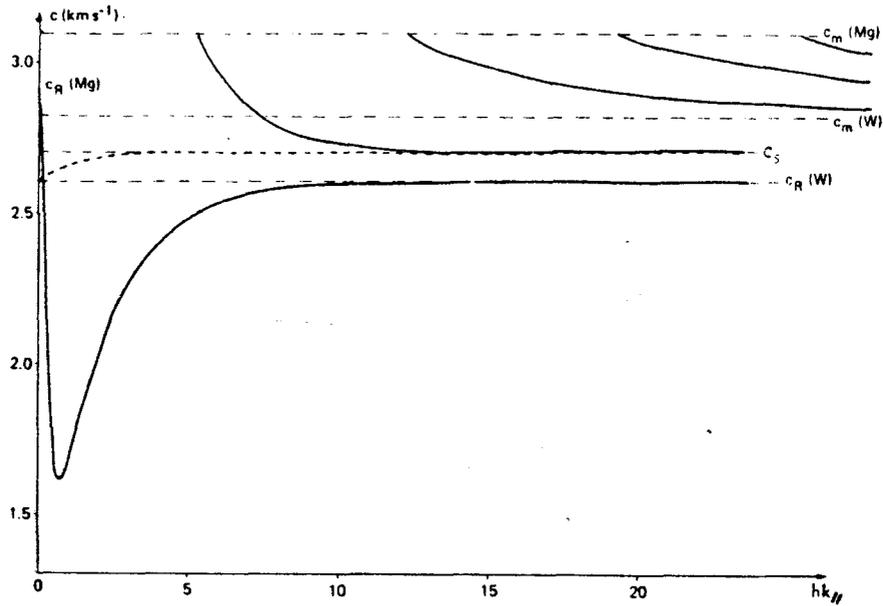


Figure 1.3. - même légende qu'en figure 1.1., pour le couple (Mg, W). Le tungstène est supposé être isotrope avec  $C_{11} = 51,20$ ,  $C_{12} = 20,60 \times 10 \text{ N.m}^2$  et  $\rho = 19,26 \text{ g.cm}^{-3}$ .  $C_S$  est la vitesse de l'onde de Stoneley qui existe à une interface entre deux cristaux semi-infinis de W et de Mg.

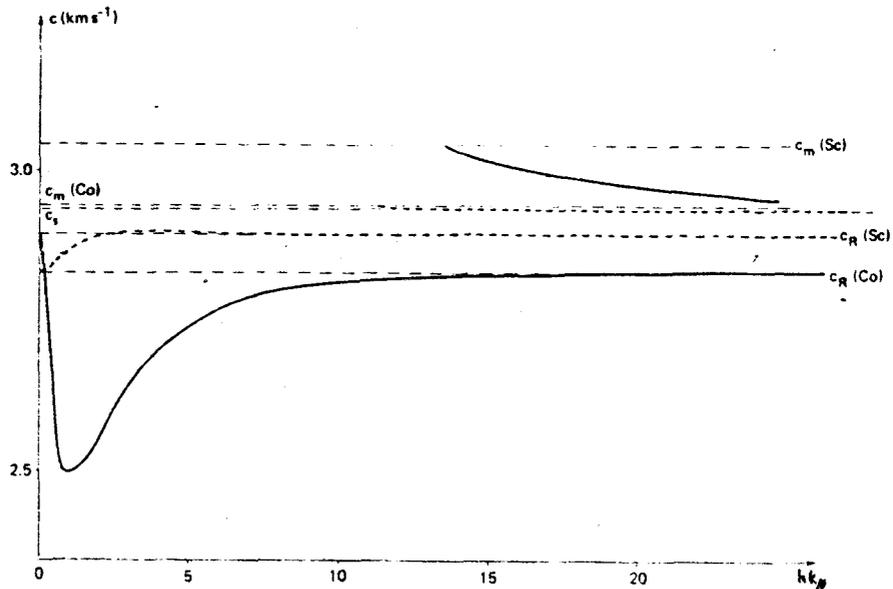


Figure 1.4. - même légende qu'en figure 1.3., pour le couple (Sc, Co)

mêmes critères que précédemment.

Finalement faisons remarquer que la variation du premier mode de Rayleigh en fonction de  $hk_{//}$  peut être monotone ou présenter un extremum.

La discussion des modes transverses peut être faite dans le même esprit que ci-dessus avec la simple différence qu'il n'existe pas d'onde d'interface pour cette polarisation. Pour  $C'_m > C_m$  il n'y a pas d'onde de surface alors que pour  $C'_m < C_m$  une infinité de modes de Love apparaissent avec l'augmentation de  $hk_{//}$ , dont la vitesse, partant de  $C_m$ , tend vers  $C'_m$  pour  $hk_{//} \rightarrow \infty$ .

#### I - 4b Cristaux cubiques

Pour les cristaux cubiques, le plan (001) est un plan de haute symétrie, mais il est anisotrope, si bien que la direction de propagation de l'onde de surface repérée par l'angle  $\theta$  qu'elle fait avec la direction [100] de ce plan, devient un paramètre dont il faut tenir compte. Il n'y a plus de découplage entre les modes sagittaux et les modes transverses sauf pour les directions de haute symétrie, telles que la direction [100] ( $\leftrightarrow \theta = 0^\circ$ ) et la direction [110] ( $\leftrightarrow \theta = 45^\circ$ ). Pour fixer les idées sur le rôle que peut jouer cette anisotropie au niveau de la dépendance en  $\theta$  de la propagation d'un mode de surface, nous allons commenter la fig. 1.5 qui donne les vitesses caractéristiques de la surface (001) du Ga As, avec leur variation en fonction de  $\theta$ . Nous donnerons ensuite quelques exemples de dispersion des modes de surface due à l'ajout d'une couche superficielle d'épaisseur  $h$ .

Sur cette figure 1.5 (représentée page suivante),  $C_{t_2}$  et  $C_{t_1}$  indiquent les vitesses des deux ondes transverses de volume dont la direction de propagation est parallèle au plan (001).  $C_{t_2}$  correspond à une onde de polarisation verticale (selon  $\hat{x}_3$ ) et ne dépend pas de  $\theta$ , sa valeur est  $\sqrt{C_{44}/\rho}$ .  $C_{t_1}$  est de polarisation horizontale (i.e. dans le plan  $(\hat{x}_1, \hat{x}_2)$ ) et sa valeur dépend de  $\theta$  : pour  $\theta = 0$ ,  $C_{t_1}$  et  $C_{t_2}$

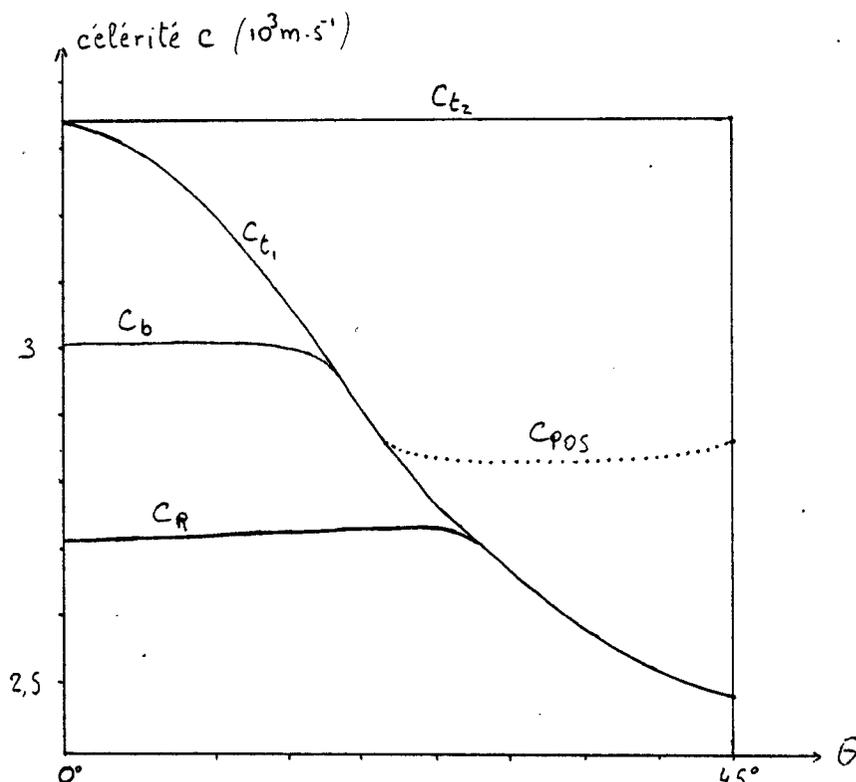


Figure 1.5. - Surface GaAs

sont dégénérées, alors que, pour  $\theta = 45^\circ$ ,  $C_{t_1} = \sqrt{C_{11} - C_{12}/2\rho}$ .  $C_{t_1}$  est donc supérieure ou inférieure à  $C_{t_2}$  selon que le paramètre d'anisotropie  $\eta = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$  est plus petit ou plus grand que 1. Dans le cas du Ga As,  $\eta$  vaut 1,86 (pour tracer la fig. 1.5, nous avons choisi les valeurs suivantes pour caractériser le Ga As :  $C_{11} = 118 \times 10 \text{ N}\cdot\text{m}^2$ ,  $C_{12} = 53,5 \times 10 \text{ N}\cdot\text{m}^2$ ,  $C_{44} = 59,4 \times 10 \text{ N}\cdot\text{m}^2$  et  $\rho = 5,317 \text{ gm}\cdot\text{cm}^{-3}$ ). On peut constater alors sur cette fig. 1.5 que, pour le Ga As notamment,  $C_b$ , qui représente la vitesse de bas de bande de volume, n'est pas égale à  $C_{t_1}$ , pour toutes les valeurs de  $\theta$  (cf. [10] p. 109 sqq et [12]).  $C_R$  est la vitesse de l'onde de Rayleigh : la polarisation de cette onde est sagittale pour  $\theta = 0$ , mais devient progressivement transverse avec l'augmentation de  $\theta$ . Cette onde de surface disparaît en fait pratiquement totalement à partir d'une certaine valeur de  $\theta$ , valeur à partir de laquelle  $C_R$  dégénère avec la vitesse de bas de bande de volume. Parallèlement, une pseudo onde de surface apparaît, de célérité  $C_{pos}$  (ligne en pointillé sur la fig. 1.5) et dont la polarisation devient peu à peu sagittale jusqu'à l'être totalement pour  $\theta = 45^\circ$ ; Il faut d'ailleurs remarquer que, en raison du découplage qui existe en limite élastique pour cette direction  $\theta = 45^\circ$ , nous avons affaire en cette direction même à une véritable onde de surface car la vitesse de bas de bande de volume pour la polarisation sagittale est alors  $C_{t_2}$  qui est supérieure

à  $C_{\text{pos}}$ . (Pour cette direction,  $C_{t_1}$  correspond à la vitesse minimale de la bande de volume pour la polarisation transversale). Précisons ce que signifie ici l'appellation pseudo onde de surface. Elle signifie que l'on a en réalité affaire à une résonance située dans la bande de volume. Cette résonance a un comportement similaire à celui d'une onde de surface en ce que son amplitude décroît exponentiellement avec la distance à la surface. Néanmoins, ce n'est pas un mode propre du système. On pourrait lui associer formellement un pseudo vecteur de propagation  $\vec{k}_{//}$  possédant une partie imaginaire non nulle. Cette dernière caractéristique, à savoir l'existence d'une partie imaginaire non nulle, signifiant que l'amplitude de cette pseudo onde s'atténue avec la propagation. Cela est dû à une perte progressive d'énergie par diffusion avec les ondes de volume. Néanmoins, ce dernier phénomène reste limité dans la mesure où le couplage entre cette POS (Pseudo Onde de Surface) et l'onde correspondant à  $C_{t_1}$  reste faible. Ainsi, faisons à nouveau remarquer que, à la limite  $\theta = 45^\circ$ , ces deux ondes sont totalement découplées, et que la POS devient dans cette direction une véritable onde de surface (cf. [5] et [13]). Cette pseudo onde de surface est d'ailleurs parfaitement détectable par diffusion Brillouin, et c'est un point que nous examinerons au paragraphe prochain. Notons finalement que, pour des matériaux ayant un  $\eta$  plus grand que 1,  $C_b = C_{t_2}$  et on n'a donc pas de pseudo onde de surface pour la surface (001)  $[1\bar{0}]$ .

Avec cette description de la fig. 1.5, nous disposons des éléments nécessaires pour analyser la dispersion des modes de surface due à la présence d'une couche déposée en surface. La dispersion de ces modes en fonction de  $hk_{//}$  est en fait tout à fait semblable à ce que nous avons rencontré avec les cristaux hexagonaux, hormis la dépendance en  $\theta$  : ainsi, pour une direction de propagation  $\theta$  fixée, le premier mode de Rayleigh partira de  $C_R(\theta)$  (ou  $C_{\text{POS}}(\theta)$ ) en  $h = 0$ , pour tendre vers  $C'_R(\theta)$  (ou  $C'_{\text{POS}}(\theta)$ ) en  $hk_{//} = \infty$ . Il sera un pseudo ou un vrai mode de surface selon qu'il se trouvera ou non au dessus de  $C_b(\theta)$ . Nous donnons en fig. 1.6 une illustration de ceci en prenant comme matériaux une couche de  $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  déposée sur du Ga As, en prenant  $x = 0,9$  (ce qui nous donne  $\rho' = 5,16 \text{ gm.cm}^{-3}$ ) et les constantes élastiques du  $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  égales à celles du Ga As.

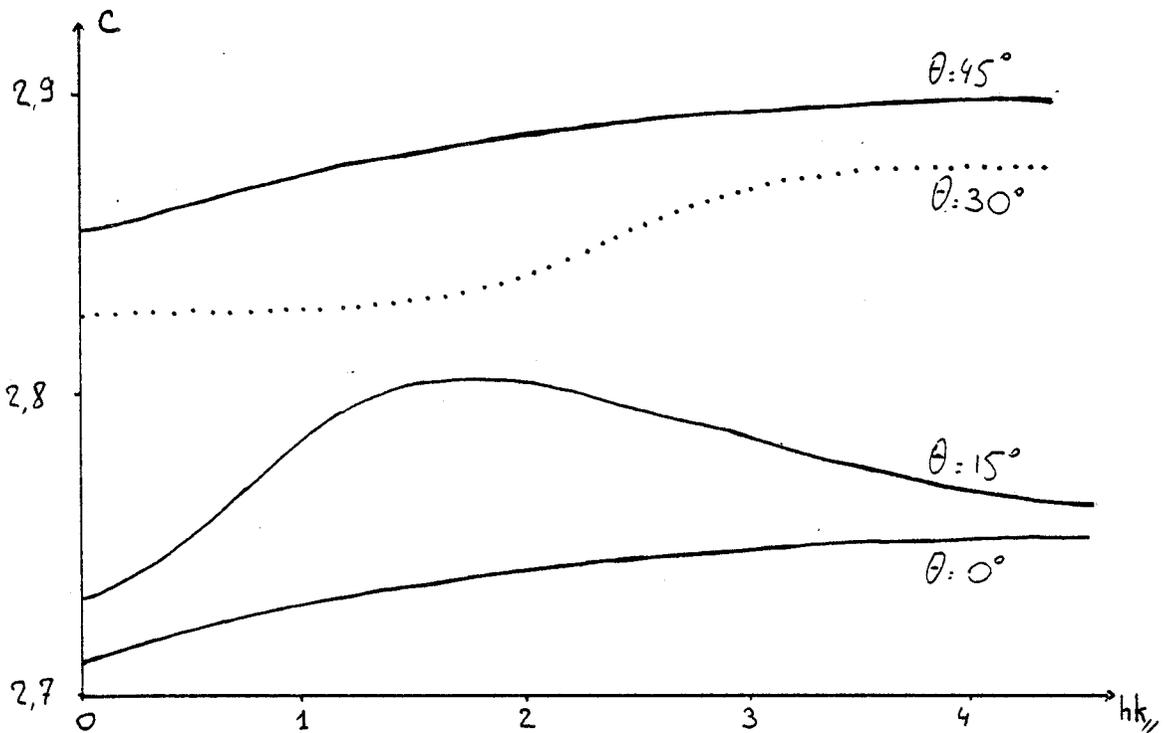


Figure 1.6. -  $Ga_{0.9}Al_{0.1}As/GaAs$

L'élément nouveau est dû à la dépendance en  $\theta$ . Ainsi par exemple, pour  $\theta = 0^\circ, 15^\circ$  ou  $45^\circ$ , nous avons clairement affaire à une onde de surface, alors que, pour  $\theta = 30^\circ$ , nous avons une POS. La situation sera un peu plus complexe pour une direction  $\theta$  avoisinant les  $25^\circ$ , ainsi que l'on peut le présumer en considérant la fig. 1.5 : il y aura des portions de l'axe  $hk_{//}$  où l'on aura une véritable onde de surface et d'autres où l'on aura une pseudo onde de surface.

De manière générale cependant, pour une direction de propagation fixée, les courbes de dispersion que l'on obtient pour les cristaux cubiques peuvent être interprétées à l'aide des mêmes critères que ceux que l'on avait utilisés pour interpréter les courbes relatives aux cristaux hexagonaux. Ainsi, sur la fig. 1.7, qui est analogue à la fig. 1.3, nous avons représenté la dispersion des modes de propagation de surface dans la direction  $\theta = 30^\circ$  pour une couche de tungstène ( $\eta = 1$ ).  $C_s$  est la vitesse de l'onde de Stoneley qui existe pour une interface W-Al.

(voir fig. 1.7 page suivante)

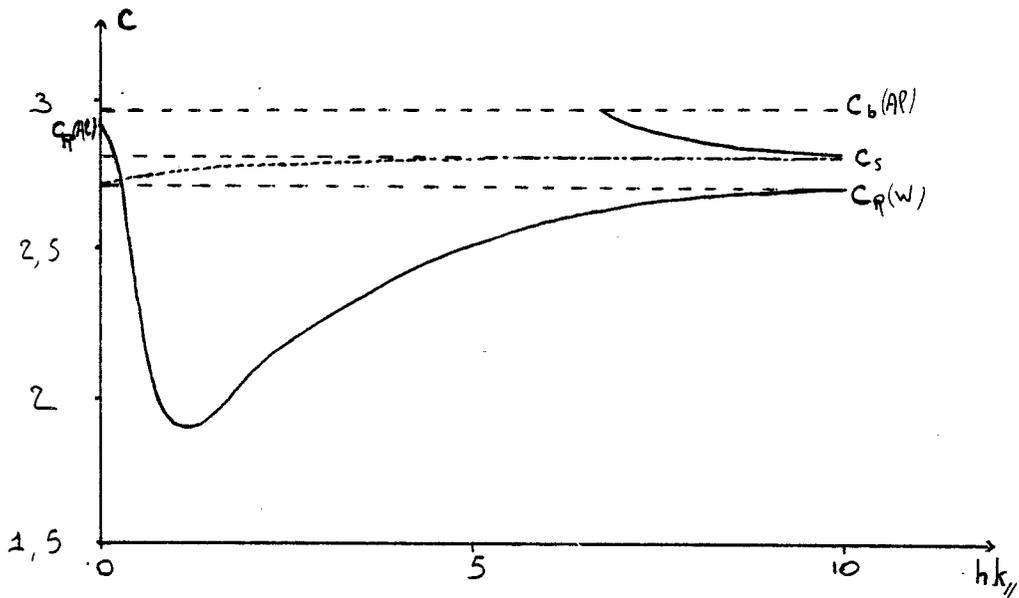


Figure 1.7. W/Al  $\theta = 30^\circ$

L'aluminium est caractérisé par  $C_{11} = 106,8 \times 10^{10} \text{ N.m}^2$ ,  
 $C_{12} = 60,7 \times 10^{10} \text{ N.m}^2$ ,  
 $C_{44} = 28,2 \times 10^{10} \text{ N.m}^2$ ,  
 $\rho = 2,733 \text{ gm.cm}^{-3}$

Le tungstène est caractérisé par  $C'_{11} = 523,3 \times 10^{10} \text{ N.m}^2$ ,  
 $C'_{12} = 204,5 \times 10^{10} \text{ N.m}^2$ ,  
 $C'_{44} = 160,7 \times 10^{10} \text{ N.m}^2$ ,  
 $\rho' = 19,317 \text{ gm.cm}^{-3}$

I - 5 DIFFUSION BRILLOUIN AVEC INFLUENCE D'UNE COUCHE MINCE DEPOSEE

La diffusion Brillouin est une méthode expérimentale qui permet d'obtenir le spectre de densité d'état locale de surface dans le domaine des phonons acoustiques. Ceci permet de détecter aussi bien les ondes de surface que les résonances telles que celle que nous avons qualifiée de pseudo onde de surface au paragraphe précédent. Une méthode théorique a été développée [15] qui permet, entre autres choses, de calculer le spectre de diffusion Brillouin d'une surface libre ou soumise à des contraintes. Cette méthode a déjà été appliquée au cas des surfaces libres des cristaux cubiques [13]. Nous allons indiquer ici, en rappelant le formalisme sur lequel elle est basée, comment cette méthode peut être appliquée au cas des surfaces recouvertes d'une couche déposée d'épaisseur  $h$  faible, et nous étudierons en application l'influence de  $h$  sur la contribution de l'effet de ripplons (cet effet que l'on pourrait peut-

être aussi essayer en français d'appeler effet de relief ou effet d'ondulation de surface, est dû à l'ondulation du relief de la surface) pour une couche mince de tungstène déposée sur de l'aluminium (nous avons choisi l'aluminium car ce dernier élément est tel que la contribution due à l'effet de ripplons représente quasiment la totalité de l'intensité de diffusion Brillouin. L'autre contribution est due à la lumière qui pénètre sur une certaine épaisseur de surface, est diffusée par les ondes de volume et est déformée lors de son double passage (allée et retour) dans cette épaisseur de surface qui est en régime de vibrations. Il faut donc tenir compte des coefficients élasto-optiques du matériau et cette contribution est nettement plus complexe à calculer. Cette contribution est néanmoins négligeable dans le cas des matériaux très opaques (e.g. les métaux) car, dans ce cas, la profondeur de pénétration de la lumière est quasi nulle.

