

50376
1989
241

50376
1989
241

N° d'ordre 433

THESE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES
DE LILLE FLANDRES ARTOIS

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

en

SCIENCES DES MATERIAUX

par

Alfonso RODRIGUEZ



**PHONONS DANS LES SUPERRESEAUX
A N - COUCHES**

Soutenue le 22 novembre 1989 devant la Commission d'Examen

R. FOURET,	Professeur Université Lille Flandres Artois,	Président
B. DJAFARI-ROUHANI,	Professeur Université de Mulhouse,	Rapporteur
M. MORE,	Professeur Université Lille Flandres Artois,	Rapporteur
H. FONTAINE,	Professeur Université Lille Flandres Artois,	Examineur
J. MENDIALDUA,	Professeur Université de Mérida (Venezuela),	Examineur
L. DOBRZYNSKI,	Directeur de recherche au C.N.R.S.,	Directeur de thèse

*A MA MERE VICTORIA
A MA FEMME ESTILITA
A MON FILS ADOLFO
ET A MES FRERES ET SOEUR
ROSENDO, URIEL, MIGUEL ET ESPERANZA.*

AGRADECIMIENTOS

Ce travail a été effectué dans le cadre du programme d'échange scientifique réalisé entre l'Université des Sciences et Techniques de Lille, Flandres Artois, Laboratoire de Dynamique des Cristaux Moléculaires (U.A. BO1), et la Universidad de los Andes, en Mérida (Venezuela), Laboratorio de Física de Superficies.

Agradezco altamente al prof. Sr. H.FONTAINE, Director del Laboratorio de Dinámica de Cristales Moleculares, por haberme aceptado en su laboratorio, por su colaboración prestada y por haberme hecho el honor de participar en el jurado examinador.

Agradezco muy sinceramente al Prof.Sr. R.FOURET por haberme hecho el honor de presidir el jurado examinador de esta tesis.

Agradezco profundamente al Prof. Sr.L.DOBRZYNSKI, por toda su colaboración, por haberme aceptado como su discípulo y le manifiesto mi mayor admiración y respeto por su calidad intelectual y humana, digna de imitar.

Agradezco profundamente al Prof. Sr.J.MENDIALDUA, por todo su esfuerzo y apoyo moral, por su orientación y aporte intelectual que me dio, lo cual facilitó la culminación de este trabajo, y por su participación en el jurado.

Agradezco altamente a los Profesores. Sres. B.DJAFARI-ROUHANI y M.MORE, por haberme hecho el honor de juzgar y hacer los reportes de esta tesis y por su participación en el jurado examinador.

Agradezco altamente al Sr.D.J.LOCKWOOD, investigador del National Research Council de Canada, por habernos aportado los datos de Espectroscopia Raman para su interpretación.

Agradezco a todos los miembros del Laboratorio de Dinámica de Cristales Moleculares por su hospitalidad y atención que me han brindado durante las estadias realizadas.

A mis compañeros del grupo de Física de Superficies, F.RUEDA S.RASSIAS, R.CASANOVA, P.HOFFMANN y J.S.PARIS, les agradezco todo su apoyo y colaboración prestada.

A los Profesores ; Sra. T.SZMACKA y Sr. A.NOQUERA les agradezco altamente sus orientaciones ,lo cual me animó para iniciar este trabajo.

Al Profesor Sr. A.LOPEZ ,por sus orientaciones en espectroscopía Raman, y al Profesor Sr. H.TIROIDE, por su ayuda con la gramática francesa, les doy mi agradecimiento.

A los Sres. J.M. RAFFAUD y S.FAUQUEMBERGUE ,por la colaboración en los gráficos y la reproducción de este trabajo, les doy mis mas sinceras gracias.

Finalmente, a las autoridades de: C.N.R.S. (Francés), al C.O.N.I.C.I.T. (Venezolano) , al C.D.C.H.T y a la Comisión de postgrado de la Universidad de los Andes, les agradezco altamente el apoyo que dieron al programa de intercambio, lo cual permitió concluir este trabajo.

TABLE DE MATIERES

	PAGE
INTRODUCTION GENERALE	03
CHAPITRE I	
LES NOTIONS GENERALES	
I.1.- Introduction.	07
I.2.- Superréseaux à N-couches.Definition.	07
I.3.- Ondes élastiques.	09
I.4.- Vibration de Réseau.Phonons.	21
I.5.- Théorie de Réponse des Interfaces.	31
CHAPITRE II	
SUPERRESEaux A N-COUCHES.CAS DISCRET.	
II.1.- Introduction	39
II.2.- Modèle,hypothèses et notation.	39
II.3.- Résumé des notations employées.	45
II.4.- Résultats.	50
II.5.- Interface Response Theory of Phonons in N-layered Superlattices (publication).	51
II.6.- Theory of Phonons in 3-layered and 4-layered Superlattices (publication).	55
CHAPITRE III	
SUPERRESEaux A N-COUCHES.CAS CONTINU.	
III.1.- Introduction.	65
III.2.- Modèle,hypothèses et notation.	66
III.3.- Opérateur $\overset{\leftrightarrow}{H}_{oi}$ et fonction Réponse $\overset{\leftrightarrow}{G}_{oi}$.	72
III