Le formalisme utilisé [15] fait intervenir les projections de surface des fonctions de Green. On notera  $G$  la projection de surface d'une fonction de Green  $d$ , ce qui veut dire que  $G$  est égale à  $d$  prise en  $x_3 = x'_3 = 0$ . La connaissance de la fonction  $G$  associée à un substrat semi-infini donné permet de calculer de nombreuses caractéristiques physiques de la surface de ce substrat. Entre autres caractéristiques, elle permet d'obtenir le spectre de diffusion Brillouin de cette surface. Ainsi, pour ce qui est de la diffusion due à l'ondulation du relief de la surface (effet de ripplons), et si on se situe à une température suffisamment élevée (e.g. la température ambiante), la section différentielle de diffusion Brillouin est donnée par [14] :

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_r}\right) \propto -\frac{1}{\omega} \text{Im}G_{33} \quad (1.23)$$

Dans (1.23), nous avons omis les facteurs de proportionnalité qui ne présentent pas d'intérêt. L'écriture  $\text{Im}G_{33}$  signifie qu'il faut prendre la partie imaginaire de  $G_{33}$ . On voit donc qu'il nous faut pouvoir calculer la fonction  $G$  de notre substrat semi-infini. Or, on peut démontrer la chose suivante [15] : si on connaît la projection  $G^\circ$  de la fonction de Green de volume  $d^\circ$  d'un matériau donné, la projection  $(S)$  de la

fonction de Green de ce même matériau en milieu semi-infini avec une surface libre peut être alors obtenue sans passer par le calcul de  $d^{(s)}$ .  $G^{(s)}$  est donné par :

$$[G^{(s)}]^{-1} = -\mathcal{P}^{(-)} [G]^{-1}$$

avec 
$$\mathcal{P}^{(-)} = (\ell_s^c d^o)^{(-)} \quad (1.25)$$

Cette dernière notation, à savoir l'équation (1.24) est symbolique et nous allons simplement indiquer ici comment elle doit être calculée en renvoyant à [15] pour plus d'explications. Rappelons que  $\ell_s^c$  est une matrice dont les éléments sont des opérateurs différentiels pouvant ou non contenir des dérivations du premier ordre par rapport à  $x_3$  (cf. l'appendice A.1.2). Dans le calcul des éléments de  $(\ell_s^c d^o)^{(-)}$ , il y a alors lieu de distinguer entre deux types d'éléments : ceux dont le calcul ne fait pas intervenir de dérivées par rapport à  $x_3$ , et les autres. Pour les premiers, la notation de l'équation (1.25) ne demande que l'utilisation de la projection de surface telle qu'on l'a déjà définie (prendre  $x_3 = x'_3 = 0$ ). Pour les seconds, il faudra utiliser la formule suivante :

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_3} d_{\alpha\beta}^o\right)^{(\pm)} = \lim_{x'_3 \rightarrow \pm 0} \left[ \frac{\partial}{\partial x_3} d_{\alpha\beta}^o(x_3, x'_3) \right]_{x_3=0} \quad (1.26)$$

Si on utilise des transformées de Fourier, il faudra utiliser les formules suivantes :

$$G_{\alpha\beta}^o(\vec{k} // \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int e^{i\eta k_3} d_{\alpha\beta}^o(\vec{k} // \omega) dk_3 \quad (1.27a)$$

$$G_{\alpha\beta}^{o(\pm)}(\vec{k} // \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int e^{\mp i\eta k_3} i k_3 d_{\alpha\beta}^o(\vec{k} // \omega) dk_3 \quad (1.27b)$$

où  $d_{\alpha\beta}^o(\vec{k} // \omega)$  est définie par

$$d_{\alpha\beta}^0(\vec{x}, \vec{x}', t-t') = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i \vec{k}(\vec{x}-\vec{x}') - \omega(t-t')} d_{\alpha\beta}^0(\vec{k}, \omega) \quad (1.28)$$

avec  $\vec{k} = (k_{//}, 0, k_3)$ .

Dans (1.26) et (1.27b), nous avons explicité le sens mathématique de la notation utilisée en (1.25) pour le signe (+) et pour le signe (-). En (1.25), c'est le signe (-) qui est utilisé et cela tient au fait que nous avons choisi pour la localisation de notre substrat semi-infini le demi espace  $x_3 > 0$ . Si nous avons choisi l'autre demi espace, nous aurions eu à calculer  $\mathcal{F}^{(+)}$  au lieu de  $\mathcal{F}^{(-)}$ .

Dans le cas où la surface est perturbée et où il n'y a plus continuité des contraintes, la nouvelle fonction  $\mathcal{G}$  est donnée par (cf. [16])

$$\mathcal{G}^{-1} = -\mathcal{B}\mathcal{G}^{0-1} \quad (1.30)$$

avec

$$\mathcal{B} = \mathcal{F}^{(-)} + m^{(+)} \quad (1.31)$$

$m^{(+)}$  provient des contraintes supplémentaires imposées à la surface.  
 $m^{(+)}$  doit toujours être calculé avec le signe (+). La raison de ceci n'apparaît clairement que lorsque l'on considère comment les formules (1.24), (1.25), et (1.30), (1.31) sont obtenues (cf. [15] et [16]). Disons simplement ici que alors que  $\mathcal{F}^{(-)}$  provient de l'écriture de la continuité des contraintes entre deux milieux (définis l'un par  $x_3 \geq 0$ , l'autre par  $x_3 \leq 0$ ),  $m^{(+)}$  traduit une discontinuité qui n'a lieu qu'en surface  $x_3 = 0$ . C'est cette différence qui fait que l'on a toujours un signe (+) pour  $m^{(+)}$ , que le substrat semi-infini soit situé dans le demi espace supérieur ou inférieur [16].

Un exemple de situation physique où les formules (1.30) et (1.31) peuvent être appliquées, est précisément le cas des surfaces recouvertes d'une couche mince, dans la mesure où il a été montré que la présence de cette dernière pouvait être remplacée par l'écriture de contraintes effectives appliquées à la surface du substrat ([7] et voir l'Appendice

A.22.2). L'élément  $m^{(+)}$  est alors donné par

$$m^{(+)} = h(M'd^0)^{(+)} \quad (1.32)$$

Notons que, dans la mesure où aucun des éléments matriciels des  $M'$  que nous avons obtenus (pour les cristaux hexagonaux ou pour les cristaux cubiques, cf. l'Appendice) ne contient de dérivation par rapport à  $x_3$ , le membre de droite de l'équation (1.32) correspond en fait à  $hm'g^0$ .

Nous pouvons donc étudier l'influence d'une couche déposée d'épaisseur  $h$  faible (v.g. telle que  $hk_{//} \ll 1$ ) sur l'intensité de diffusion Brillouin due à l'effet de riplons par l'intermédiaire de la formule (1.23). Nous avons choisi comme exemple d'illustration une couche de tungstène déposée sur de l'aluminium car, comme nous l'avons déjà dit, pour l'aluminium, l'effet de riplon est responsable de pratiquement la totalité de l'intensité de la diffusion Brillouin.

La figure équivalente à la fig. (1.6) pour l'aluminium est la fig. (1.8):

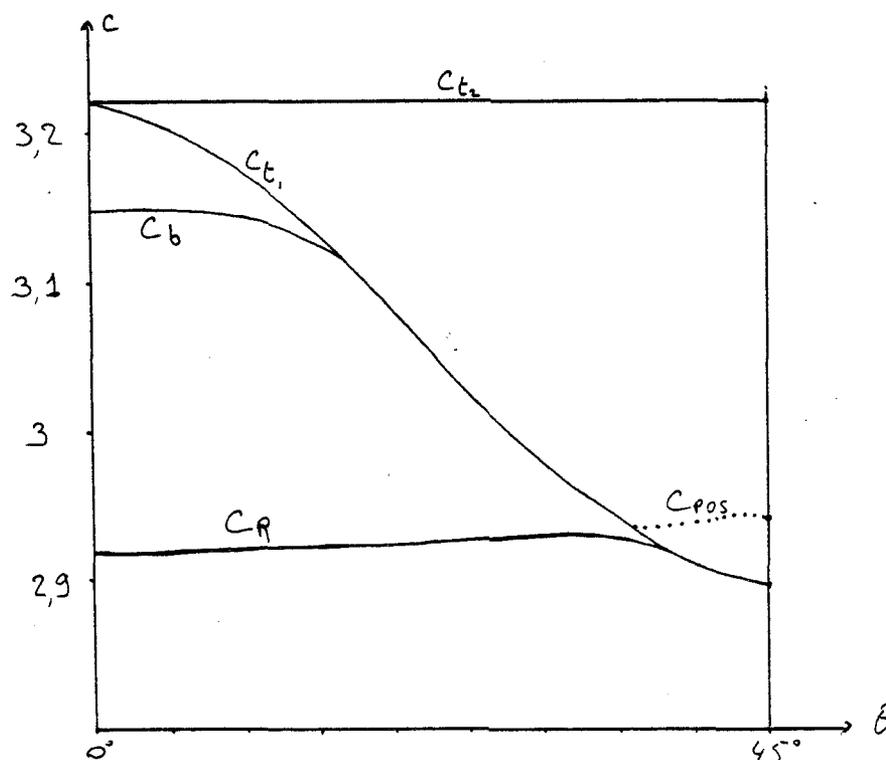


Figure 1.8. - Surface Al

On peut voir sur cette fig. (1.8) que l'angle pour lequel la pseudo onde de surface apparaît au détriment de l'onde de Rayleigh est d'environ  $35^\circ$ . Le tungstène, quant à lui, est quasiment isotrope et possède une onde de Rayleigh de vitesse  $C'_R$  quasi constante et égale à  $2,663 \times 10^3 \text{ m.s}^{-1}$ . Donnons pour deux valeurs différentes de  $\theta$  les courbes d'intensité  $\frac{1}{\omega} \text{Im} G_{33}$  en fonction de la vitesse  $C$  pour la surface libre de l'aluminium. Nous indiquerons ensuite l'influence d'une couche mince déposée sur l'allure de ces courbes.

Premièrement, pour  $\theta = 20^\circ$  : nous avons un pic d'intensité infinie pour  $C = C_R(20^\circ)$ .  $C_b$  et  $C_{t2}$  se manifestent par une montée abrupte de l'intensité qui redécroit immédiatement après (les figures 1.9a et 1.9b qui suivent ont une valeur schématique qui permet essentiellement de repérer les positions des maximums et de comparer les amplitudes de ces maximums).

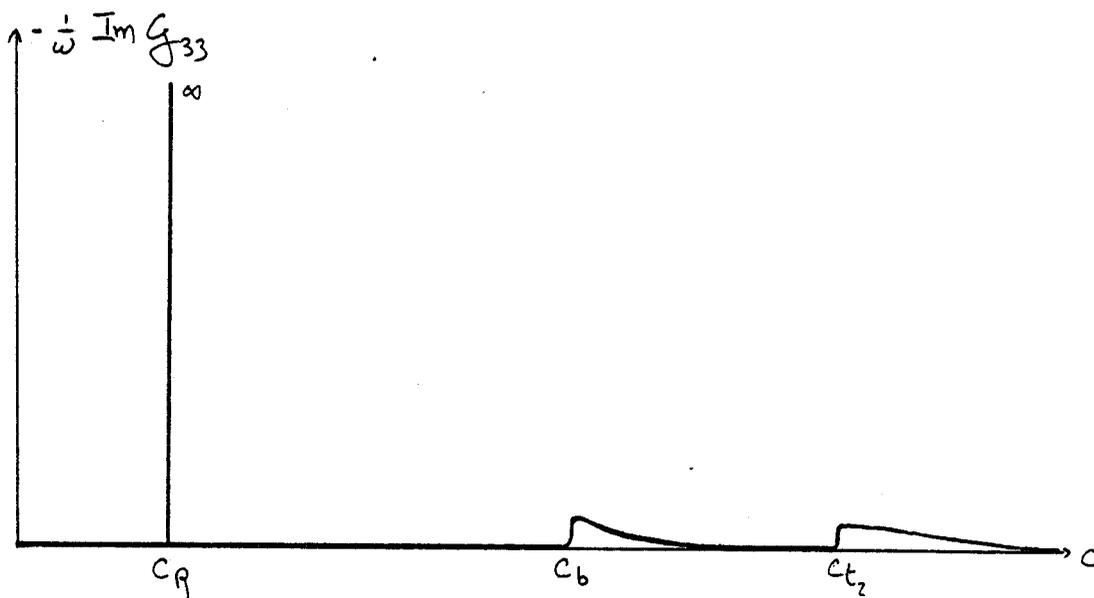


Fig. 1.9a

Deuxièmement, pour  $\theta = 40^\circ$  : nous avons un maximum bien prononcé pour  $C = C_{POS}(40^\circ)$  :

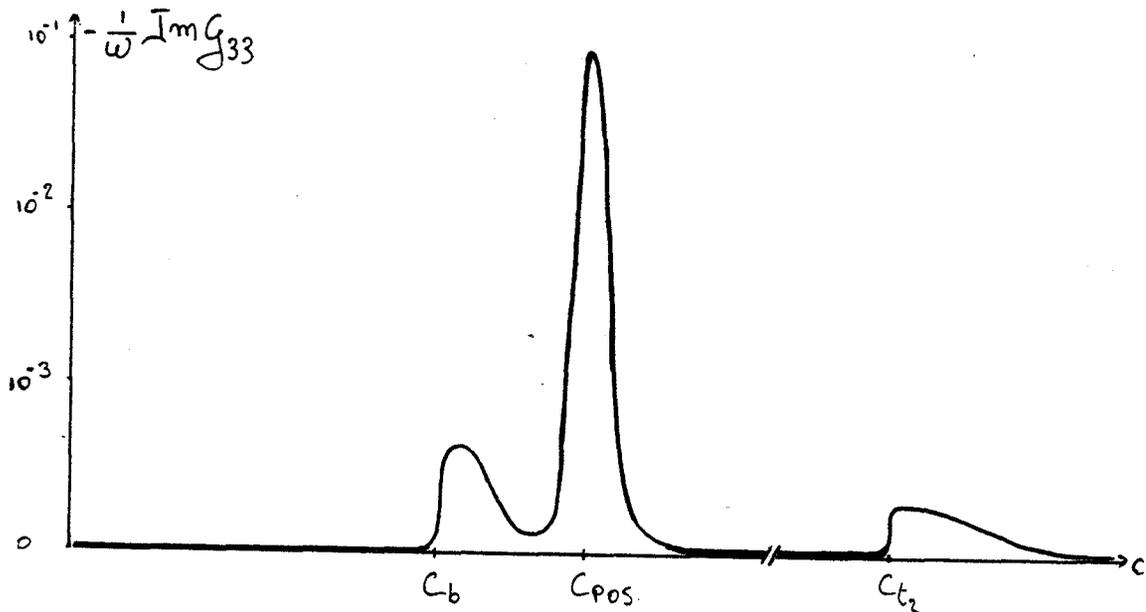


Figure 1.9b

L'influence d'une couche déposée de tungstène sur la courbe (1.9a) (direction des modes de propagations  $\theta = 20^\circ$ ) n'est que de faire se déplacer vers la gauche la position du pic qui correspond à l'onde de Rayleigh (le déplacement a lieu vers la gauche car  $C'_R$  est inférieur à  $C_R$ ). Ce déplacement est néanmoins très faible dans la limite de l'approximation choisie ( $\Delta C \approx \Delta h_{\parallel} \times \text{m.s}^{-1}$  pour  $\Delta h_{\parallel} \ll 10^{-2}$ ). Il devient même pratiquement nul lorsque  $\theta$  s'approche de  $35^\circ$  qui est la valeur angulaire à partir de laquelle l'onde de Rayleigh de l'aluminium disparaît quasiment.

Par contre, sur la courbe (1.9b), une mince couche déposée de tungstène va avoir pour effet, outre de faire baisser légèrement  $C_{\text{POS}}$ , de faire diminuer significativement l'intensité du maximum correspondant. Ainsi, même pour une variation de  $C_{\text{POS}}$  trop faible pour être détectée de manière directe (par localisation précise du maximum de la courbe), celle-ci peut néanmoins être connue grâce à la mesure de  $(-\frac{1}{\omega} \text{Im} G_{33})_{\text{Max}}$  et grâce à un tableau de correspondance que l'on peut obtenir numériquement. Ainsi, pour  $\theta = 40^\circ$ , nous avons le tableau suivant

$hk_{//} (x10^3)$	0	2	4	6
$\frac{\left(-\frac{1}{\omega} \operatorname{Im} C_{33}(hk_{//})\right)_{\text{Max}}}{\left(-\frac{1}{\omega} \operatorname{Im} C_{33}(hk_{//}=0)\right)_{\text{Max}}}$	1	0,767	0,631	0,53
$C_{\text{POS}}$ en $\text{m.s}^{-1}$	2943,7	2941,9	2940,1	2937,9

## CHAPITRE II

# INFLUENCE DES COUCHES SUPERFICIELLES SUR L'INTERACTION ELASTIQUE DE DEFAUTS ET LES DEPLACEMENTS QUADRATIQUES MOYENS DES ATOMES (APPLICATION AUX CRISTAUX HEXAGONAUX)

### II - 1 INTRODUCTION

L'étude de l'énergie d'interaction d'un défaut avec une surface ou de deux défauts entre eux en présence d'une surface peut être intéressante pour l'étude des phénomènes de ségrégation ou de diffusion. L'énergie élastique ne représente qu'une partie de ces énergies d'interaction qui incluent également d'autres contributions, électronique, dipolaire, etc..., selon la nature des matériaux et des défauts. C'est cette partie élastique que nous étudierons dans ce second chapitre en aboutissant à des résultats analytiques généraux en ce qui concerne la surface (0001) des cristaux hexagonaux (dont les cristaux isotropes, rappelons le, peuvent toujours être considérés comme des cas particuliers.)

Plusieurs travaux récents ont été consacrés à l'étude de l'interaction élastique d'un défaut ponctuel avec une surface libre [17-19] ou soumise à une contrainte [20] ou encore avec une interface [21]. Ont été de même étudiées l'énergie mutuelle d'interaction entre deux

défauts ponctuels au voisinage d'une surface [18-19] ou d'une interface [21-22] et, plus particulièrement encore, l'énergie élastique d'interaction entre deux adatoms [13-27]. Ainsi un défaut ponctuel à l'intérieur d'un milieu élastique isotrope est attiré vers la surface, son énergie variant selon une loi en  $x_3^{-3}$  où  $x_3$  est la distance du défaut à la surface [17-19]. En présence d'une interface [21], la loi en  $x_3^{-3}$  reste valable, mais le défaut peut être attiré vers l'interface ou repoussé par elle. D'autre part, l'interaction mutuelle de deux défauts en présence d'une surface [18-19] ou d'une interface [21-22] peut être attractive ou répulsive selon la nature des défauts et leurs positions géométriques. L'énergie élastique d'interaction entre deux adatoms a été étudiée pour un substrat isotrope [18, 23, 24] et aussi pour un substrat de symétrie hexagonale [25] ou cubique [25, 26]. Elle suit une loi en  $R_{//}^{-3}$  où  $R_{//}$  est la distance entre les adatoms. Elle est isotrope pour un substrat isotrope, ou pour un substrat hexagonal avec une surface (0001) (cette dernière surface étant isotrope dans la limite élastique), mais elle est anisotrope lorsqu'il s'agit de la surface d'un cristal cubique.

L'influence d'une couche adsorbée mince sur l'énergie élastique de défauts situés dans le substrat a été récemment étudiée pour des milieux isotropes [23]. (L'hypothèse d'une couche de faible épaisseur  $h$  permet d'éliminer, dans un traitement en perturbation, la présence de la couche au profit de conditions aux limites effectives à la surface du substrat. Nous avons ainsi effectué des développements au premier ordre en  $h$  au niveau des conditions aux limites effectives et puis du calcul des énergies élastiques de défauts).

Nous nous proposons ici d'étudier l'énergie d'interaction d'un défaut avec la surface (0001) d'un cristal hexagonal ainsi que l'énergie mutuelle d'interaction entre deux défauts en présence d'une telle surface. Nous étudions également l'influence d'une couche mince déposée sur le substrat sur ces énergies.

Nous consacrons également un paragraphe à l'étude des déplacements carrés moyens des atomes.

Dans ce qui suit, toute grandeur physique P d'un cristal avec surface et couche adsorbée sera écrite sous la forme

$$P = P^O + P^S + P^a \quad (2.1)$$

où  $P^O$ ,  $P^S$  et  $P^a$  correspondent aux diverses contributions suivantes : la contribution de volume, la contribution due à la surface et la contribution additionnelle du premier ordre due à l'existence d'une couche mince déposée en surface. Dans ce chapitre, toutes ces contributions ont été calculées en utilisant la méthode des fonctions de Green et en utilisant une expression développée au premier ordre en  $hk_{//}$  pour la fonction de Green élastique indépendante du temps (et donc prise en  $\omega = 0$ ) du substrat recouvert d'une couche mince :  $d = d^O + d^S + hk_{//}d^a$ . Le calcul des éléments  $d^a$  est explicité dans l'Appendice (A1 et A2 et, plus spécialement A2.2.2).

## II - 2 INTERACTION ELASTIQUE D'UN DEFAUT AVEC UNE SURFACE ET SA COUCHE DEPOSEE

La formule rendant compte de l'énergie élastique d'interaction d'un défaut situé en  $\vec{x}$ , a été établie en [19]. On représente le champ des forces créées par un défaut ponctuel par les composantes

$$\rho F_{\alpha}(\vec{x}) = -A_{\alpha} \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \delta(\vec{x} - \vec{x}_O) \quad (2.2)$$

(modèle dipolaire de Leibfried [28]). Pour simplifier le modèle, on prend un défaut qui est isotrope parallèlement à la surface, ce qui se traduit par  $A_1 = A_2$  que l'on notera A. On notera également que  $A_3 = C$ . On obtient alors comme énergie d'interaction élastique du défaut avec la surface du substrat :

$$\begin{aligned} U^S(x_{O3}) = & - \frac{1}{x_{O3}^3} \frac{1}{8\pi} m_3 \left\{ A^2 \left[ \frac{A_{11}}{4\alpha_1^3} I_2(z_{D1}) + \frac{4A_{12}}{(\alpha_1 + \alpha_2)^3} I_2(z_{D12}) + \frac{A_{22}}{4\alpha_2^3} I_2(z_{D2}) \right] + \right. \\ & + AC \left[ \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)A_{12}}{4\alpha_1^2} I_2(z_{D1}) + \frac{8\alpha_1\alpha_2(\alpha_1 A_{22} + \alpha_2 A_{11})}{(\alpha_1 + \alpha_2)^4} I_2(z_{D12}) + \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)A_{12}}{4\alpha_2^2} I_2(z_{D2}) \right] + \\ & \left. + C^2 \left[ \frac{\alpha_2 A_{22}}{4} I_2(z_{D1}) + \frac{4\alpha_1^2 \alpha_2^2 A_{12}}{(\alpha_1 + \alpha_2)^3} I_2(z_{D12}) + \frac{\alpha_1 A_{11}}{4} I_2(z_{D2}) \right] \right\} \quad (2.3) \end{aligned}$$

où l'on a adopté comme notation

$$m_3 = \frac{1}{2(\alpha_1 + \alpha_2)(\alpha_1 - \alpha_2)^2 (C_{11}C_{33} - C_{13}^2)}, \quad \Gamma = \frac{C_{11} - C_{13}^2/C_{33}}{C_{11} - C_{13}^2/C_{33}} \quad (2.4)$$

$$A_{11} = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\alpha_1 C_{33}} (C_{13} + \alpha_1^2 C_{33})^2, \quad A_{22} = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\alpha_2 C_{33}} (C_{13} + \alpha_2^2 C_{33})^2 \quad (2.5)$$

$$A_{12} = -\frac{2}{C_{33}} (C_{13} + \alpha_1^2 C_{33})(C_{13} + \alpha_2^2 C_{33}) \quad (2.6)$$

$\alpha_1$  et  $\alpha_2$  étant définis par les équations (1.9) prises dans le cas statique, i.e. avec  $\omega = 0$ .

D'autre part, on a

$$I_n(Z) = \int_0^Z du u^n e^{-u} = n! - n! e^{-Z} \sum_{p=0}^n \frac{Z^p}{p!} \quad (2.7)$$

$$Z_{D1} = 2k_D \alpha_1 x_{O3}, \quad Z_{D2} = 2k_D \alpha_2 x_{O3} \quad \text{et} \quad Z_{D12} = k_D (\alpha_1 + \alpha_2) x_{O3} \quad (2.8)$$

$k_D$ , le vecteur de Debye, étant la valeur de coupure choisie pour le calcul des énergies d'interaction (cf. [19] p. 429) pour éviter que les expressions obtenues ne divergent pour  $x_{O3} \rightarrow 0$ . La valeur de  $k_D$  peut s'obtenir en écrivant que  $\pi k_D^2$  représente l'aire de la zone de Brillouin bidimensionnelle du plan (0001) du cristal ; alors  $k_D = (8\pi/a\sqrt{3})^{1/2}$  où  $a$  est le paramètre cristallin dans le plan (0001).

Pour la limite  $x_{O3} \rightarrow \infty$ , les expressions sont en fait indépendantes de  $k_D$  comme on va le constater.

Pour obtenir  $U^a(x_{O3})$ , la contribution d'interaction avec la couche adsorbée, il suffit de remplacer dans l'expression de  $U^s(x_{O3})$  les fonctions  $I_2(Z)$  par des fonctions  $I_3(Z)$  et de multiplier l'ensemble obtenu par  $-\frac{h}{x_{O3}} \Gamma$ .

Le calcul précédent, effectué en limite élastique, n'est en fait valable que pour  $x_{O3}$  au-delà de quelques plans atomiques de la surface. Si l'on considère alors que les  $Z_{D_\alpha}$  ( $\alpha = 1,2,12$ ) sont grands devant l'unité, on peut remplacer dans l'expression (2.4) les  $I_2(Z_{D_\alpha})$  par leur limite pour  $Z_{D_\alpha} \rightarrow \infty$ , soit 2. Alors, on obtient :

$$\begin{aligned}
 U^S(x_{O3} \rightarrow \infty) = & - \frac{1}{x_{O3}^3} \frac{1}{32\pi C_{11}(C_{11}C_{33} - C_{13}^2)} \left\{ A^2 \left( \frac{C_{13}^2}{C_{11}C_{44}} K + L \right) - \right. \\
 & - 2AC \left[ \frac{(C_{11}C_{33} - C_{13}^2)(C_{13} + C_{44})}{C_{44}} + L \sqrt{\frac{C_{11}}{C_{33}}} - \frac{16C_{11}C_{33}C_{44}^2}{K^2} (\sqrt{C_{11}C_{33}} - C_{13})^2 \right] + \\
 & \left. + C^2 C_{11} \left( \frac{K}{C_{44}} + \frac{L}{C_{33}} \right) \right\} \quad (2.9)
 \end{aligned}$$

où

$$K = (C_{11}C_{33} - C_{13}^2) + 2C_{44} (\sqrt{C_{11}C_{33}} - C_{13}) \quad (2.10a)$$

$$L = \frac{2C_{33}}{K} (C_{13} + C_{44})(C_{11}C_{33} - C_{13}^2) \left( 1 + \frac{4C_{44} \sqrt{C_{11}C_{33}}}{K} \right) \quad (2.10b)$$

et 
$$U^a(x_{O3} \rightarrow \infty) = - \frac{3h}{x_{O3}} \Gamma U^S(x_{O3} \rightarrow \infty) \quad (2.11)$$

La différence de nature de l'adsorbat par rapport au substrat intervient au travers du facteur  $\Gamma$  qui a été défini en (2.4). Signalons que la formule (2.11) ne s'applique réellement que pour des  $x_{O3}$  tels que

$$\frac{h}{(\alpha_1 + \alpha_2)x_{O3}} \ll 1.$$

Pour de telles valeurs de  $x_{O3}$ , la contribution de  $U^a$  est une correction par rapport à celle de  $U^S$ .

A titre d'illustration, nous avons étudié (fig. 2.1) ces énergies élastiques pour un défaut isotrope avec  $A = C = 0,25$  eV (cette valeur est simplement un ordre de grandeur raisonnable [19,23]), en

utilisant un substrat de Ti. La courbe (1) représente la variation de l'énergie d'interaction du défaut avec la surface propre en fonction de sa distance  $x_{O3}$  à la surface. Cette courbe est décrite à partir de l'expression (2.3) qui, rappelons-le, tient compte du vecteur d'onde de coupure  $k_D$ . La courbe (2) représente la forme asymptotique de cette même énergie qui se comporte en  $x_{O3}^{-3}$  (éq. 2.9). Enfin, nous étudions l'énergie d'interaction en présence d'une couche superficielle en additionnant les équations (2.9) et (2.11) et en portant en abscisse la distance  $x_{O3} + h$  du défaut à la surface libre du système. Les courbes (3) et (4) donnent respectivement ces énergies pour une couche de  $h = 3 \text{ \AA}$  de CdS ou de ZnO ; ces deux systèmes correspondent respectivement à  $\Gamma < 1$  et  $\Gamma > 1$ . En raison du domaine de validité limité de la loi asymptotique (2.11) nous avons uniquement représenté les courbes (3) et (4) loin de la couche adsorbée. Au voisinage de l'interface substrat-adsorbat, il est nécessaire de calculer l'énergie élastique du défaut en allant au-delà du développement au premier ordre en  $h$  que nous avons utilisé. Néanmoins, la formule (2.11) et les courbes (3) et (4) indiquent le sens de la modification apportée par l'adsorbat sur cette énergie.

Revenons au cas général et considérons d'abord le problème des cristaux semi-infinis, sans adsorbat. Nous avons montré pour un grand nombre de cristaux hexagonaux dont les paramètres sont donnés dans la référence [29] que l'expression (2.9) de l'énergie d'interaction est toujours négative. Ceci signifie que le défaut est toujours attiré vers la surface libre du cristal. Remarquons que, pour les milieux isotropes, cette propriété a déjà été démontrée de façon tout-à-fait générale (voir par exemple [19]).

La formule (2.9) peut en fait être déduite de la formule (2.11) : si on considère le cas où le matériau de la couche adsorbée est identique au matériau du substrat, on a  $\Gamma = 1$  et cela revient à faire un développement limité au premier ordre sur  $U^S(x_{O3} + h)$  puisque le système substrat avec couche adsorbée redevient identique au problème du substrat avec un déplacement de la surface de  $x_3 = 0$  en  $x_3 = -h$ .

De même que l'énergie  $U^S(x_{O3} \rightarrow \infty)$  est toujours négative, le terme  $U^A(x_{O3} \rightarrow \infty)$  est, d'après (2.11) toujours positif. Mais, en fait,

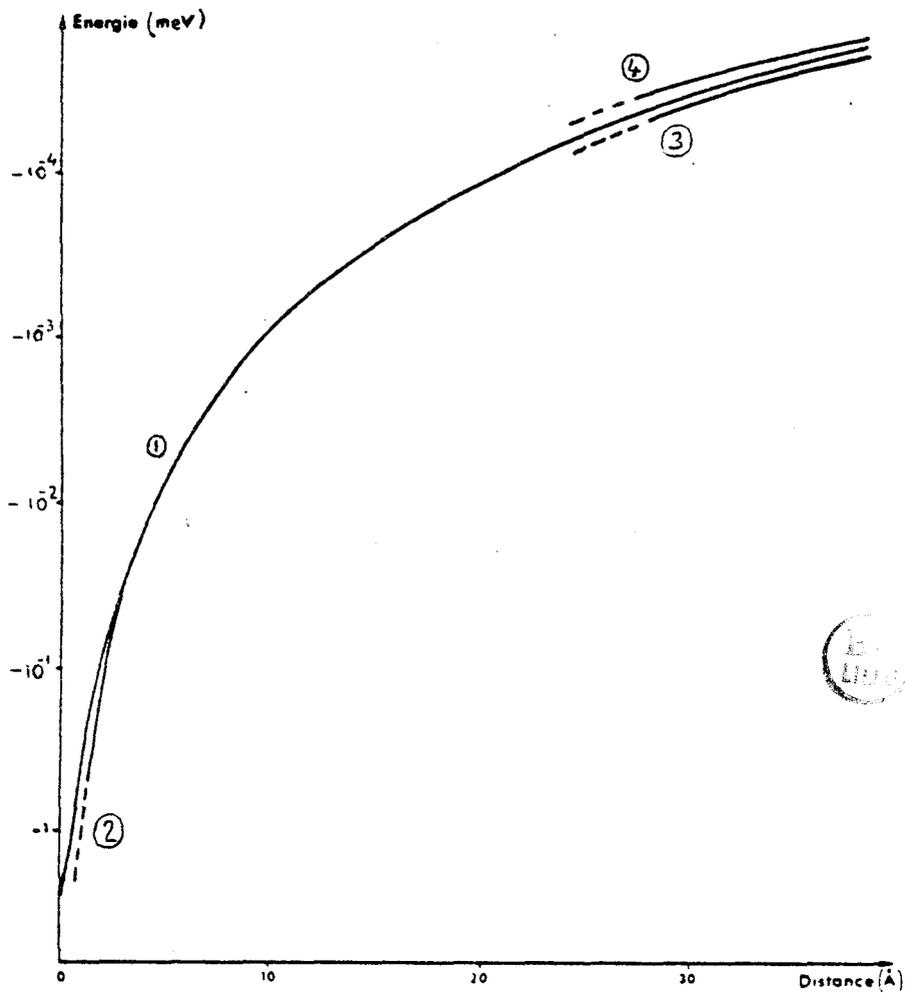


Fig. 2.) Energie élastique d'interaction entre un défaut isotrope.  $A = C = 0.25$  eV et la surface d'un cristal de Ti. avec ou sans adsorbat. La courbe (1) représente cette énergie pour une surface propre, en fonction de la distance  $x_{03}$  entre le défaut et la surface. Un vecteur d'onde de coupure  $k_D$  ( $k_D = 1.291 \text{ \AA}^{-1}$  pour Ti) est utilisé pour la zone de Brillouin du plan (0001). Pour  $k_D x_{03} \rightarrow \infty$ , on obtient la courbe (2) représentant la forme asymptotique de l'énergie qui se comporte en  $x_{03}^{-3}$  (eq. (2.9)). Les courbes (3) et (4) représentent respectivement les énergies élastiques lorsqu'une couche  $h = 3 \text{ \AA}$  de CdS ou de ZnO est présente à la surface: dans ce cas l'abscisse de la figure représente la distance  $x_{03} + h$  du défaut à la surface libre du système. Les constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$  et  $C_{44}$  utilisées sont respectivement pour Ti: 16.24, 18.07, 9.20, 6.90 et  $4.67 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$ ; pour CdS: 8.565, 9.36, 5.32, 4.62 et  $1.49 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$ ; et pour ZnO: 20.97, 21.09, 12.11, 10.51 et  $4.25 \times 10^{10} \text{ N/m}^2$ .

une couche adsorbée d'épaisseur  $h$  contribue, outre la modification de matériau qu'elle apporte, à augmenter de  $h$  la distance réelle du défaut à la surface libre. Il convient donc de distinguer dans (2.11) deux effets, le premier rendant simplement compte de ce changement de distance et que l'on pourra exprimer par l'expression (2.11) avec  $\Gamma = 1$ .

$$U_1^a(x_{O3} \rightarrow \infty) = - \frac{3h}{x_{O3}} U^s(x_{O3} \rightarrow \infty) \quad (2.12a)$$

Le deuxième effet, physiquement plus intéressant, est dû à la différence de nature entre l'adsorbat et le substrat. Il vaut :

$$U_2^a(x_{O3} \rightarrow \infty) = U^a(x_{O3} \rightarrow \infty) - U_1^a(x_{O3} \rightarrow \infty) = - \frac{3h}{x_{O3}} U^s(x_{O3} \rightarrow \infty) (\Gamma - 1) \quad (2.12b)$$

Son signe dépend donc de  $\Gamma - 1$ . Etant donné que  $-U^s(x_{O3} \rightarrow \infty)$  est toujours positif, il y a effet de répulsion si  $\Gamma$  est supérieur à 1 et il y a effet d'attraction dans le cas contraire. Dans le premier cas où l'on a

$$C_{11}' - \frac{C_{13}'^2}{C_{33}'} > C_{11} - \frac{C_{13}^2}{C_{33}},$$

on dira, conformément à un vocabulaire déjà consacré [17], que l'adsorbat est plus "dur" que le substrat. Dans le deuxième cas, on dira qu'il est plus "doux".

Signalons enfin que l'on peut, à partir des résultats précédents, obtenir les formules équivalentes valables pour des milieux isotropes. On peut ainsi par exemple vérifier que (2.9) redonne bien l'éq. (2.25) de [19] et (2.11) l'éq. (3.8) de [7].

### II - 3 INTERACTION ELASTIQUE ENTRE DEUX DEFAUTS EN PRESENCE D'UNE SURFACE ET DE SA COUCHE DEPOSEE

Si on prend deux défauts ponctuels définis, l'un par  $A_1 = A_2$  et  $A_3 = C$ , et l'autre par  $A_1' = A_2' = A'$  et  $A_3' = C'$ , et situés dans le

substrat en  $\vec{x}_1^{(1)}$  et en  $\vec{x}_2^{(2)}$ , la formule donnant l'énergie d'interaction élastique entre ces deux défauts, établie en [19], permet d'obtenir

$$U(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = U^o(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) + U^s(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) + U^a(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) \quad (2.13)$$

Le terme de volume est :

$$U_{12}^o(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \frac{1}{2\pi C_{33} C_{44} (\alpha_1^2 - \alpha_2^2)} x \cdot$$



$$x \left\{ AA' \left[ \frac{C_{44} - \alpha_1^2 C_{33}}{\alpha_1} Q_2 \left( \frac{\alpha_1 R_3}{r_1} \right) - \frac{C_{44} - \alpha_2^2 C_{33}}{\alpha_2} Q_2 \left( \frac{\alpha_2 R_3}{r_2} \right) \right] + \right.$$

$$+ (AC' + A'C) (C_{13} + C_{44}) \left[ \alpha_1 Q_2 \left( \frac{\alpha_1 R_3}{r_1} \right) - \alpha_2 Q_2 \left( \frac{\alpha_2 R_3}{r_2} \right) \right] -$$

$$\left. - CC' \left[ \alpha_1 (C_{11} - \alpha_1^2 C_{44}) Q_2 \left( \frac{\alpha_1 R_3}{r_1} \right) - \alpha_2 (C_{11} - \alpha_2^2 C_{44}) Q_2 \left( \frac{\alpha_2 R_3}{r_2} \right) \right] \right\} -$$

$$- \frac{C^2}{C_{33}} \delta(\vec{R}) \quad (2.14)$$

où  $\vec{R} = \vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}$  ;  $R_3 = |x_3^{(1)} - x_3^{(2)}|$  ;  $r_i = (R_{//}^2 + \alpha_i^2 R_3^2)^{1/2}$   $i = 1, 2$

(2.15)

et  $Q_2\left(\frac{u}{v}\right) = \frac{1}{3} P_2\left(\frac{u}{v}\right)$

(2.16)

$P_2$  étant le polynôme de Legendre du second ordre :  $P_2(z) = 1/2 (3z^2 - 1)$ .  
Le terme en  $\delta(\vec{R})$  indique simplement qu'il est impossible de superposer les deux défauts ponctuels. Moyennant cette restriction déjà évidente de par le choix du modèle élastique, on peut omettre l'écriture de ce terme en  $\delta(\vec{R})$ .

La contribution due à la surface  $x_3 = 0$  du substrat est

$$\begin{aligned}
 U_{12}^S(\vec{x}_1^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = & -\frac{1}{\pi} m_3 \quad x \\
 & \times \left\{ AA' \left[ A_{11} Q_2 \left( \frac{R_3^{(1)}}{r_1} \right) + A_{12} \left( Q_2 \left( \frac{R_3^{(12)}}{r_{12}} \right) + Q_2 \left( \frac{R_3^{(21)}}{r_{21}} \right) \right) + A_{22} Q_2 \left( \frac{R_3^{(2)}}{r_2} \right) \right] + \right. \\
 & + A'C \left[ \frac{\alpha_1(\alpha_1 + \alpha_2)}{2} A_{12} Q_2 \left( \frac{R_3^{(1)}}{r_1} \right) + 2 \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \left( \alpha_2 A_{11} Q_2 \left( \frac{R_3^{(12)}}{r_{12}} \right) + \alpha_1 A_{22} Q_2 \left( \frac{R_3^{(21)}}{r_{21}} \right) \right) + \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\alpha_2(\alpha_1 + \alpha_2)}{2} A_{12} Q_2 \left( \frac{R_3^{(2)}}{r_2} \right) \right] + \right. \\
 & + AC' \left[ \frac{\alpha_1(\alpha_1 + \alpha_2)}{2} A_{12} Q_2 \left( \frac{R_3^{(1)}}{r_1} \right) + 2 \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \left( \alpha_1 A_{22} Q_2 \left( \frac{R_3^{(12)}}{r_{12}} \right) + \alpha_2 A_{11} Q_2 \left( \frac{R_3^{(21)}}{r_{21}} \right) \right) + \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\alpha_2(\alpha_1 + \alpha_2)}{2} A_{12} Q_2 \left( \frac{R_3^{(2)}}{r_2} \right) \right] + \right. \\
 & \left. + CC' \left[ \alpha_1 \alpha_2 \alpha_1^2 A_{22} Q_2 \left( \frac{R_3^{(1)}}{r_1} \right) + \alpha_1 \alpha_2 A_{12} \left( Q_2 \left( \frac{R_3^{(12)}}{r_{12}} \right) + Q_2 \left( \frac{R_3^{(21)}}{r_{21}} \right) \right) + \alpha_2^2 A_{11} Q_2 \left( \frac{R_3^{(2)}}{r_2} \right) \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

$$\text{où} \quad R_3^{(1)} = \alpha_1(x_3^{(1)} + x_3^{(2)}), \quad R_3^{(2)} = \alpha_2(x_3^{(1)} + x_3^{(2)}) \tag{2.18}$$

$$R_3^{(12)} = \alpha_1 x_3^{(1)} + \alpha_2 x_3^{(2)}, \quad R_3^{(21)} = \alpha_2 x_3^{(1)} + \alpha_1 x_3^{(2)} \tag{2.19}$$

$$r_\alpha = \left[ R_{//}^2 + R_3^{(\alpha)2} \right]^{(1/2)}, \quad \alpha = 1, 2, 12, 21 \tag{2.20}$$

La contribution due à la couche adsorbée  $U^a(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$  peut alors être obtenue à partir de l'expression (2.14) : il suffit (i) de remplacer

les fonctions  $Q_2\left(\frac{u}{v}\right)$  par des fonctions  $Q_3\left(\frac{u}{v}\right)$

$$Q_3\left(\frac{u}{v}\right) = \frac{1}{4} P_3\left(\frac{u}{v}\right) \quad (2.21)$$

$P_3$  étant le polynôme de Legendre du troisième ordre

$$P_3(z) = \frac{1}{2} (5z^2 - 3z) \quad (2.22)$$

(ii) de multiplier l'ensemble obtenu par  $-3h\Gamma$ .

Signalons que, de même que (2.9) pouvait se déduire de (2.11),  $U_{12}^s$  peut aussi être déduite de  $U_{12}^a$  à l'aide du raisonnement déjà signalé alors. De même, pour avoir la contribution physique intéressante de  $U_{12}^a$ , il faut remplacer dans son expression le facteur  $\Gamma$  par  $\Gamma - 1$ .

Comparons maintenant les expressions que nous avons obtenues à celles relatives aux cristaux isotropes [19, 7].

(i) Pour un cristal hexagonal, la contribution  $U_{12}^o$  n'est pas nulle, même lorsque les deux défauts sont identiques et isotropes (c'est-à-dire  $A = A' = C = C'$  dans la formule (2.14)), contrairement à ce qui se passe pour un solide isotrope [19].

(ii) Pour un solide isotrope,  $U_{12}^s$  [19] et  $U_{12}^a$  [7] dépendent des facteurs géométriques  $\bar{R}_3 = x_3^{(1)} + x_3^{(2)}$  et  $r = (R_{//}^2 + R_3^2)^{1/2}$ ;  $R_3$  est la distance selon l'axe  $x_3$  entre un défaut et l'image de l'autre par rapport à la surface du substrat, définie par  $x_3 = 0$ ; par ailleurs,  $r$  est la distance entre le premier défaut et l'image du second. Dans le cas d'un cristal de symétrie hexagonale, il faut généraliser cette notion d'image car on a affaire à quatre termes géométriques différents  $R_3^{(1)}$ ,  $R_3^{(12)}$  et  $R_3^{(21)}$  (voir équations (2.18) - (2.19)) au lieu du seul facteur  $R_3$ .

Nous allons illustrer l'étude précédente en considérant le cas d'un cristal semi-infini de Ti contenant deux défauts isotropes identiques  $A = C = A' = C'$ . Pour différentes positions  $P_1$ ,  $P_2$  et  $P_3$  du premier défaut par rapport à la surface (fig. 2.2a), nous représentons les courbes I, II, III, qui séparent respectivement les régions où l'énergie

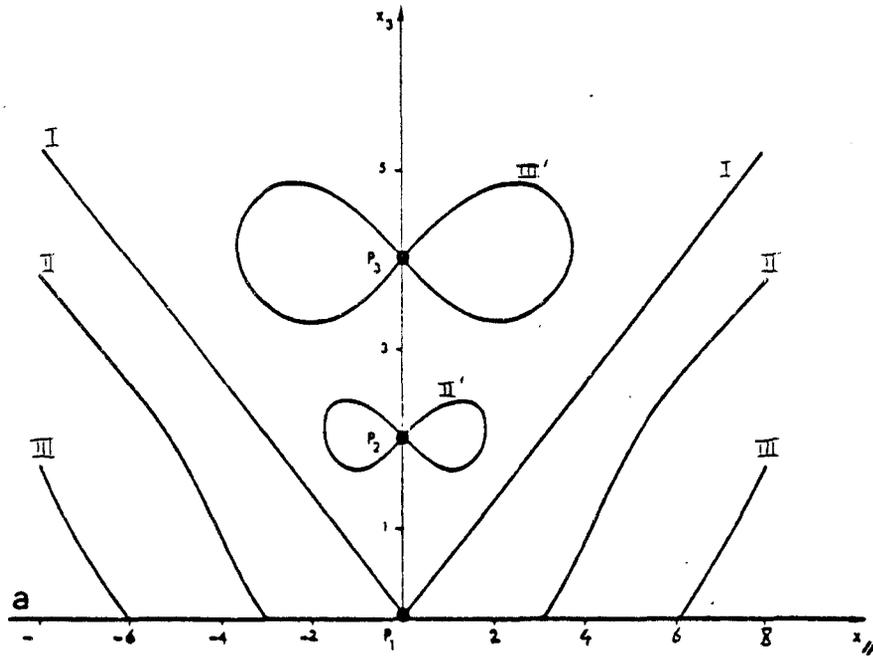


Fig. 2.2a

mutuelle d'interaction est positive de celles où elle est négative. Rappelons que cette énergie est donnée par la somme de deux contributions (éqs. (2.14) et (2.17)). Si le premier défaut est placé en  $P_2$  par exemple, l'énergie mutuelle est positive lorsque le second défaut est dans la région extérieure aux deux courbes II ; elle est négative lorsque le second défaut est entre ces deux courbes, excepté pour la région intérieure à la courbe II'. Remarquons cependant que le calcul élastique n'est valable que lorsque les deux défauts sont à quelques distances interatomiques ; il faut donc exclure de ce raisonnement une région de dimension atomique autour du premier défaut.

Pour comprendre le comportement précédent, nous pouvons considérer séparément les deux contributions à l'énergie d'interaction. La première (éq. (2.14)) correspond à deux défauts en volume (loin de la surface). Elle ne dépend que de la position relative des deux défauts. La figure (2.2b) représente pour une position donnée P du premier défaut deux droites qui séparent les régions correspondant aux énergies positive et négative. La seconde contribution à l'énergie (éq. (2.17)) est due à la présence de la surface. La figure (2.2c) donne, pour différentes positions  $P_1, P_2, P_3$  du premier défaut, les courbes I, II, III qui séparent les régions correspondant aux deux signes d'énergie. Dans chaque cas, l'énergie est positive

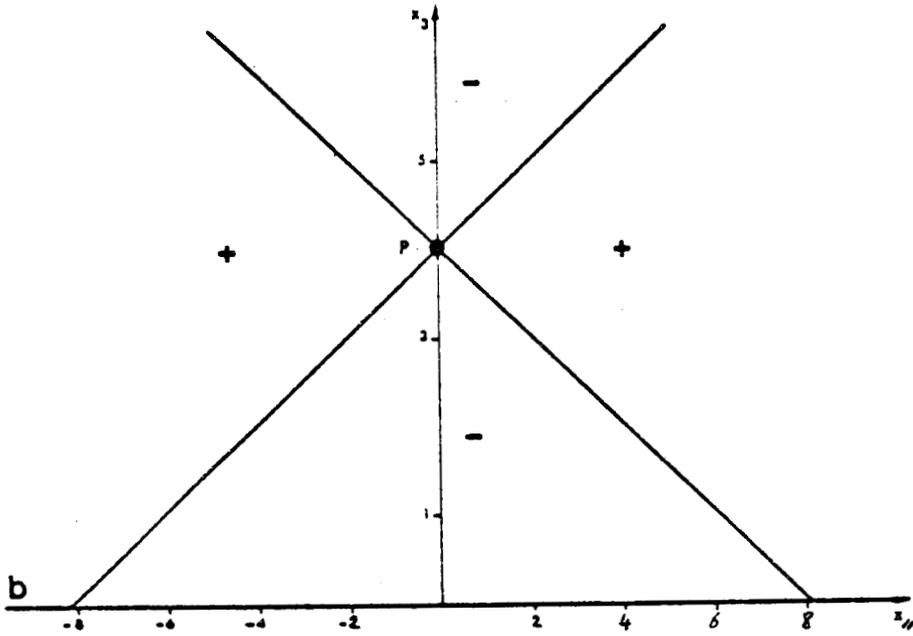


Fig. 2.2b

lorsque le second défaut est dans la région extérieure aux deux courbes et négative quand il est entre ces courbes. Remarquons que, si on considère un milieu isotrope qui est un cas particulier d'un cristal de symétrie hexagonale, les courbes de la figure (2.2c) deviennent [19] des droites d'équation  $x_3^{(1)} + x_3^{(2)} = \frac{\sqrt{2}}{2} R_{//}$ . En tenant compte à la fois des deux termes que nous venons de décrire, on arrive à la situation présentée (fig. 2.2a).

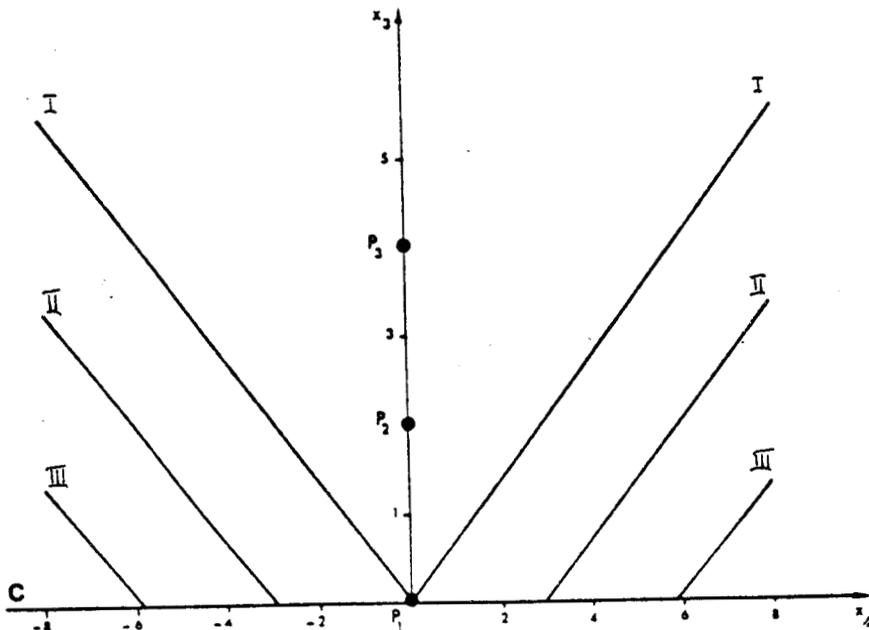


Fig. 2.2c

Figures 2.2. - Etude du signe de l'énergie mutuelle d'interaction entre deux défauts isotropes ( $A = C = A' = C'$ ). L'unité des coordonnées ( $x_{//}, x_3$ ) est arbitraire car seul leur rapport est important. Voir le texte pour le commentaire de ces figures 2.2.

Enfin, un cas particulier intéressant est celui où les deux défauts sont à la surface d'un cristal hexagonal semi-infini. L'énergie d'interaction mutuelle entre ces deux défauts sera la somme de  $U_{12}^0$  et de  $U_{12}^s$  que nous avons à considérer pour  $x_3^{(1)} = x_3^{(2)} = 0$ .

Nous obtenons alors :

$$U(\vec{x}_{//}^{(1)} - \vec{x}_{//}^{(2)}) = \frac{C_{33} AA' + \frac{C_{13}^2}{C_{33}} CC' - C_{13} (AC' + A'C) \cdot K}{2\pi R_{//}^3 \sqrt{C_{33} C_{44}} (C_{11} C_{33} - C_{13}^2)^2} \quad (2.23)$$

où K est défini en (2.10a).

Le cas particulier de cette expression, où le champ de force produit par les deux défauts est parallèle à la surface (c'est-à-dire  $C = C' = 0$ , mais  $A$  et  $A' \neq 0$ ) (voir éq. (2.2)), correspond au résultat obtenu par Lau [25] pour l'interaction mutuelle de deux adatoms. D'autre part, si nous considérons le cas où les deux défauts sont identiques ( $A = A'$  et  $C = C'$ ), alors l'énergie  $U$  est positive car  $K$  est positif et le terme entre crochets dans (2.23) est une forme bilinéaire définie positive en fonction de  $A$  et de  $C$ ; nous avons donc affaire à une interaction répulsive, avec une décroissance en  $\frac{1}{R_{//}^3}$ .

#### II - 4 DEPLACEMENTS QUADRATIQUES MOYENS DES ATOMES

A haute température, on peut montrer [30] que les déplacements quadratiques moyens d'un atome situé en  $\vec{x}$  sont donnés par

$$\langle u_{\alpha}^2(\vec{x}) \rangle = -k_B T U_{\alpha\alpha}(x_3) \quad (\alpha = x, y, z) \quad (2.24)$$

avec

$$U_{xx}(x_3) = U_{yy}(x_3) = \frac{1}{2\pi\rho} \int_0^{k_D} \frac{1}{2} [d_{xx}(k_{//}|x_3x_3) + d_{yy}(k_{//}|x_3x_3)] k_{//} dk_{//} \quad (2.25)$$

$$U_{zz}(x_3) = \frac{1}{2\pi\rho} \int_0^{k_D} d_{zz}(k_{//}|x_3x_3) k_{//} dk_{//} \quad (2.26)$$

On pourra ici encore distinguer les contributions du volume, de la surface et de la couche déposée en considérant le terme correspondant dans les éléments de la fonction de Green.

Nous obtenons alors :

$$U_{xx}^o(x_3) = - \frac{k_D}{8\pi C_{44}} \frac{\alpha_1 \alpha_2 C_{33} + C_{44}}{(\alpha_1 + \alpha_2) \alpha_1 \alpha_2 C_{33}} + \frac{1}{\alpha} \quad (2.27)$$

$$U_{xx}^s(x_3) = - \frac{1}{8\pi x_3} \left\{ m_3 \left[ \frac{A_{11}}{\alpha_1} I_o(z_{D_1}) + \frac{A_{22}}{\alpha_2} I_o(z_{D_2}) + \frac{4A_{12}}{\alpha_1 + \alpha_2} I_o(z_{D_{12}}) \right] + \frac{1}{2C_{44} \alpha^2} I_o(z_D) \right\} \quad (2.28)$$

où  $z_D = 2k_D \alpha x_3$  (2.29)

et

$$U_{xx}^a(x_3) = \frac{h}{8\pi x_3^2} \left\{ m_3 \Gamma \left[ \frac{A_{11}}{\alpha_1} I_1(z_{D_1}) + \frac{A_{22}}{\alpha_2} I_1(z_{D_2}) + \frac{4A_{12}}{\alpha_1 + \alpha_2} I_1(z_{D_{12}}) \right] + \frac{\Lambda}{C_{44}} \frac{1}{2\alpha^2} I_1(z_D) \right\} \quad (2.30)$$

$\Lambda$  est défini en (2.36c).

Pour  $U_{zz}(x_3)$ :

$$U_{zz}^o = - \frac{k_D (\alpha_1 \alpha_2 C_{44} + C_{11})}{4\pi C_{44} C_{33} (\alpha_1 + \alpha_2) \alpha_1 \alpha_2} \quad (2.31)$$

$$U_{zz}^s(x_3) = - \frac{m_3}{4\pi x_3} \left\{ \alpha_2 A_{22} I_o(z_{D_1}) + \alpha_1 A_{11} I_o(z_{D_2}) + \frac{4\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} A_{12} I_o(z_{D_{12}}) \right\} \quad (2.32)$$

et

$$U_{zz}^a(x_3) = \frac{h}{4\pi x_3^2} m_3 \Gamma \left\{ \alpha_2 A_{22} I_1(z_{D_1}) + \alpha_1 A_{11} I_1(z_{D_2}) + \frac{4\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} A_{12} I_1(z_{D_{12}}) \right\} \quad (2.33)$$

Les contributions dues à la surface ou à la couche déposée peuvent être exprimées de façon explicite en fonction des constantes élastiques si l'on se place dans l'approximation asymptotique  $x_3 \rightarrow \infty$ . Alors, nous obtenons :

$$U_{xx}^s(x_3 \rightarrow \infty) = -\frac{1}{16\pi x_3} (T_x + T_y) \quad (2.34)$$

$$U_{xx}^a(x_3 \rightarrow \infty) = \frac{h}{16\pi x_3^2} (\Gamma T_x + \Lambda T_y) \quad (2.35)$$

avec

$$T_x = \frac{(\sqrt{c_{11}c_{33}} - c_{13})^2 + \frac{2}{K} \sqrt{c_{11}c_{33}} (c_{11}c_{33} - c_{13}^2) (c_{13} + c_{44})}{c_{11} (c_{11}c_{33} - c_{13}^2)} \quad (2.36a)$$

$$T_y = \frac{2}{c_{11} - c_{12}} \quad (2.36b)$$

Les facteurs  $\Gamma$  et  $K$  sont définis respectivement en (2.4) et (2.10a), et l'on a :

$$\Lambda = \frac{c'_{11} - c'_{12}}{c_{11} - c_{12}} \quad (2.36c)$$

De même :

$$U_{zz}^s(x_3 \rightarrow \infty) = -\frac{1}{8\pi x_3} \frac{\frac{K}{c_{44}} + \frac{2}{K} (c_{11}c_{33} - c_{13}^2) (c_{13} + c_{44})}{(c_{11}c_{33} - c_{13}^2)} \quad (2.37)$$

$$U_{zz}^a(x_3 \rightarrow \infty) = -\frac{h}{x_3} \Gamma U_{zz}^s(x_3 \rightarrow \infty) \quad (2.38)$$

Remarquons que les expressions des déplacements quadratiques moyens avaient déjà été obtenus [31] pour les cristaux semi-infinis, sans adsorbat. Leurs valeurs avaient alors été calculées pour les atomes

de volume et de surface de plusieurs cristaux hexagonaux. Ici, nous avons donné une expression explicite de ceux-ci pour  $x_3 \rightarrow \infty$ , mais nous avons surtout montré que l'influence de la couche déposée se manifeste à travers les paramètres  $\Gamma$  et  $\Lambda$ .

Les contributions réellement intéressantes de  $U_{xx}^a(x_3 \rightarrow \infty)$  et  $U_{zz}^a(x_3 \rightarrow \infty)$  et que l'on peut attribuer à la différence de nature entre la couche déposée et le substrat sont ici :

$$U_{zz,2}^a(x_3 \rightarrow \infty) = - \frac{h}{x_{o3}} U_{zz}^s(x_3 \rightarrow \infty) (\Gamma - 1) \quad (2.39)$$

et  $U_{xx,2}^a(x_3 \rightarrow \infty)$  s'obtient en remplaçant dans (2.35)  $\Gamma$  par  $\Gamma - 1$  et  $\Lambda$  par  $\Lambda - 1$ .

A titre d'illustration, nous étudions (fig. 2.3) l'effet d'une surface propre ou avec adsorbat, sur les déplacements quadratiques moyens  $\langle u^2 \rangle$  des atomes d'un substrat de Ti. Les courbes (1) indiquent comment

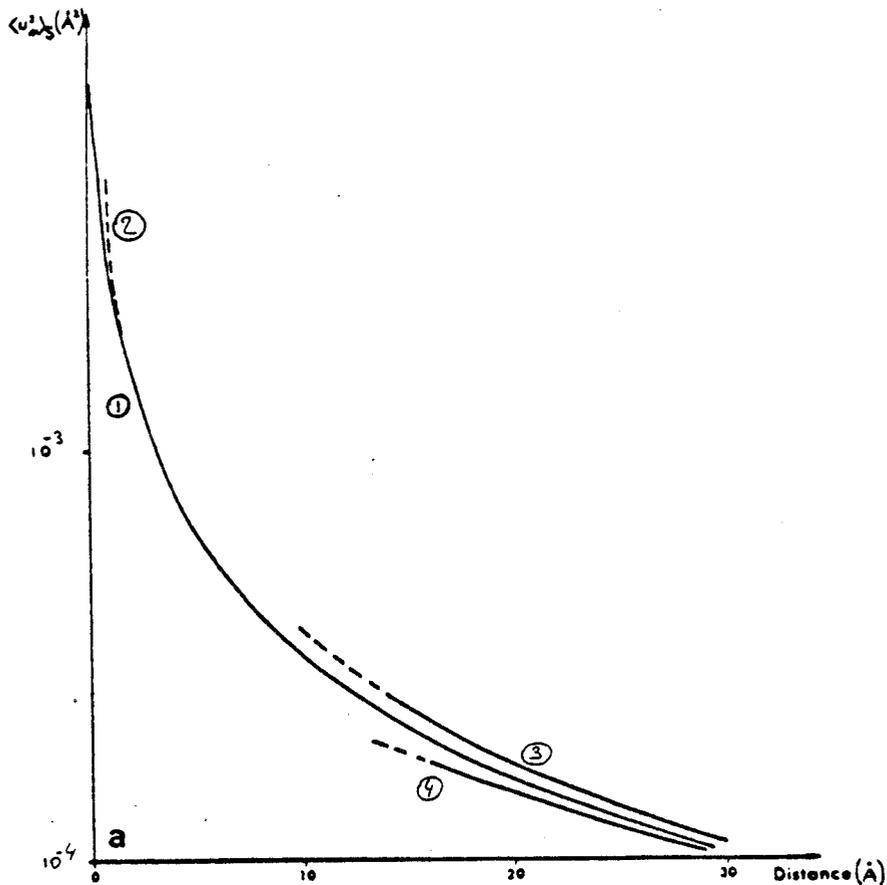


Figure 2.3a

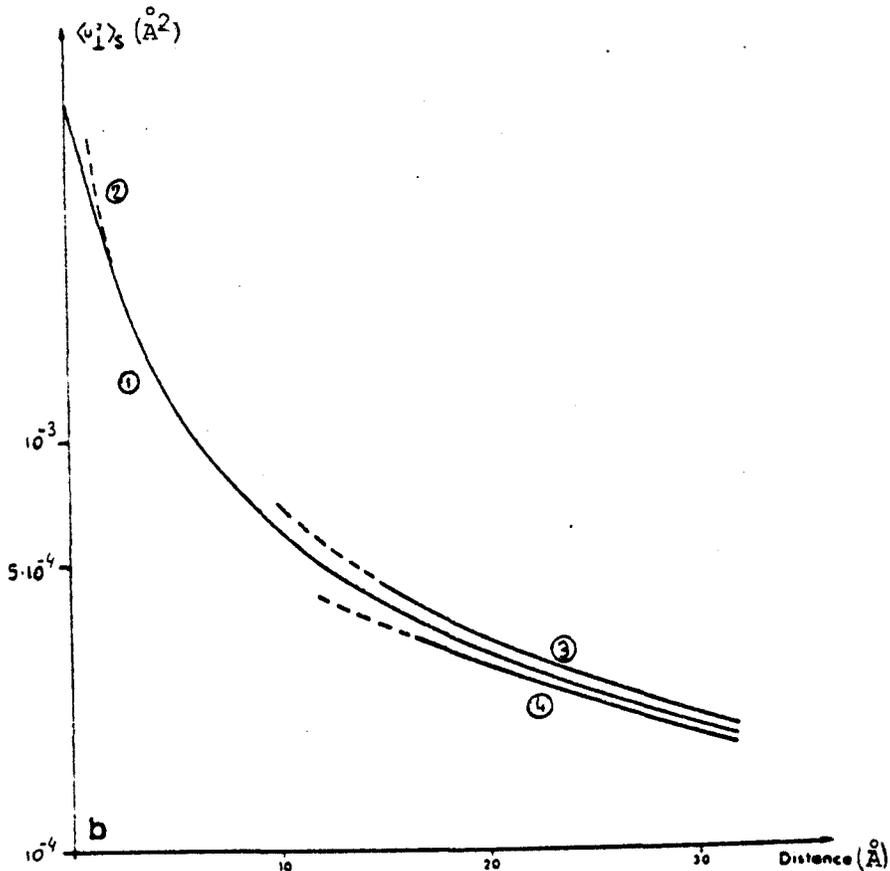


Figure 2.3b

Figures 2.3. - Contribution de surface en l'absence ou en présence d'une couche déposée, aux déplacements quadratiques moyens  $\langle u^2 \rangle$  des atomes d'un cristal de Ti. Les paramètres et la signification des courbes sont ceux donnés dans la légende de la figure 2.1. La température est fixée à  $T = 300$  K. (a) :  $\langle u^2 \rangle$  parallèles au plan (0001) ; (b) : perpendiculaires au plan (0001)

les  $\langle u^2 \rangle$  sont modifiés par rapport à leur valeur en volume au voisinage d'une surface propre. Ces courbes se déduisent des expressions (2.29) et (2.32). Les comportements asymptotiques de ces lois, en  $x_{O_3}^{-1}$  (éqs. (2.34) et (2.37)), sont représentés par les courbes (2). En présence d'une couche déposée, la modification des  $\langle u^2 \rangle$  par rapport à leur valeur en volume est représentée par l'addition des expressions (2.34) - (2.35) d'une part, (2.37) - (2.38) d'autre part. Les courbes (3) et (4) donnent respectivement les résultats pour une couche superficielle  $h = 3 \text{ Å}$  de CdS ou de ZnO ; l'abscisse représente ici la distance  $x_{O_3} + h$  de l'atome considéré à la surface libre du système. La couche superficielle de CdS tend à augmenter les  $\langle u^2 \rangle$  tandis que celle de ZnO tend à les diminuer.

## CHAPITRE III

### EXTENSION AU CAS DES SURFACES INHOMOGENES

#### III - 1 INTRODUCTION

Nous nous proposons de généraliser les résultats obtenus dans les chapitres précédents au cas où le substrat est recouvert de  $N$  couches de propriétés différentes (fig. 3.1), mais dont l'épaisseur totale  $h$  reste faible ( $hk_{//} \ll 1$ ). Cette dépendance des paramètres du système avec la distance à la surface peut se rencontrer dans différentes situations : par exemple, lors d'un traitement spécial tel que la trempe chimique ou thermique ou encore par écrouissage, et bien sûr lorsqu'on dépose successivement plusieurs couches de matériaux différents sur le substrat. Nous considérons dans ce chapitre la géométrie de la figure 3.1 où les différentes interfaces restent perpendiculaires à l'axe  $x_3$ . Chaque milieu  $i$  est supposé être un milieu élastique de symétrie hexagonale, c'est-à-dire caractérisée par des constantes élastiques  $C_{11}^{(i)}$ ,  $C_{33}^{(i)}$ ,  $C_{12}^{(i)}$ ,  $C_{13}^{(i)}$  et  $C_{44}^{(i)}$  et la densité  $\rho^{(i)}$ . Toutes les interfaces sont supposées être selon l'orientation (0001). Les milieux isotropes pourront alors être traités

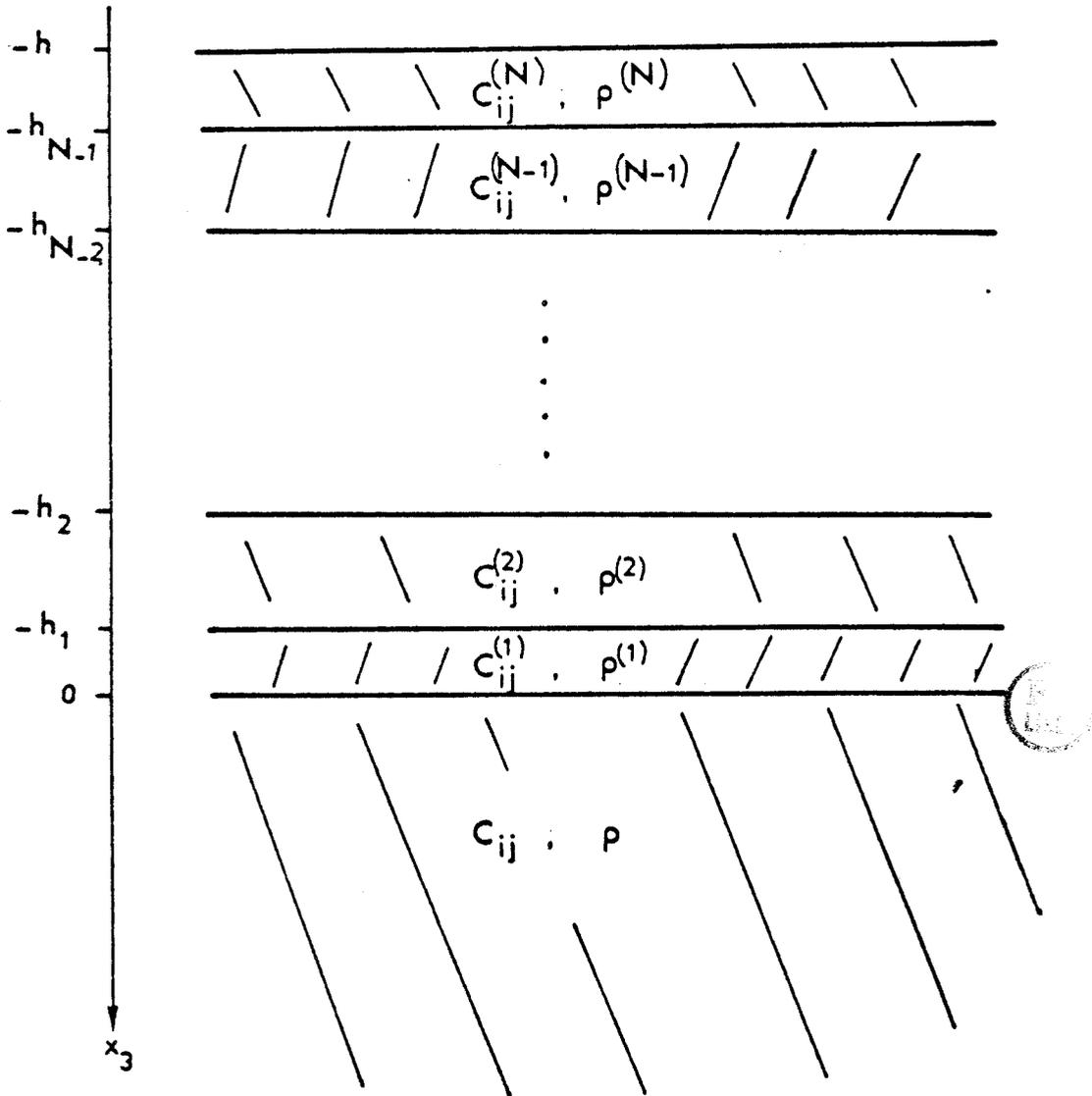


Figure 3.1.

comme des cas particuliers des précédents.

En éliminant les couches 1 à N au profit de conditions aux limites effectives à la surface du substrat, écrites au premier ordre en  $hk_{//}$ , par exemple, nous retrouvons le même problème que celui d'une seule couche adsorbée. Mais, maintenant, les paramètres décrivant ces conditions aux limites contiennent des moyennes sur les paramètres des N couches. Nous verrons précisément quelles sont les moyennes qu'il faut considérer.

En un premier temps, nous décrivons l'obtention des conditions effectives sur les contraintes à la surface du substrat ; elles permettent de retrouver celles pour une seule couche adsorbée. Nous discutons ensuite l'effet de l'inhomogénéité de surface sur certaines propriétés physiques étudiées précédemment pour une seule couche.

Remarquons que les vitesses des ondes de surface ont également été analysées numériquement pour certaines lois de variations des paramètres avec la distance à la surface [32] et que des études numériques et expérimentales ont été réalisées au sein même de notre laboratoire ([33, 34]).

Enfin, le problème considéré ici peut être généralisé au cas où l'espace  $x_3 < -h$  (fig. 1) est rempli par un milieu matériel, autrement dit, lorsqu'il existe une inhomogénéité à l'interface entre deux milieux. Dans ce cas, il faut obtenir en plus des conditions effectives sur les contraintes à l'interface, celles relatives aux déplacements.

### III - 2 OBTENTION DES CONDITIONS AUX LIMITES EFFECTIVES

Nous présentons l'obtention des conditions aux limites effectives sur les éléments de la fonction de Green. Bien que celles-ci puissent également s'obtenir sur les déplacements, notre calcul a l'avantage de conduire à la fonction de Green du système.

Rappelons que, grâce à la symétrie de translation parallèlement à la surface (0001), on peut effectuer une transformation de Fourier de la fonction de Green faisant apparaître le vecteur d'onde  $\vec{k}_{//}$ , parallèle

à toutes les interfaces. De plus, en raison de l'isotropie de la surface (0001) d'un cristal hexagonal, nous pouvons effectuer une rotation qui ramène le vecteur d'onde  $\vec{k}_{//}$  selon la direction  $\hat{x}_1$  de l'espace. Les éléments de la fonction de Green s'écrivent alors ([35])  $d_{\alpha\beta}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3)$  (où  $\alpha, \beta$  désignent les trois directions de l'espace  $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3$ ) avec  $d_{12} = d_{21} = d_{13} = d_{31} = 0$ . Autrement dit, il se produit un découplage de  $d_{22}$  des autres éléments de la fonction de Green. Dans la suite, nous simplifions les notations en omettant la dépendance en  $k_{//}$  et  $\omega$ .

Calculons maintenant les conditions aux limites effectives, d'abord pour  $d_{22}$ , ensuite pour  $d_{11}$  et  $d_{31}$ , ainsi que pour  $d_{13}$  et  $d_{33}$ . Pour cela, nous utilisons les conditions de continuité sur les éléments de la fonction de Green, aux différentes interfaces situées à  $x_3 = -h_i$  ( $i = 0, \dots, N$  avec  $h_0 = 0$  et  $h_N = h$ ) : celles-ci expriment la continuité des déplacements et des contraintes à une interface et l'absence de contraintes à une surface libre.

Pour  $d_{22}$ , ces conditions s'écrivent :

$$[d_{22}(x_3, x'_3)]_{x_3 = -h_i + 0} = [d_{22}(x_3, x'_3)]_{x_3 = -h_i - 0} \quad (3.1)$$

$$[C_{44}^{(i)} \frac{d}{dx_3} d_{22}(x_3, x'_3)]_{x_3 = -h_i + 0} = [C_{44}^{(i+1)} \frac{d}{dx_3} d_{22}(x_3, x'_3)]_{x_3 = -h_i - 0} \quad (3.2)$$

aux interfaces  $x_3 = -h_i$  ( $i = 0, 1, \dots, N-1$ ) et

$$[C_{44}^{(N)} \frac{d}{dx_3} d_{22}(x_3, x'_3)]_{x_3 = -h} = 0 \quad (3.3)$$

à la surface libre du système.

Par addition des équations (3.2) et de l'équation (3.3), on obtient :

$$[(C_{44} \frac{d}{dx_3} d_{22})]_{x_3 = +0} = \sum_{i=1}^N C_{44}^{(i)} \left\{ (\frac{d}{dx_3} d_{22})_{x_3 = -h_{i-1} - 0} - (\frac{d}{dx_3} d_{22})_{x_3 = -h_i + 0} \right\} \quad (3.4)$$

Au second membre de (3.4), chaque terme fait intervenir la fonction de Green  $d_{22}(x_3, x'_3)$  pour  $x_3$  appartenant au même milieu  $i$  ; on peut donc faire un développement de Taylor au premier ordre sous la forme :

$$[(C_{44} \frac{d}{dx_3} d_{22})]_{x_3 = +0} = \sum_{i=1}^N C_{44}^{(i)} (h_i - h_{i-1}) [\frac{d^2}{dx_3^2} d_{22}]_{x_3 = -h_i + 0} \quad (3.5)$$

Or, à l'intérieur du milieu  $i$ , l'équation de mouvement régissant  $d_{22}$  s'écrit : (cf. [33])

$$(\rho^{(i)} \omega^2 - C_{66}^{(i)} k_{//}^2 + C_{44}^{(i)} \frac{d^2}{dx_3^2}) d_{22}(x_3, x'_3) = 0 \quad (3.6)$$

L'équation (3.5) devient alors :

$$[C_{44} \frac{d}{dx_3} d_{22}]_{x_3 = +0} = \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) (C_{66}^{(i)} k_{//}^2 - \rho^{(i)} \omega^2) [d_{22}]_{x_3 = -h_i + 0} \quad (3.7)$$

où

$$C_{66} = (C_{11} - C_{12}) / 2 \quad (3.8)$$

Finalement, en rappelant que nous nous limitons aux développements au premier ordre en fonction des  $h_i$ , on peut remplacer dans l'équation (3.7) la quantité  $[d_{22}]_{x_3 = -h_i + 0}$  par  $[d_{22}]_{x_3 = -h_{i-1} - 0}$  ; puis, en utilisant l'équation de continuité (3.1), cette dernière quantité se trouve identique à  $[d_{22}]_{x_3 = -h_{i-1} + 0}$ , qui peut elle même être remplacée par  $[d_{22}]_{x_3 = -h_{i-1} - 0}$ . En continuant ce raisonnement, on aboutit à la quantité  $(d_{22})_{x_3 = +0}$ . L'équation (3.7) devient alors :

$$[C_{44} \frac{d}{dx_3} d_{22}]_{x_3 = +0} = h(\bar{C}_{66} - \rho^2) [d_{22}]_{x_3 = +0} \quad (3.9)$$

où nous avons défini les moyennes suivantes sur les  $N$  couches :

$$\bar{C}_{66} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) C_{66}^{(i)} \quad (3.10a)$$

$$\bar{\rho} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) \rho^{(i)} \quad (3.10b)$$

L'équation (3.9) exprime la condition de contrainte, en présence des N couches superficielles, au premier ordre en h. La présence des couches superficielles se manifeste par le second membre de (3.9) ; en l'absence de ce terme, nous retrouvons l'équation habituelle pour le substrat semi-infini, c'est-à-dire pour une surface libre de contrainte. Dans l'équation (3.9), les propriétés des N couches interviennent à travers les moyennes des  $C_{66}^{(i)}$  et  $\rho^{(i)}$ . Dans le cas particulier N = 1, nous retrouvons le résultat pour une seule couche déposée (chap.II) ; le passage à N couches se fait donc en remplaçant les paramètres d'une seule couche par les moyennes (3.10). En conséquence, le calcul de la fonction de Green  $d_{22}$  du système considéré se fait de façon similaire à celle pour une seule couche déposée (chap.II).

Dans le calcul précédent, nous avons considéré N couches superficielles de propriétés différentes. Supposons maintenant une variation continue (à l'échelle de la longueur d'onde) des paramètres avec la distance à la surface. Les sommations intervenant dans les équations (3.10) peuvent alors être exprimées sous forme d'intégrales, en considérant la limite mathématique :  $N \rightarrow \infty$  et les épaisseurs  $h_i - h_{i-1} \rightarrow 0$ . Pour un paramètre X (par exemple  $C_{66}$  ou  $\rho$ ), nous obtenons :

$$\bar{X} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) X^{(i)} \rightarrow \frac{1}{h} \int_{-h}^0 X(x_3) dx_3 \quad (3.11)$$

Un calcul similaire à celui pour  $d_{22}$  peut être effectué pour les éléments  $d_{11}$  et  $d_{31}$  de la fonction de Green ainsi que pour les éléments  $d_{13}$  et  $d_{33}$ . Les conditions aux limites sur les contraintes s'écrivent :

$$[C_{44} \frac{d}{dx_3} d_{1\alpha} + ik // d_{3\alpha}]_{x_3=+0} = h \{ (\bar{C}_{11} - \bar{C} + \bar{\eta} C_{13}) k // - \bar{\rho} \omega^2 d_{1\alpha} - i \bar{\eta} C_{33} k // \frac{d}{dx_3} d_{3\alpha} \}_{x_3=+0} \quad (3.12)$$

$$[iC_{13}k_{//}d_{1\alpha} + C_{33} \frac{d}{dx_3} d_{3\alpha}]_{x_3=+0} = -h[iC_{44}k_{//} \frac{d}{dx_3} d_{1\alpha} + (\bar{\rho}\omega^2 - C_{44}k_{//}^2) d_{3\alpha}]_{x_3=+0} \quad (3.13)$$

( $\alpha = 1, 3$ )

où nous avons défini les nouvelles moyennes :

$$\bar{C}_{11} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) C_{11}^{(i)} \quad (3.14a)$$

$$\bar{C}_{13} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) C_{13}^{(i)} \quad (3.14b)$$

$$\bar{C} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) \frac{C_{13}^{(i)2}}{C_{33}^{(i)}} \quad (3.14c)$$

$$\bar{\eta} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) \frac{C_{13}^{(i)}}{C_{33}^{(i)}} \quad (3.14d)$$

Pour  $h = 0$ , les équations (3.12) et (3.13) expriment que la surface du substrat est libre de contrainte. Les seconds membres de (3.12) et (3.13) fournissent l'effet des  $N$  couches sur les contraintes, au premier ordre en  $h$ . Ils redonnent pour  $N = 1$  les résultats obtenus (chap.II) pour une seule couche. Nous pouvons donc calculer les éléments de la fonction de Green de façon similaire à celle pour une couche (chap.II). Enfin, les sommations intervenant dans (3.14) peuvent être transformées en intégrales lorsque les paramètres varient de façon continue avec la distance à la surface.

Nous pouvons encore simplifier les conditions aux limites (3.12) et (3.13). En effet, au second membre de (3.12) on peut considérer un terme  $-ihk_{//}[\bar{\eta} i C_{13} k_{//} d_{11} + C_{33} \frac{d}{dx_3} d_{31}]_{x_3=+0}$  dont la partie entre crochets n'est autre que le premier membre de (3.13), c'est-à-dire une quantité nulle à l'ordre zéro en  $h$ . De même au second membre de (3.13), on peut isoler le terme  $ihk_{//}[C_{44} \frac{d}{dx_3} d_{11} + ik_{//} d_{31}]_{x_3=+0}$  qu'on retrouve au premier membre de (3.12). Finalement, au premier ordre en  $h$ , on peut écrire les conditions aux limites suivantes :

$$C_{44} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{1\alpha} + ik_{//} d_{3\alpha} \right]_{x_3=+0} = h \{ (\bar{C}_{11} - \bar{C}) k_{//}^2 - \bar{\rho} \omega^2 \} [d_{1\alpha}]_{x_3=+0} \quad (3.15)$$

$$[iC_{13} k // d_{1\alpha} + C_{33} \frac{d}{dx_3} d_{3\alpha}]_{x_3=+0} = -h \bar{\rho} \omega^2 [d_{3\alpha}]_{x_3=+0} \quad (3.16)$$

### III - 3 DISCUSSIONS

Nous avons modélisé la présence d'inhomogénéités à la surface d'un substrat par celle de N couches de propriétés différentes. Nous avons alors montré que, lorsque l'épaisseur de ces couches est faible, on peut les éliminer au profit de conditions aux limites effectives à la surface du substrat. Celles-ci s'expriment en terme des éléments de la fonction de Green par les équations (3.9), (3.15) et (3.16). Nous pouvons constater que l'influence des couches superficielles se manifeste, au premier ordre en h, à travers les paramètres moyens  $\bar{\rho}$  et  $\bar{C}_{66}$ , pour  $d_{22}$ , et  $\bar{\rho}$  et

$$\bar{\Gamma} = \bar{C}_{11} - \bar{C} \quad (3.17)$$

pour  $d_{11}$  et  $d_{31}$  ainsi que pour  $d_{13}$  et  $d_{33}$ . Les différentes propriétés du système qui peuvent se déduire de la fonction de Green dépendront donc également, au premier ordre en h, des propriétés des couches superficielles à travers ces mêmes paramètres  $\bar{C}_{66}$ ,  $\bar{\rho}$  et  $\bar{\Gamma}$ . Dans le cas particulier d'une seule couche adsorbée, caractérisée par les paramètres  $C'_{ij}$  et  $\rho'$ , on aura affaire aux paramètres  $C'_{66}$ ,  $\rho'$  et  $\Gamma' = C'_{11} - \frac{C'^2_{13}}{C'_{33}}$ . Nous pouvons donc généraliser sans calcul supplémentaire des résultats obtenus précédemment (chap.II) dans le cas d'une seule couche adsorbée à celui de N couches. Ces résultats concernent l'effet des couches superficielles sur les vitesses des ondes de surface, sur les énergies élastiques, de défauts ponctuels situés dans le substrat, sur les déplacements quadratiques moyens des atomes  $\langle u^2 \rangle$ . Nous ne donnons pas ici les expressions détaillées de ces propriétés physiques car elles sont relativement lourdes. Il est cependant utile de remarquer que, dans toutes ces propriétés, l'effet des couches superficielles intervient à travers le produit des paramètres  $\bar{\Gamma}$ ,  $\bar{C}_{66}$  ou  $\bar{\rho}$  par des expressions compliquées ne dépendant que du substrat. Ainsi, à titre d'exemple, la fréquence de l'onde de Rayleigh en présence d'une couche superficielle s'écrit (cf. l'équation (1.12)) :

$$\omega^2 = c_R^2 k_{//}^2 (1 - \gamma h k_{//}) + o(h) \quad (3.18)$$

$\bar{c}_R$  est la vitesse de l'onde de Rayleigh du substrat et  $\gamma$  qui contient l'effet de la couche superficielle a pour expression

$$\gamma = \Gamma' P_1 + \rho' P_2 \quad (3.19)$$

où  $P_1$  et  $P_2$  dépendent exclusivement des propriétés du substrat et sont donnés dans le chapitre 1, éq. (1.13) sqq. En présence de plusieurs couches superficielles, on peut utiliser les équations (3.18) et (3.19) en changeant  $\Gamma'$  et  $\rho'$  en  $\bar{\Gamma}$  et  $\bar{\rho}$ .

De même, lorsque  $\frac{\bar{C}_{66}}{\bar{\rho}} < \frac{\bar{C}_{66}}{\bar{\rho}}$ , la présence de couches superficielles donne lieu à une onde de type Love avec une fréquence  $\omega$  telle que

$$\omega^2 = c_t^2 k_{//}^2 (1 - \gamma' (h k_{//}))^2 + o(h^2) \quad (3.20)$$

où 
$$c_t^2 = \frac{C_{66}}{\rho},$$

et le paramètre  $\gamma'$  contient les caractéristiques des couches de surface (cf. les éqs. (1.21) et (1.22))

$$\gamma' = \frac{C_{66}}{C_{44}} \left( \frac{\bar{C}_{66}}{C_{66}} - \frac{\bar{\rho}}{\rho} \right)^2 \quad (3.21)$$

Enfin, les généralisations peuvent également s'effectuer sur les énergies élastiques de défatus et les  $\langle u^2 \rangle$  (voir les équations (2.11), (2.35), (2.37)) qui vont dépendre maintenant de  $\bar{\Gamma}$  et  $\bar{C}_{66}$ .

Enfin, les résultats précédents obtenus pour les cristaux hexagonaux peuvent aussi s'appliquer à des milieux élastiques isotropes, le passage de la symétrie hexagonale au cas isotrope introduisant les relations suivantes entre les constantes élastiques :  $C_{11} = C_{33} = C_{12} + 2C_{44}$ ,  $C_{13} = C_{12}$ .

III - 4 NOTE SUR LES SANDWICHS ABC

Nous pouvons généraliser les résultats précédents au cas où le demi espace  $x_3 < -h$  est occupé par un milieu matériel, de paramètres  $C''_{ij}$  et  $\rho''$ . En l'absence d'inhomogénéités, nous retrouvons le problème d'une interface entre deux cristaux ; en présence d'une seule couche intermédiaire, on a un sandwich ABC [7, 36] . Nous voudrions montrer comment les résultats pour un sandwich ABC, avec une couche B mince [7, 36] , peuvent être transposés au cas où B est remplacé par N couches, dont l'épaisseur totale reste toutefois faible.

En l'absence d'inhomogénéités, nous avons les conditions habituelles de continuité des déplacements et des contraintes à une interface entre deux cristaux (A et C). En présence des couches inhomogènes, on peut éliminer celles-ci pour aboutir à des conditions aux limites effectives à l'interface.

Considérons le problème pour l'élément  $d_{22}$  de la fonction de Green. Nous pouvons utiliser les équations (3.1) et (3.2) et remplacer l'équation (3.3) par :

$$C_{44}^{(N)} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=-h+0} = C''_{44} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=-h-0} \quad (3.22)$$

En combinant les équations (3.2) et (3.22), on peut aboutir exactement comme au paragraphe 2 à la conditions effective suivante, relative aux contraintes

$$C_{44} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=+0} - C''_{44} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=-h-0} = h(\bar{C}_{66} k^2 - \bar{\rho} \omega^2) [d_{22}]_{x_3=+0} \quad (3.23)$$

où  $\bar{C}_{66}$  et  $\bar{\rho}$  sont définis en (3.10). Considérons maintenant la condition effective, relative aux déplacements. En combinant les équations (3.1), nous nous obtenons :

$$[d_{22}]_{x_3=+0} - [d_{22}]_{x_3=-h-0} = \sum_{i=1}^N [d_{22}]_{x_3=-h_{i-1}-0} - [d_{22}]_{x_3=-h_i+0} \quad (3.24)$$

soit encore

$$[d_{22}]_{x_3=+0} - [d_{22}]_{x_3=-h-0} = \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) \left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=-h_{i-1}-0} \quad (3.25)$$

Or  $\left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=-h_i+0}$  peut être remplacé à l'ordre zéro en  $h$  par  $\left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=-h_{i-1}-0}$  (car  $x_3$  reste dans le même milieu  $i$ ) ; puis, en utilisant les équations (3.2), cette dernière quantité est identique à

$$\frac{C_{44}^{(i-1)}}{C_{44}^{(i)}} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=-h_{i-1}+0}$$

En continuant de proche en proche, l'équation (3.24) devient

$$[d_{22}]_{x_3=+0} - [d_{22}]_{x_3=-h-0} = h \gamma_{44} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=+0} \quad (3.26)$$

où nous avons défini le paramètre moyen :

$$\gamma_{44} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) \frac{C_{44}^{(i)}}{C_{44}^{(i)}} \quad (3.27)$$

C'est une moyenne sur l'inverse des  $C_{44}^{(i)}$ .

Lorsque  $N \rightarrow \infty$  et les épaisseurs  $h_i - h_{i-1} \rightarrow 0$ , la sommation peut être transformée en intégrale et

$$\gamma_{44} = \frac{1}{h} \int_{-h}^0 \frac{C_{44}}{C_{44}(x_3)} dx_3$$

Le calcul pour les éléments  $d_{1\alpha}$  et  $d_{3\alpha}$  de la fonction de Green conduit aux conditions effectives suivantes :

(i) En ce qui concerne les équations relatives aux contraintes

$$c_{44} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{1\alpha} + ik_{//} d_{3\alpha} \right]_{x_3=+0} - c_{44}'' \left[ \frac{d}{dx_3} d_{1\alpha} + ik_{//} d_{3\alpha} \right]_{x_3=-h-0} =$$

$$h \{ (\bar{c}_{11} - \bar{c} + \bar{\eta} c_{13}) k_{//}^2 - \bar{\rho} \omega^2 \} d_{1\alpha} - i \bar{\eta} c_{33} k_{//} \frac{d}{dx_3} d_{3\alpha} \Big|_{x_3=+0}$$

(3.28)

$$[ic_{13} k_{//} d_{1\alpha} + c_{33} \frac{d}{dx_3} d_{3\alpha}]_{x_3=+0} - [ic_{13}'' k_{//} d_{1\alpha} + c_{33}'' \frac{d}{dx_3} d_{3\alpha}]_{x_3=-h-0} =$$

$$-h [ ic_{44} k_{//} \frac{d}{dx_3} d_{1\alpha} + (\bar{\rho} \omega^2 - c_{44} k_{//}^2) d_{3\alpha} ]_{x_3=+0}$$

(3.29)

qui sont des généralisations immédiates des équations (3.12) et (3.13).

(ii) En ce qui concerne les équations relatives aux déplacements

$$[d_{1\alpha}]_{x_3=+0} - [d_{1\alpha}]_{x_3=-h-0} = h \left[ \gamma_{44} \left( \frac{d}{dx_3} d_{1\alpha} + ik_{//} d_{3\alpha} \right) - ik_{//} d_{3\alpha} \right]_{x_3=+0}$$

(3.30)

$$[d_{3\alpha}]_{x_3=+0} - [d_{3\alpha}]_{x_3=-h-0} = h \left[ \gamma_{33} \left( i \frac{c_{13}}{c_{33}} k_{//} d_{1\alpha} + \frac{d}{dx_3} d_{3\alpha} \right) - ik_{//} \gamma_{13} d_{1\alpha} \right]_{x_3=+0}$$

(3.31)

où nous avons introduit les nouvelles moyennes

$$\gamma_{33} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) \frac{c_{33}}{c_{33}^{(i)}}$$

(3.32)

$$\gamma_{13} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^N (h_i - h_{i-1}) \frac{c_{13}^{(i)}}{c_{33}^{(i)}}$$

(3.33)

Enfin, dans les conditions aux limites effectives (3.33), (3.26), (3.28) - (3.31), on peut effectuer la transformation suivante.

Dans chaque cas, le second terme du premier membre est à calculer en  $x_3 = -h-0$ . On peut ramener ce calcul à  $x_3 = -0$  par un développement au premier ordre en  $h$ . L'équation (3.33) devient alors :

$$\left[ C_{44} \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=+0} - \left[ C_{44}'' \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=-0} = h \left\{ (\bar{C}_{66} - C_{66}'') k^2 - (\bar{\rho} - \rho'') \omega^2 \right\} \left[ d_{22} \right]_{x_3=+0} \quad (3.34)$$

qui résulte de (3.33) en remplaçant au second membre  $\bar{\rho}$  et  $\bar{C}_{66}$  respectivement par  $\bar{\rho} - \rho''$  et  $\bar{C}_{66} - C_{66}''$ . De même, l'équation (3.26) devient

$$\left[ d_{22} \right]_{x_3=+0} - \left[ d_{22} \right]_{x_3=-0} = h \left( \gamma_{44} - \frac{C_{44}}{C_{44}''} \right) \left[ \frac{d}{dx_3} d_{22} \right]_{x_3=+0} \quad (3.35)$$

Une transformation similaire peut être opérée sur les équations (3.28)-(3.31).

## CONCLUSION

Une couche déposée à la surface d'un substrat semi infini modifie les propriétés dynamiques et statiques de ce dernier. En nous plaçant dans le cadre de la limite élastique, nous avons étudié certaines de ces propriétés sur deux types de cristaux réels : les cristaux hexagonaux (avec la surface (0001)) et les cristaux cubiques (avec la surface (001)).

Nous avons tout d'abord obtenu sous forme explicite les formules de dispersion des ondes de surface à grande longueur d'onde pour les milieux hexagonaux recouverts d'une couche mince [37] et, dans les mêmes conditions, pour les directions [100] et [110] des milieux cubiques [38]. Dans le cas des épaisseurs quelconques, nous avons étudié numériquement plusieurs configurations caractéristiques [37]. Pour les milieux cubiques, nous avons notamment étudié le cas des alliages  $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$  déposés sur un substrat de Ga As. Ces alliages sont très prometteurs pour la réalisation de circuits optoélectroniques intégrés. Nous avons aussi étudié l'influence d'une couche superficielle mince sur la contribution due à l'effet de ripplons en diffusion Brillouin. Cette contribution est prédominante notamment dans le cas des métaux. Nous avons ainsi mis en évidence la sensibilité à la présence d'une telle couche de la Pseudo Onde de Surface qui caractérise certains matériaux cubiques dans certaines directions de propagation.

Remarquons que nous n'avons pas entrepris l'étude de l'effet

élasto-optique qui contribue également à l'intensité du spectre de la diffusion Brillouin dans le cas des matériaux transparents. Une telle étude est encore à faire.

Pour ce qui concerne les alliages  $\text{GaAl}_x\text{As}_{1-x}$ , signalons qu'il est possible de mesurer par diffusion Brillouin les vitesses des Ondes de Surface caractéristiques des configurations  $\text{GaAl}_x\text{As}_{1-x}$  déposés sur GaAs (expérience en cours de réalisation au CNET de Bagneux par le Docteur J. Sapriel). Le résultat de ces mesures devrait, par comparaison avec les résultats que nous pouvons obtenir numériquement, permettre d'évaluer les constantes élastiques des alliages  $\text{GaAl}_x\text{As}_{1-x}$  par rapport à celles du GaAs.

Nous avons ensuite étudié quelques propriétés statiques des milieux hexagonaux avec notamment l'influence d'une couche superficielle mince [39]. Nous avons ainsi obtenu les expressions rendant compte des propriétés suivantes : énergie d'interaction élastique d'un défaut avec une surface, énergie mutuelle d'interaction entre deux défauts, déplacements quadratiques moyens d'atomes. Ces expressions sont plus générales que les expressions relatives au cas idéal des cristaux isotropes, ces derniers pouvant en fait être considérés comme un cas particulier de cristaux hexagonaux. Pour l'énergie élastique d'interaction mutuelle entre deux défauts ponctuels dans un substrat hexagonal, nous avons vu que le terme de volume n'est pas nul même lorsque les deux défauts sont identiques et isotropes contrairement à ce qui se passe dans un substrat isotrope. Pour ce qui est de la contribution due à la présence d'une surface, nous avons constaté la présence de quatre termes géométriques qui, dans la limite du substrat isotrope, se réduisent à un seul terme représentant la distance entre l'un des défauts et l'image de l'autre par rapport à la surface. Enfin, pour chacune des propriétés étudiées, nous avons calculé la correction au premier ordre due à une couche adsorbée mince. La différence de nature entre l'adsorbat et le substrat est introduite par les termes  $\Gamma$  et  $\Lambda$  respectivement égaux à

$$\frac{C'_{11} - \frac{C'_{13}{}^2}{C'_{33}}}{C_{11} - \frac{C_{13}{}^2}{C_{33}}} \quad \text{et} \quad \frac{C'_{11} - C'_{12}}{C_{11} - C_{12}}$$

Le signe de la contribution due à cette différence dépend du signe de  $\Gamma - 1$  et aussi de  $\Lambda - 1$  dans certains cas (e.g.  $U_{xx}^a(x_3 \rightarrow \infty)$ ).

Signalons que nous avons voulu dans ce deuxième chapitre nous limiter aux résultats que l'on pouvait obtenir sous forme analytique relativement simple. Ainsi nous nous sommes limités à des expressions développées au premier ordre en  $h$  (où  $h$  est l'épaisseur de la couche déposée) pour toutes les propriétés physiques que nous avons calculées. En outre, pour les énergies d'interaction dues à des défauts, nous nous sommes limités à calculer les contributions élastiques de ces dernières en prenant un modèle simple de défaut ponctuel. Nous n'avons de même pas envisagé le cas des défauts situés au sein de la couche déposée ni les déplacements carrés moyens des atomes situés dans cette même couche. Tous ces problèmes mériteraient d'être considérés ultérieurement éventuellement au moyen de méthodes numériques.

Remarquons cependant que toutes les formules que nous avons obtenues l'ont été à partir de la seule connaissance de la fonction de Green statique du substrat développée au premier ordre selon l'épaisseur  $h$  de la couche superficielle. La même méthode peut parfaitement être prolongée à des calculs d'ordres supérieurs en  $h$ . De même, d'autres propriétés, comme la chaleur spécifique à basse température [40] peuvent également être obtenues à partir des fonctions de Green statiques. On peut aussi envisager de calculer les fonctions de Green dynamiques des systèmes substrats recouverts d'une couche adsorbée.

Nous avons finalement réussi au chapitre III à généraliser toutes les formules précédentes au cas des surfaces inhomogènes et au cas d'un dépôt successif de plusieurs couches superficielles pourvu que l'épaisseur totale de ce dépôt reste faible. [41]. Les caractéristiques élastiques d'une surface (constantes de force, densité) peuvent effectivement devenir inhomogènes sur une faible épaisseur à la suite d'un traitement spécial tel qu'une trempe ou un écrouissage. En généralisant les conditions aux limites effectives obtenues dans le cas d'une seule couche déposée, nous avons abouti à des expressions formellement semblables aux précédentes en faisant intervenir des paramètres effectifs qui dépendent de certaines moyennes sur les paramètres des différentes

couches déposées (ces moyennes deviennent des intégrales dans le cas des surfaces inhomogènes où la variation des paramètres avec la distance à la surface libre est continue). Le cas d'une seule couche déposée représente alors un cas particulier d'application de ces formules généralisées.

Dans le cadre de ce travail, nous avons vu que la présence d'une ou de plusieurs couches superficielles se traduisait par des conditions de contraintes effectives appliquées à la surface  $x_3 = 0$  d'un substrat semi infini. Une autre altération de surface susceptible d'être traitée par le même procédé de dérivation de conditions aux limites effectives écrites en  $x_3 = 0$ , est le cas d'une rugosité aléatoire de surface d'amplitude moyenne faible [42]. A nouveau, les modes de surface d'un tel système peuvent être recherchés [43,44] ainsi que les modifications apportées par la rugosité aux multiples propriétés physiques sus mentionnées du substrat. On peut en outre considérer que les inhomogénéités de surface dont nous avons parlé n'existent pas sans une certaine rugosité aux interfaces ni sans l'apparition d'une certaine densité de défauts au sein des couches superficielles. Un traitement simultané de ces trois phénomènes serait donc à réaliser pour obtenir une modélisation plus réaliste des inhomogénéités de surface.

Dans un cadre plus général, terminons en signalant qu'il existe d'autres systèmes physiques possédant plusieurs interfaces : outre les sandwichs ABC que nous avons nous-mêmes considérés à la fin de notre chapitre III dans le cas où la tranche B est mince et inhomogène, il faut aussi mentionner les super réseaux. Un super réseau est constitué d'une succession de couches différentes déposées les unes sur les autres avec une certaine périodicité dans la direction perpendiculaire aux couches. Ces couches peuvent être par exemple du Ga As, de l'Al As ou du  $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ . Les super réseaux suscitent une grande curiosité tant au niveau expérimental que théorique et ils sont déjà très prometteurs au niveau technologique. Toujours en utilisant le formalisme des fonctions de Green dont nous pensons avoir à nouveau montré l'extrême intérêt dans cette étude, nous avons déjà pour notre part commencé l'investigation des phonons de volume et de surface pour les super réseaux semi infinis composés de deux couches différentes disposées alternativement et parallèlement à la surface [45,46].

## APPENDICE

### A.1. FORMALISME GENERAL

#### A.1.1. Introduction. Eléments physiques du problème : cas d'un substrat cristallin semi-infini défini par $x_3 \geq 0$ .

Soit  $\rho$  la densité du milieu et  $C_{\alpha\beta\mu\nu}$  ses constantes élastiques (les indices grecs peuvent varier de 1 à 3). Nous donnons par exemple à la page suivante les matrices des constantes élastiques en notation condensée de VOIGT pour les cristaux hexagonaux et pour les cristaux cubiques. Par rapport à un repère  $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$ , le substrat remplit l'espace  $x_3 \geq 0$ .

En supposant que les perturbations appliquées au substrat restent telles que ce dernier puisse toujours être considéré comme un milieu continu, on peut écrire la loi fondamentale de Newton pour un élément de volume :

$$\rho \ddot{u}_\alpha = T_{\alpha\beta,\beta} \quad \alpha = 1,2,3 \quad (A.1)$$

Dans cette écriture la sommation s'entend sur tout indice doublé et un indice précédé d'une virgule signifie une dérivation par rapport à la direction correspondant à l'indice.

$u_\alpha$  est le déplacement selon l'axe  $\hat{x}_\alpha$  d'un point physique dont la position à l'équilibre est donnée par le vecteur  $\vec{x}$ . Les  $T_{\alpha\beta}$  sont les éléments d'un tenseur d'ordre deux appelé tenseur des contraintes. En première approximation linéaire, applicable à toutes les déformations élastiques (sauf pour des matériaux tels que le caoutchouc [47]), on peut utiliser pour les  $T_{\alpha\beta}$  la loi de Hooke, ce qui donne :

$$T_{\alpha\beta} = C_{\alpha\beta\mu\nu} u_{\mu,\nu} \quad \alpha, \beta = 1,2,3 \quad (A.2a)$$

avec

$$C_{\alpha\beta\mu\nu} = \theta(x_3) \cdot C_{\alpha\beta\mu\nu} \quad (A.2b)$$

Matrices des coefficients élastiques, données en notation condensée de VOIGT, pour les cristaux hexagonaux et pour les cristaux cubiques.

Rappelons la convention de la notation condensée de VOIGT :

11 → 1 , 22 → 2 , 33 → 3 , 23 → 4 , 13 → 5 et 12 → 6

On a alors

- Pour des cristaux hexagonaux :

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & & & \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & & & \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & & & \\ & & & C_{44} & & \\ & & & & C_{44} & \\ & & & & & \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \end{pmatrix}$$

Note : On retrouve le cas isotrope si  $C_{13} = C_{12}$ ,  $C_{33} = C_{11}$  et  $C_{44} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}$

- Pour des cristaux cubiques :

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & & & \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & & & \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & & & \\ & & & C_{44} & & \\ & & & & C_{44} & \\ & & & & & C_{44} \end{pmatrix}$$

Note : On retrouve le cas isotrope si  $C_{44} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}$

où  $\theta(x_3)$  est la fonction habituelle de Heaviside, égale à 1 pour  $x_3 > 0$ , nulle sinon. L'équation (A.1) peut alors être écrite sous la forme matricielle suivante :

$$L_S \cdot \vec{u} = 0 \quad (\text{A.3a})$$

avec

$$L_S = L^V + \theta(x_3) \cdot L_S^C \quad (\text{A.3b})$$

où  $\delta(x_3)$  est la fonction de Dirac, résultant de la dérivation de la fonction de Heaviside.  $L^V$  et  $L_S^C$  sont des matrices dont les éléments sont des opérateurs.  $\rho$  intervient dans  $L^V$  mais pas dans  $L_S^C$  :

$$L_{\alpha\mu}^V = -\delta_{\alpha\mu} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + C_{\alpha\beta\mu\nu} \partial_{\beta\nu}^2 \quad (\text{A.3c})$$

$$L_{S\alpha\mu}^C = C_{\alpha 3\mu\nu} \partial_{\nu} \quad (\text{A.3d})$$

où  $\partial_{\alpha}$  est l'opérateur de dérivation par rapport à la variable  $x_{\alpha}$  :  $\partial_{\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}$

(A.3) est encore équivalent à

$$L^V \cdot \vec{u} = 0 \quad x_3 < 0 \quad (\text{A.4a})$$

$$L_S^C \cdot \vec{u} = 0 \quad x_3 = 0 \quad (\text{A.4b})$$

(A.4a) est appelé équation matricielle du mouvement dans le volume (d'où la notation  $L^V$  pour la matrice qui caractérise le volume : v pour volume). (A.4b) exprime les conditions de contraintes à la surface libre  $x_3 = 0$  (d'où la notation  $L_s^C$ , c pour contraintes et s pour surface libre).

Les équations (A.4) montrent clairement que les équations du mouvement sont supposées valables uniformément jusqu'à l'extrême voisinage de la surface où elles sont remplacées par des conditions de contraintes aux limites.

Cette méthode permet d'obtenir les éléments  $u_\alpha$  ;  $\alpha = 1, 2, 3$

Certaines transformations sont cependant réalisées avant de résoudre l'équation (A.3), qui tirent avantage de certaines propriétés remarquables du système considéré, ici un substrat cristallin semi-infini, pour simplifier cette résolution. Ainsi outre la transformation de Fourier par rapport au temps, on peut également, eu égard à l'invariance du système considéré par toute translation parallèle à la surface  $x_3 = 0$ , opérer une transformation de Fourier sur  $\vec{k}_{//}$ , la composante parallèle à la surface du vecteur  $\vec{x}$ .

$$L_s(\vec{x}; t) = \int \frac{d^2 \vec{k}_{//}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i(\vec{k}_{//} \cdot \vec{x}_{//} - \omega t)} L_s(\vec{k}_{//} \omega | x_3) \quad (A.5)$$

où  $\vec{k}_{//} = k_1 x_1 + k_2 x_2$  est la composante parallèle à la surface d'un vecteur d'onde  $\vec{k}_{//}$  et  $\omega$  correspond à une pulsation. La résolution de l'équation (A.3) sous sa forme originale

$$L_s(\vec{x}; t) \cdot \vec{u}(\vec{x}; t) = 0 \quad (A.6)$$

devient alors équivalente à la résolution de l'équation

$$L_s(\vec{k}_{//} \omega | x_3) \cdot \vec{u}(\vec{k}_{//} \omega | x_3) = 0 \quad (A.7)$$

avec la correspondance

$$\vec{u}(\vec{x}; t) = \vec{u}(\vec{k}_{//} \omega | x_3) e^{i(\vec{k}_{//} \cdot \vec{x}_{//} - \omega t)} \quad (A.8)$$

Sachant de plus que dans certains cas (e.g. le cas trivial du substrat isotrope mais aussi le cas de la surface (0001) de cristaux hexagonaux) la surface du substrat est isotrope dans le cadre de la limite élastique où nous sommes situés, on peut opérer une rotation pour ramener le vecteur  $\vec{k}_{//}$  introduit précédemment en coïncidence avec l'axe  $\hat{x}_1$  :

$$\ell_s(\vec{k}_{//} | \omega | x_3) = S(\vec{k}_{//}) \cdot L_s(\vec{k}_{//} | \omega | x_3) \cdot S^{-1}(\vec{k}_{//}) \quad (\text{A.9})$$

où

$$S(\vec{k}_{//}) = \frac{1}{k_{//}} \begin{pmatrix} k_1 & k_2 & 0 \\ -k_2 & k_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

est une matrice de rotation. Dans (A.10),  $k_{//}$  est le module du vecteur  $\vec{k}_{//}$ .

Ainsi dans les cas où la surface étudiée est isotrope, on obtient :

$$\ell_s(\vec{k}_{//} | \omega | x_3) = \ell_s(k_{//} | \omega | x_3) \quad (\text{A.11})$$

i.e. la dépendance du lagrangien selon la direction de  $\vec{k}_{//}$  disparaît.

Tout comme  $L_s$ ,  $\ell_s$  peut être divisé en  $\ell^V$  et  $\ell^C$  sur le même modèle que (A.3b). Nous donnons dans les pages suivantes les matrices  $\ell^V$  et  $\ell^C$  pour des cristaux hexagonaux avec comme surface la surface (0001) qui est isotrope et pour des cristaux cubiques avec comme surface la surface (001) qui est anisotrope.

Eléments de matrices  $\ell^V$  et  $\ell^C_S$

- Pour des cristaux hexagonaux :

$$\ell^V = \begin{pmatrix} \rho\omega^2 - C_{11}k^2 // + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} & 0 & i(C_{13} + C_{44})k // \frac{d}{dx_3} & C_{44}k // & 0 & iC_{44}k // \\ 0 & \rho\omega^2 - C_{66}k^2 // + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} & 0 & 0 & C_{44} \frac{d}{dx_3} & 0 \\ i(C_{13} + C_{44})k // \frac{d}{dx_3} & 0 & \rho\omega^2 - C_{44}k^2 // + C_{33} \frac{d^2}{dx_3^2} & iC_{13}k // & 0 & C_{33} \frac{d}{dx_3} \end{pmatrix} ; \ell^C_S = \begin{pmatrix} C_{44}k // & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \frac{d}{dx_3} & 0 \\ iC_{13}k // & 0 & 0 & iC_{13}k // & 0 & C_{33} \frac{d}{dx_3} \end{pmatrix}$$

avec  $C_{66} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}$



- Pour des cristaux cubiques :

$$\begin{aligned}
 \rho\omega^2 - (C_{11} + \frac{\sigma}{2} \sin^2 2\theta)k_{//}^2 + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} &= \frac{\sigma}{4} \sin 4\theta k_{//} & i(C_{12} + C_{44})k_{//} \frac{d}{dx_3} &= 0 & C_{44} \frac{d}{dx_3} &= 0 & iC_{44}k_{//} &= 0 \\
 -\frac{\sigma}{4} \sin 4\theta k_{//}^2 &= \rho\omega^2 - (C_{44} - \frac{\theta}{2} \sin^2 2\theta)k_{//}^2 + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} & 0 &= 0 & 0 &= 0 & C_{44} \frac{d}{dx_3} &= 0 \\
 i(C_{12} + C_{44})k_{//} \frac{d}{dx_3} &= 0 & 0 &= 0 & iC_{12}k_{//} &= 0 & C_{11} \frac{d}{dx_3} &= 0 \\
 i(C_{12} + C_{44})k_{//} \frac{d}{dx_3} &= 0 & \rho\omega^2 - C_{44}k_{//}^2 + C_{11} \frac{d^2}{dx_3^2} &= 0 & iC_{12}k_{//} &= 0 & C_{11} \frac{d}{dx_3} &= 0
 \end{aligned}$$

avec  $\sigma = 2C_{44} + C_{12} - C_{11}$

$\theta$  est l'angle que fait le vecteur  $\vec{k}_{//}$  avec l'axe  $x_1$ .



A.1.2. Fonctions de Green \*\*

Il existe en fait une fonction que nous noterons  $D$ , dont la connaissance se révèle être, pour la déduction de nombreuses propriétés physiques du substrat cristallin, plus intéressante que celle du vecteur  $\vec{u}$ . Son obtention est à peu près similaire puisque sa définition est donnée par (comparer à (A.3) ou (A.6)) :

$$L_s(\vec{x}_1; t) \cdot D(\vec{x}, \vec{x}'; t-t') = \delta(\vec{x}-\vec{x}') \cdot \delta(t-t') \cdot Id_3 \quad (A.12)$$

$Id_3$  est l'opérateur identité dans l'espace vectoriel de dimension 3.

$D$  est par conséquent une matrice  $3 \times 3$ , c'est même plus exactement un tenseur d'ordre deux.

$D$  est appelée la fonction de Green du système défini par la matrice  $L_s$ .  $D$  est aussi parfois notée  $G$ . Les éléments  $D_{\alpha\beta}$  seront indifféremment appelés de la fonction de Green  $D$  ou, par métonymie, fonctions de Green.

Il est à nouveau possible de faire les transformations que nous avons déjà signalées :

$$D(\vec{x}, \vec{x}'; t-t') = \int \frac{d^2\vec{k}_{//}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i[\vec{k}_{//}(\vec{x}_{//}-\vec{x}'_{//}) - \omega(t-t')]} \vec{d}(\vec{k}_{//}, \omega | x_3, x'_3) \quad (A.13)$$

et

$$\vec{d}(\vec{k}_{//}, \omega | x_3, x'_3) = S(\vec{k}_{//}) \cdot D(\vec{k}_{//}, \omega | x_3, x'_3) \cdot S^{-1}(\vec{k}_{//}) \quad (A.14)$$

Les équations que nous avons donc finalement à résoudre sont (comparées à (A.4a) et (A.4b)) :

$$\mathcal{L}^V(\vec{k}_{//}, \omega | x_3, x'_3) \cdot \vec{d}(\vec{k}_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \delta(x_3 - x'_3) Id_3 \quad x_3, x'_3 > 0 \quad (A.15a)$$

$$\mathcal{L}_S^C(\vec{k}_{//}, \omega | x_3, x'_3) \cdot \vec{d}(\vec{k}_{//}, \omega | x_3, x'_3) = 0 \quad x_3 = 0 \quad (A.15b)$$

\*\* D'après George Green, physicien mathématicien anglais (1793-1841)

A.2. CAS D'UN SUBSTRAT RECOUVERT D'UNE COUCHE DEPOSEE

La configuration physique à laquelle nous nous référons désormais est la suivante (fig. A.1) :

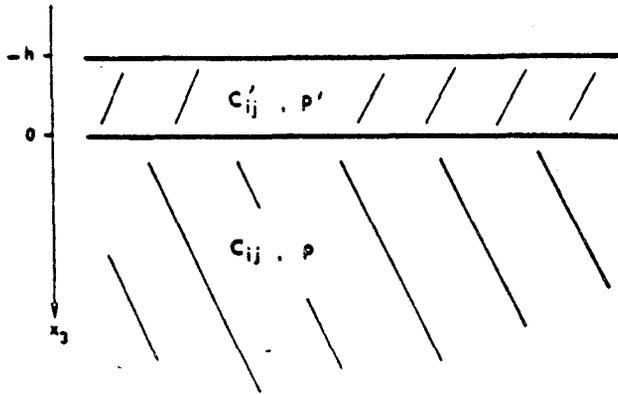


Fig. A.1. Représentation schématique du substrat recouvert d'une couche adsorbée. Chaque milieu est défini par ses constantes élastiques et sa densité.

Comme précédemment le substrat est défini spatialement par  $x_3 \geq 0$  et physiquement par des constantes élastiques notées  $C_{\alpha\beta}$  en notation condensée de Voigt et une densité  $\rho$ . Nous avons de plus une couche déposée  $M'$  qui occupe la région spatiale définie par  $-h \leq x_3 < 0$  et dont les constantes élastiques sont notées  $C'_{\alpha\beta}$  et la densité  $\rho'$ .

A.2.1. Equations générales

Il s'agit en fait simplement d'étendre les équations du paragraphe précédent au cas de la configuration représentée par la fig. A.1. Nous obtenons ainsi (comparer aux équations(A.15)) :

- les équations de mouvements dans les milieux M et M'

$$l^V \cdot d = \delta(x_3 - x'_3) Id_3 \quad x_3, x'_3 < 0 \quad (A.16a)$$

$$l'^V \cdot d' = \delta(x_3 - x'_3) Id_3 \quad -h < x_3, x'_3 < 0 \quad (A.16b)$$

- les équations de continuités des contraintes :

$$l_s^C \cdot d = l'_s{}^C \cdot d' \quad x_3 = 0 \quad (A.16c)$$

$$l'_s{}^C \cdot d' = 0 \quad x_3 = -h \quad (A.16d)$$

plus l'équation de continuité des déplacements :

$$d = d' \qquad x_3 = 0 \qquad (A.16e)$$

Les équations (A.16) permettent théoriquement de définir sans ambiguïtés les fonctions  $d$  et  $d'$ ,  $d$  étant définie par  $d = d(x_3 \geq 0, x'_3 \geq 0)$  et  $d'$  par  $d' = d'(-h \leq x_3 \leq 0, -h \leq x'_3 \leq 0)$ .

Un cas intéressant, tant expérimentalement que théoriquement, des couches déposées est le cas des couches minces. C'est donc ce cas que nous allons désormais examiner plus en détail en montrant qu'une simplification notable des équations (A.16) peut alors être obtenue.

### A.2.2. Cas d'une couche mince

Par couche mince nous entendons couche dont l'épaisseur  $h$  est telle que  $hk_{//} \ll 1$ .

#### A.2.2.1. Obtention des conditions effectives de contraintes en $x_3 = 0$

On peut montrer à partir des équations (A.16) que la fonction  $d$  peut être obtenue à partir des équations :

$$\ell^v \cdot d = \delta(x_3 - x'_3) Id_3 \qquad x_3, x'_3 < 0 \qquad (A.17a)$$

$$\ell_{sa}^d \cdot d = 0 \qquad x_3 = 0 \qquad (A.17b)$$

où  $\ell_s^c$ , au premier ordre par exemple en  $hk_{//}$  a la forme

$$\ell_{sa}^c = \ell_s^c + hM' \qquad (A.18)$$

$hM'$  est obtenue en réalisant un développement limité au premier ordre sur (A.16c) et (A.16d) et en effectuant ensuite quelques manipulations algébriques à l'aide de (A.16a) (A.16b) et (A.16e) pour aboutir à (A.17), (A.18). Cette démonstration a été faite la première fois sur des milieux isotropes [7]. Nous donnons à la page suivante les corrections de premier ordre  $hM'$  obtenues pour la surface (0001) des cristaux hexagonaux et pour la surface (001) des cristaux cubiques.

L'équation (A.17b) peut être interprétée comme étant l'expression de

Eléments de correction de premier ordre  
à ajouter aux matrices  $\ell_s^c$  pour modéliser  
la présence d'une couche adsorbée mince

---

- Pour les milieux hexagonaux

$$\begin{array}{rcccl}
 \rho' \omega^2 - C'_{11} - \frac{C'_{13}{}^2}{C'_{33}} k_{//}^2 & & 0 & & 0 \\
 hM' = h & 0 & \rho' \omega^2 - C'_{66} k_{//}^2 & & 0 \\
 & 0 & 0 & & \rho' \omega^2
 \end{array}$$

- Pour les milieux cubiques

$$\begin{array}{rcccl}
 \rho' \omega^2 - C'_{11} - \frac{C'_{12}{}^2}{C'_{11}} + \frac{\sigma'}{2} \sin^2 2\theta k_{//}^2 & & - \frac{\sigma'}{4} \sin 4\theta k_{//}^2 & & 0 \\
 hM' = h & - \frac{\sigma'}{4} \sin 4\theta k_{//}^2 & \rho' \omega^2 - C'_{44} + \frac{\sigma'}{2} \sin^2 2\theta k_{//}^2 & & 0 \\
 & 0 & 0 & & \rho' \omega^2
 \end{array}$$

conditions de contraintes effectives en  $x_3 = 0$ , ce qui veut dire que grâce à ces conditions de contraintes effectives, on peut désormais pour le calcul de  $d$  faire abstraction de la couche adsorbée.

A.2.2.2. Obtention de la fonction de Green statique ( $\omega = 0$ ) au premier ordre pour le cas hexagonal

Le cas statique correspond à  $\omega = 0$  si on considère les transformées de Fourier. Nous omettrons donc désormais l'écriture de  $\omega$  en convenant de la notation suivante  $d(k_{//}0|x_3x_3') \equiv d(k_{//}|x_3x_3')$ . La fonction de Green indépendante du temps a déjà été calculée par un calcul direct dans le cas où le substrat et la couche adsorbée sont des matériaux isotropes [7]. Nous proposons ici pour le cas hexagonal une méthode qui, au lieu de résoudre directement les équations (A.17) à l'aide d'une solution de forme tout à fait générale, utilise le fait que la fonction de Green pour un substrat hexagonal semi-infini à surface libre a déjà été calculée et que nous ne recherchons en fait ici qu'une correction de premier ordre due à une couche adsorbée d'épaisseur  $h$ .

Ecrivons la fonction de Green  $d$  sous la forme :

$$d = d^{(s)} + hk_{//}d^a \quad (A.19)$$

$$\text{avec } d^{(s)} = d^o + d^s \quad (A.20)$$

où  $d^o$  est la fonction de Green de volume,  $d^{(s)}$  la fonction de Green pour un substrat semi-infini et  $hk_{//}d^a$  la correction du premier ordre due à la couche déposée.

Nous constatons alors que dans notre nouvelle fonction  $d$ ,  $d^{(s)}$  est en fait déjà connue (cf. [33] et prendre  $\omega = 0$ , ou cf. [40]). Nous rappelons d'ailleurs ces éléments  $d_{\alpha\beta}^o$  et  $d_{\alpha\beta}^s$  à la fin de ce paragraphe. Il nous faut donc déterminer les éléments  $d_{\alpha\beta}^a$  à partir des équations (A.17). Or, compte-tenu des expressions  $l^v$ ,  $l_s^c$  et  $M$  relatives aux cristaux hexagonaux pour la surface (0001) qui est, rappelons-le, isotrope, les équations (A.17) donnent comme premier résultat que  $d_{12} = d_{21} = d_{23} = d_{32} = 0$ , ce qui permet de découpler le calcul de  $d_{22}$  d'une part et celui de  $d_{11}$  et  $d_{31}$  ou de  $d_{13}$  et  $d_{33}$  d'autre part. Signalons que ce découplage ne dépend pas de la restriction au cas statique faite ici et résulte en réalité de l'isotropie de la surface (0001) considérée et de l'exploitation qui en a été faite par la rotation (A.9).

Un tel découplage survient également dans le cas des cristaux isotropes. En raison de ce découplage, nous n'écrirons explicitement que les équations relatives à l'obtention des éléments  $d_{11}^a$  et  $d_{31}^a$  (rappelons effectivement que nous n'avons ici à déterminer que les éléments  $d_{\alpha\beta}^a$ , les éléments  $d_{\alpha\beta}^{(s)}$  étant déjà connus). L'obtention des éléments  $d_{13}^a$  et  $d_{33}^a$  se faisant par un traitement exactement similaire, nous ferons l'économie de cette répétition. Quant à l'obtention de  $d_{22}^a$ , nous verrons qu'elle est très rapide et très simple.

Compte-tenu du fait que  $d^{(s)}$  obéit à (A.15b), l'équation (A.17b) donne pour les éléments  $d_{11}$  et  $d_{31}$  :

$$\left[ i C_{13} k_{//} d_{11}^a + C_{33} \frac{d}{dx_3} d_{31}^a \right]_{x_3=0} = 0 \quad (\text{A.21a})$$

$$C_{44} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{11}^a + i k_{//} d_{31}^a \right]_{x_3=0} = k_{//} \left( C_{11}' - \frac{C_{13}'^2}{C_{33}'} \right) [d_{11}^{(s)}]_{x_3=0} \quad (\text{A.21b})$$

Remarquons que les coefficients  $C'_{ij}$  caractéristiques de la couche déposée n'interviennent que dans le membre de droite de l'équation (A.20b).

Maintenant,  $d_{11}$  et  $d_{31}$  obéissant à l'équation (A.17a) et  $d_{11}^a$  et  $d_{31}^a$  représentant des contributions de perturbation de surface qui doivent donc être négligeables lorsque  $x_3$  tend vers l'infini, on peut écrire  $d_{11}^a$  et  $d_{31}^a$  sous la forme

$$d_{11}^a(k_{//} | x_3 x_3') = A e^{-k_{//} \alpha_1 x_3} + B e^{-k_{//} \alpha_2 x_3} \quad (\text{A.22a})$$

$$d_{31}^a(k_{//} | x_3 x_3') = A' e^{-k_{//} \alpha_1 x_3} + B' e^{-k_{//} \alpha_2 x_3} \quad (\text{A.22b})$$

où  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  sont les solutions de (cf.[40])

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = \frac{C_{11} C_{33} - C_{13}^2 - 2 C_{13} C_{44}}{C_{33} C_{44}}, \quad \alpha_1^2 \alpha_2^2 = \frac{C_{11}}{C_{33}}, \quad \alpha_1 > \alpha_2 > 0 \quad (\text{A.23})$$

A, B, A' et B' sont des constantes par rapport à  $x_3$ .

L'équation (A.17a) impose en outre que A' soit proportionnel à A et B' à B, ce qui fait que (A.21a) impose alors que B soit proportionnel à A. En conséquence, le terme de gauche de l'équation (A.21b) est simplement proportionnel à A puisqu'il est pris en  $x_3 = 0$ . En continuant à exprimer les choses tout aussi formellement, nous pouvons dire qu'étant donnée l'expression de  $d_{11}^0$  et  $d_{11}^s$  (eq. (A.38b) et (A.39b)), l'élément  $[d_{11}^{(s)}(k_{//}|x_3 x_3')]$  qui intervient dans le membre de gauche de l'équation (A.21b) est  $x_3=0$  une simple combinaison linéaire de  $e^{-k_{//}\alpha_1 x_3}$  et  $e^{-k_{//}\alpha_2 x_3'}$ . Toute l'équation (A.21b) peut donc se réécrire sous la forme

$$A = \frac{1}{k_{//}} \left( C'_{11} - \frac{C'_{13}{}^2}{C'_{33}} \right) (A_1 e^{-k_{//}\alpha_1 x_3'} - B_1 e^{-k_{//}\alpha_2 x_3'}) \quad (A.24)$$

De cette façon,  $A_1$  et  $B_1$  sont des constantes dont il est clair qu'elles ne dépendent que des seuls  $C_{ij}$  caractéristiques du substrat. Comme nous allons le voir, il n'est pas utile d'en savoir davantage sur  $A_1$  et  $B_1$  pour obtenir  $d_{11}^a$  et  $d_{31}^a$ .

Compte-tenu en effet de la forme de A obtenue en (A.24) et de la proportionnalité de B avec A, il apparaît d'après (A.22a) que  $d_{11}^a$  peut être réécrit sous la forme

$$d_{11}^a(k_{//}|x_3 x_3') = \frac{1}{k_{//}} \left( C'_{11} - \frac{C'_{13}{}^2}{C'_{33}} \right) \left\{ a e^{-k_{//}\alpha_1 (x_3 + x_3')} + b e^{-k_{//}(\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x_3')} + c e^{-k_{//}(\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x_3')} + d e^{-k_{//}\alpha_2 (x_3 + x_3')} \right\} \quad (A.25)$$

A nouveau le résultat intéressant ici est la forme obtenue pour  $d_{11}^a$  et le fait que a, b, c et d sont des constantes qui ne dépendent que des  $C_{ij}$ . Nous allons maintenant nous attacher à voir comment ces coefficients a, b, c et d peuvent être déterminés. Le raisonnement que nous allons développer sera également applicable à  $d_{31}^a$  puisque un résultat semblable à (A.25) peut être obtenu pour  $d_{31}^a$ . Nous allons montrer que a, b, c et d peuvent être déterminés en disant qu'un milieu semi-infini peut en fait toujours être considéré comme étant la superposition d'un substrat et d'une couche déposée de même nature que le substrat, ce qui revient à prendre  $C'_{ij} = C_{ij}$  dans l'équation (A.24).

Considérons un milieu semi-infini M dont la surface se trouve en  $x_3 = 0$ .  
On a comme fonction de Green  $d_{11}$

$$d_{11}(k_{//} | x_3 x'_3) = d_{11}^{(s)}(k_{//} | x_3 x'_3) = d_{11}^0(k_{//} | x_3 - x'_3) + d_{11}^s(k_{//} | x_3 x'_3) \quad (A.26)$$

Si on effectue maintenant un déplacement de l'origine de l'axe  $x_3$  de  $-h$  tel que  $hk_{//} \ll 1$ , on obtient la nouvelle fonction de Green en remplaçant simplement dans la précédente  $x_3$  par  $x_3 + h$  et  $x'_3$  par  $x'_3 + h$ , ce qui donne, au premier ordre en  $hk_{//}$  :

$$d_{11}^{(s)}(k_{//} | x_3 + h, x'_3 + h) = d_{11}^{(s)}(k_{//} | x_3 x'_3) + hk_{//} \left[ \frac{\partial}{\partial \tilde{k}} d_{11}^{(s)}(k_{//} | x_3 + h, x'_3 + h) \right]_{\tilde{k}=0} \quad (A.27)$$

où nous avons introduit la nouvelle variable  $\tilde{k} \equiv hk_{//}$ .

Or on peut aussi dire que cette configuration est équivalente à celle d'un substrat recouvert d'une couche mince déposée dans le cas où la couche est de même nature que le substrat et ceci permet d'écrire la fonction de Green sous la forme de la somme

$$d_{11}^{(s)}(k_{//} | x_3 + h, x'_3 + h) = d_{11}^{(s)}(k_{//} | x_3 x'_3) + hk_{//} \left[ d_{11}^a(k_{//} | x_3 x'_3) \right]_{C'_{ij} = C_{ij}} \quad (A.28)$$

où  $\left[ d_{11}^a(k_{//} | x_3 x'_3) \right]_{C'_{ij} = C_{ij}}$  est donné par l'équation (A.25) en prenant  $C'_{ij} = C_{ij}$ .

En comparant les deux expressions obtenues (A.27) et (A.28) on en déduit :

$$\left[ d_{11}^a(k_{//} | x_3 x'_3) \right]_{C'_{ij} = C_{ij}} = \left[ \frac{\partial}{\partial \tilde{k}} d_{11}^{(s)}(k_{//} | x_3 + h, x'_3 + h) \right]_{\tilde{k}=0} \quad (A.29)$$

Explicitons les deux membres de cette égalité :

Le membre de gauche donne d'après (A.25)

$$\left[ d_{11}^a(k_{//} | x_3 x'_3) \right]_{C'_{ij} = C_{ij}} = \frac{1}{k_{//}} \left( C_{11} - \frac{C_{13}^2}{C_{33}} \right) \left\{ ae^{-k_{//} \alpha_1 (x_3 + x'_3)} + be^{-k_{//} (\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x'_3)} + ce^{-k_{//} (\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x'_3)} + de^{-k_{//} \alpha_2 (x_3 + x'_3)} \right\} \quad (A.30)$$

Le membre de droite quant à lui donne d'après (A.38b) et (A.39b)

$$\left[ \frac{\partial}{\partial k} d_{11}^{(s)}(k_{//} | x_3 + h, x'_3 + h) \right]_{k=0} = \frac{m_3}{k_{//}} \left\{ 2\alpha_1 A_{11} e^{-k_{//}\alpha_1(x_3+x'_3)} + \right. \\ \left. + (\alpha_1 + \alpha_2) A_{12} \left( e^{-k_{//}(\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x'_3)} + e^{-k_{//}(\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x'_3)} \right) + 2\alpha_2 A_{22} e^{-k_{//}\alpha_2(x_3+x'_3)} \right\} \quad (A.31)$$

où  $m_3, A_{11}, A_{22}, A_{12}, \alpha_1$  et  $\alpha_2$  sont définis en (A.41) - (A.46).

Les deux membres de droite des équations (A.30) et (A.31) sont donc égaux en raison de (A.29) et pour obtenir a, b, c et d, il suffit d'identifier un à un les coefficients des termes en exponentielle puisque ceux-ci forment une famille libre.

Il est d'autre part trivial de constater en comparant les expressions (A.25) et (A.30) que

$$d_{11}^a(k_{//} | x_3, x'_3) = \frac{1}{k_{//}} \Gamma \left[ d_{11}^a(k_{//} | x_3, x'_3) \right]_{C'_{ij} = C_{ij}} \quad (A.32)$$

où l'on a introduit comme notation :

$$\Gamma = \left( C'_{11} - \frac{C'_{13}{}^2}{C'_{33}} \right) / \left( C_{11} - \frac{C_{13}{}^2}{C_{33}} \right). \quad (A.33)$$

Nous obtenons finalement :

$$d_{11}^a(k_{//} | x_3, x'_3) = \frac{m_3}{k_{//}} \Gamma \left\{ 2\alpha_1 A_{11} e^{-k_{//}\alpha_1(x_3+x'_3)} + (\alpha_1 + \alpha_2) A_{12} e^{-k_{//}(\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x'_3)} + \right. \\ \left. + e^{-k_{//}(\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x'_3)} + 2\alpha_2 A_{22} e^{-k_{//}\alpha_2(x_3+x'_3)} \right\}. \quad (A.34)$$

Comme nous l'avons déjà dit, on peut obtenir de la même façon  $d_{31}^0$  en reprenant le raisonnement au niveau de l'équation (A.25) et  $d_{13}^a$  et  $d_{33}^a$  en reprenant au niveau des équations (A.21). Pour  $d_{22}^a$ , l'obtention est plus rapide. L'équation analogue à (A.21) est :

$$C_{44} \left[ \frac{d}{dx_3} d_{22}^a \right]_{x_3=0} = k_{//} \frac{C'_{66}}{C_{44}} \left[ d_{22}^{(s)} \right]_{x_3=0} \quad (A.35)$$

On postule alors  $d_{22}^a$  de la forme

$$d_{22}^a (k_{//} | x_3 x_3') = \frac{1}{k_{//}} A e^{-k_{//} \alpha x_3} \quad (A.36)$$

où  $\alpha$  est la racine positive de

$$\alpha^2 = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}} \quad (A.37)$$

Il suffit alors de résoudre directement (A.35),  $d_{22}^{(s)}$  étant donné par (A.38a) et (A.39a). On obtient ainsi la valeur de A qu'il suffit de remplacer dans (A.36). Nous donnons le résultat à la page suivante, dans la liste des  $d_{\alpha\beta}$ , équation (A.40a) et (A.49). Notons que  $\Lambda$  (A.49) est l'équivalent dans (A.40a) de  $\Gamma$  dans (A.32).

Liste des éléments  $d_{\alpha\beta} (k//|x_3x_3')$

Nous rappelons d'abord les éléments  $d_{\alpha\beta}^o$  et  $d_{\alpha\beta}^s$  et nous donnons ensuite les résultats obtenus pour les  $d_{\alpha\beta}^a$  :

$$d_{22}^o = -\frac{1}{2k//C_{44}\alpha} e^{-k//\alpha|x_3-x_3'|} \quad (\text{A.38a})$$

$$d_{11}^o = \frac{1}{2k//C_{44}(\alpha_1^2 - \alpha_2^2)} \left\{ \frac{1}{\alpha_1} \left( \frac{C_{44}}{C_{33}} - \alpha_1^2 \right) e^{-k//\alpha_1|x_3-x_3'|} - \frac{1}{\alpha_2} \left( \frac{C_{44}}{C_{33}} - \alpha_2^2 \right) e^{-k//\alpha_2|x_3-x_3'|} \right\} \quad (\text{A.38b})$$

$$d_{13}^o = \frac{-i}{2k//C_{44}(\alpha_1^2 - \alpha_2^2)} \frac{C_{13} + C_{44}}{C_{33}} \left[ e^{-k//\alpha_1|x_3-x_3'|} - e^{k//\alpha_2|x_3-x_3'|} \right] \text{sgn}(x_3 - x_3') \quad (\text{A.38c})$$

$$d_{31}^o = d_{13}^o \quad (\text{A.38d})$$

$$d_{33}^o = \frac{1}{2k//C_{44}(\alpha_1^2 - \alpha_2^2)} \left\{ \frac{1}{\alpha_1 C_{33}} (C_{11} - \alpha_1^2 C_{44}) e^{-k//\alpha_1|x_3-x_3'|} - \frac{1}{\alpha_2 C_{33}} (C_{11} - \alpha_2^2 C_{44}) e^{-k//\alpha_2|x_3-x_3'|} \right\} \quad (\text{A.38e})$$

$$d_{22}^s = -\frac{1}{2k//C_{44}\alpha} e^{-k\alpha(x_3+x_3')} \quad (\text{A.39a})$$

$$d_{11}^s = -\frac{m_3}{k//} \left\{ A_{11} e^{-k//\alpha_1(x_3+x_3')} + A_{12} \left[ e^{-k//(\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x_3')} + e^{-k//(\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x_3')} \right] + A_{22} e^{-k//\alpha_2(x_3+x_3')} \right\} \quad (\text{A.39b})$$

$$d_{13}^s = -i \frac{\pi_3}{k_{//}} \left\{ \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} A_{12} e^{-k_{//} \alpha_1 (x_3 + x_3')} + \frac{2\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \left[ A_{11} e^{-k_{//} (\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x_3')} + A_{22} e^{-k_{//} (\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x_3')} \right] + \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} A_{12} e^{-k_{//} \alpha_2 (x_3 + x_3')} \right\} \quad (\text{A.39c})$$

$$d_{31}^s = i \frac{\pi_3}{k_{//}} \left\{ \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} A_{12} e^{-k_{//} \alpha_1 (x_3 + x_3')} + \frac{2\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \left[ A_{22} e^{-k_{//} (\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x_3')} + A_{11} e^{-k_{//} (\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x_3')} \right] + \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} A_{12} e^{-k_{//} \alpha_2 (x_3 + x_3')} \right\} \quad (\text{A.39d})$$

$$d_{33}^s = -\frac{\pi_3}{k_{//}} \alpha_1 \alpha_2 \left\{ A_{22} e^{-k_{//} \alpha_1 (x_3 + x_3')} + A_{12} \left[ e^{-k_{//} (\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x_3')} + e^{-k_{//} (\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x_3')} \right] + A_{11} e^{-k_{//} \alpha_2 (x_3 + x_3')} \right\} \quad (\text{A.39e})$$

$$d_{22}^a = \frac{1}{k_{//}} \frac{1}{C_{44}} \Lambda e^{-k_{//} a (x_3 + x_3')} \quad (\text{A.40a})$$

$$d_{11}^a = \frac{1}{k_{//}} \pi_3 \Gamma \left\{ 2\alpha_1 A_{11} e^{-k_{//} \alpha_1 (x_3 + x_3')} + (\alpha_1 + \alpha_2) A_{12} \left[ e^{-k_{//} (\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x_3')} + e^{-k_{//} (\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x_3')} \right] + 2\alpha_2 A_{22} e^{-k_{//} \alpha_2 (x_3 + x_3')} \right\} \quad (\text{A.40b})$$

$$d_{13}^a = i \frac{1}{k_{//}} \pi_3 \Gamma \left\{ \alpha_1 (\alpha_1 + \alpha_2) A_{12} e^{-k_{//} \alpha_1 (x_3 + x_3')} + 2\alpha_1 \alpha_2 \left[ A_{11} e^{-k_{//} (\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x_3')} + A_{22} e^{-k_{//} (\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x_3')} \right] + \alpha_2 (\alpha_1 + \alpha_2) A_{12} e^{-k_{//} \alpha_2 (x_3 + x_3')} \right\} \quad (\text{A.40c})$$

$$d_{31}^a = -i \frac{1}{k_{//}} \pi_3 \Gamma \left\{ \alpha_1 (\alpha_1 + \alpha_2) A_{12} e^{-k_{//} \alpha_1 (x_3 + x_3')} + 2\alpha_1 \alpha_2 \left[ A_{22} e^{-k_{//} (\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x_3')} + A_{11} e^{-k_{//} (\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x_3')} \right] + \alpha_2 (\alpha_1 + \alpha_2) A_{12} e^{-k_{//} \alpha_2 (x_3 + x_3')} \right\} \quad (\text{A.40d})$$

$$c_{33}^a = \frac{1}{k_{//}} m_3 \Gamma \alpha_1 \alpha_2 \left\{ 2\alpha_1 A_{22} e^{-k_{//} \alpha_1 (x_3 + x_3')} + (\alpha_1 + \alpha_2) A_{12} \left[ e^{-k_{//} (\alpha_1 x_3 + \alpha_2 x_3')} + e^{-k_{//} (\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x_3')} \right] + 2\alpha_2 A_{11} e^{-k_{//} \alpha_2 (x_3 + x_3')} \right\} \quad (\text{A.40e})$$

où sont utilisées les notations suivantes :

$$m_3 = \frac{1}{2(\alpha_1 + \alpha_2)(\alpha_1 - \alpha_2)^2 (C_{11} C_{33} - C_{13}^2)} \quad (\text{A.41})$$

$$A_{11} = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\alpha_1 C_{33}} (C_{13} + \alpha_1^2 C_{33})^2 \quad (\text{A.42})$$

$$A_{22} = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\alpha_2 C_{33}} (C_{13} + \alpha_2^2 C_{33})^2 \quad (\text{A.43})$$

$$A_{12} = -\frac{2}{C_{33}} (C_{13} + \alpha_1^2 C_{33})(C_{13} + \alpha_2^2 C_{33}) \quad (\text{A.44})$$

$\alpha_1$  et  $\alpha_2$  étant les solutions positives de

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = \frac{C_{11} C_{33} - C_{13}^2 - 2C_{13} C_{44}}{C_{33} C_{44}} \quad (\text{A.45})$$

$$\alpha_1^2 \alpha_2^2 = \frac{C_{11}}{C_{33}} \quad (\text{A.46})$$

et  $\alpha$  est la racine carrée de  $\alpha^2 = \frac{C_{11} - C_{12}}{2C_{44}}$  (A.47)

$$\Gamma = \frac{C_{11}^i - C_{13}^i{}^2 / C_{33}^i}{C_{11} - C_{13}^2 / C_{33}} \quad (\text{A.48})$$

$$\Lambda = \frac{C_{11}^i - C_{12}^i}{C_{11} - C_{12}} \quad (\text{A.49})$$



## BIBLIOGRAPHIE

- [1] E.DIEULESAINT et D.ROYER : Ondes élastiques dans les solides (Masson et Cie, 1974), dernier chapitre : Applications.
- [2] H.F.TIERSTEN, J. Appl. Phys. 40 (1969), 770.
- [3] L.M.BREKHOVSKIKH : Waves in Layered Media (Academic Press, 1980).
- [4] S.V.BOGDANOV, M.D.LEVIN and I.B.YAKOUKIN, 1969.
- [5] G.W.FARNELL, dans Acoustic Surface Waves, Topics in Applied Physics, vol. 24, Ed. A.A.Olivier (1978), p. 13
- [6] B.A.AULD, dans : Acoustic Fields and Waves in Solids, vol. 2 (Wiley, 1973) ch. 12
- [7] B.DJAFARI-ROUHANI, L.DOBZYNSKI, V.R.VELASCO and F.GARCIA-MOLINER, Surface Sci. 110 (1981), 129.
- [8] J.POULIQUEN, M.DEPOORTER and A.DEFEBVRE, dans Proc. 4th Intern. Conf. on Solid Surfaces, Cannes, 1980 (Le Vide, Les Couches Minces 801 Suppl. vol. 1 (1980), 116).
- [9] J.R.SANDERCOCK, Solid State Commun. 26 (1978), 547.  
R.KRAGLER, Solid State Commun. 35 (1980), 428, et les références citées.
- [10] G.W.FARNELL and L.E.ADLER : "Elastic Wave Propagation in thin layers", dans Physical Acoustics, vol. 9, Ed. W.P.Mason et R.N.Thurston (Academic Press, N.Y. 1972) p. 35 (essentiellement p. 109 sqq.)
- [11] A.A.MARADUDIN et D.L.MILLS, Ann. Phys. (NY) 100 (1976) 262.
- [12] B.DJAFARI-ROUHANI and L.DOBZYNSKI, Surface Sci. 61 (1976), 521.
- [13] V.R.VELASCO and F.GARCIA-MOLINER, J.Phys.C. : Solid St. Phys. 13 (1980)
- [14] B.I.BENNETT, A.A.MARADUDIN and L.R.SWANSON, Ann. Phys. (NY) 71 (1972) 357.  
R.LAUDON, Phys. Rev. Lett. 40 (1978) 581 et J.Phys.C. : Solid St. Phys. 47 (1978), 2623.
- [15] F.GARCIA-MOLINER, Ann. Phys. 2 (1977), 179.
- [16] V.R.VELASCO et F.GARCIA-MOLINER, à paraître.
- [17] D.J.BACON, Phys. Status Solidi (b) 50 (1972), 607.
- [18] B.MICHEL, Phys. Status Solidi (b) 81 (1977), 1587.
- [19] A.A.MARADUDIN and R.F.WALLIS, Surface Sci. 91 (1980), 423.
- [20] R.F.WALLIS, A.A.MARADUDIN, L.DOBZYNSKI and B.DJAFARI-ROUHANI, Le Vide, Les Couches Minces 201, Suppl. Vol. 1 (1980) 50.
- [21] B.DJAFARI-ROUHANI, L.DOBZYNSKI, A.A.MARADUDIN and R.F.WALLIS, Surface Sci. 91 (1980), 618.
- [22] B.MICHEL, Phys. Status Solidi (b) 89 (1978), K179.
- [23] K.H.LAU et W.KOHN, Surface Science 65 (1977), 607.

- [24] A.M. STONEHAM, *Solid State Commun.*, 24, (1977), 425.
- [25] K.H. LAU, *Solid State Commun.*, 28, (1978), 757.
- [26] K.H. LAU, *Solid State Commun.*, 34, (1980), 347.
- [27] J. LOPEZ and G. ALLAN, *Surface Sci.*, 103, (1981), 456
- [28] G. LEIBFRIED and N. BREUER, dans *Point Defects in Metals*, Vol. I (Springer, Berlin, 1978) p. 145.
- [29] D. SINGH and Y.R. VARSHNI, *Phys. Rev. B* 24 (1981), 4340.
- [30] R.F. WALLIS, A.A. MARADUDIN and L. DOBRZYNSKI, *Phys. Rev.* B15 (1977), 5681.
- [31] B. DJAFARI-ROUHANI et L. DOBRZYNSKI, *Solid State Commun.*, 20 (1976), 1029.
- [32] J.M. RICHARDSON, *J. Appl. Phys.*, 48 (1977), 498.
- [33] J. ROUSSEAU, thèse de 3ème Cycle, Université de Lille I, 30 Mars 1979.  
J. ROUSSEAU, J. POULIQUEN et A. DEFEBVRE, *Revue d'Acoustique*, 56 (1981), 11.
- [34] G. HAW, J. POULIQUEN et A. DEFEBVRE, 11ème Congrès International d'Acoustique, Paris, Juillet 1983.
- [35] L. DOBRZYNSKI and A.A. MARADUDIN, *Phys. Rev.* B14, (1976), 2200.
- [36] V.R. VELASCO and B. DJAFARI-ROUHANI, *Phys. Rev.* B26 (1982), 1929.
- [37] V.R. VELASCO, O. HARDOUIN DUPARC and B. DJAFARI-ROUHANI, *Surface Sci.*, 114 (1982), 574.
- [38] E. SANZ-VELASCO, O. HARDOUIN DUPARC and V.R. VELASCO, Vth European Conference on Surface Science, Gand, Août 1982.
- [39] O. HARDOUIN DUPARC et B. DJAFARI-ROUHANI, *Surface Sci.*, 121 (1982) (à paraître) 1.
- [40] A.A. MARADUDIN, R.F. WALLIS and A.G. EGUILUZ, dans *Statistical Mechanics and Statistical Methods in Theory and Applications* (Plenum Publishing Company, 1977), 371. (Dans cet article, il y a un facteur 1/2 en trop dans l'éq. (4.8)).
- [41] B. DJAFARI-ROUHANI et O. HARDOUIN DUPARC, *Surface Sci.*, 121 (1982) (à paraître) 1.
- [42] A.G. EGUILUZ and A.A. MARADUDIN, Technical Report N° 81-11, Department of Physics, U.C.I., *Phys. Rev. B* (à paraître).
- [43] A.G. EGUILUZ and A.A. MARADUDIN, Technical Report N° 80-85, Department of Physics, U.C.I., *Phys. Rev. B* (à paraître).
- [44] O. HARDOUIN DUPARC and A.A. MARADUDIN, Third Conference on vibrations at surfaces, Asilomar, September 1982.
- [45] J. SAPRIEL, B. DJAFARI-ROUHANI and L. DOBRZYNSKI, Vth European Conference on Surface Science, Gand, Août 1982.
- [46] B. DJAFARI-ROUHANI, L. DOBRZYNSKI and O. HARDOUIN DUPARC, Third International Conference on vibrations at surfaces, Asilomar, September 1982.
- [47] L.D. LANDAU and E.M. LIFSCHITZ, *Theory of Elasticity* (Pergamon Press 1959) p. 12.

## RÉSUMÉ

Ce travail a pour objet l'étude dans le cadre de la limite élastique de l'influence d'une ou de plusieurs couches superficielles sur quelques propriétés dynamiques et statiques de surfaces réelles.

On a ainsi considéré les surfaces (0001) des milieux hexagonaux et les surfaces (001) des milieux cubiques.

Les propriétés physiques étudiées sont :

- 1) la dispersion des modes de surface en fonction de l'épaisseur  $h$  de la couche superficielle,
- 2) la contribution de l'effet de ripples au spectre de la diffusion Brillouin pour  $h$  faible,
- 3) l'énergie élastique d'interaction d'un défaut ponctuel du substrat avec la surface,
- 4) l'énergie élastique d'interaction mutuelle entre deux défauts ponctuels du substrat et
- 5) les déplacements carrés moyens des atomes du substrat.

L'étude des propriétés 3, 4 et 5 a été faite pour les cristaux hexagonaux recouverts d'une couche mince.

L'influence d'une couche a été traitée par l'écriture de conditions aux limites effectives à la surface du substrat. Ce procédé a été généralisé au cas de plusieurs couches superficielles d'épaisseur totale mince.

Le formalisme utilisé est celui des fonctions de Green.

### MOTS CLÉS :

- Onde acoustique de surface
- Diffusion Brillouin
- Défaut ponctuel
- Energie élastique
- Surface. Inhomogénéité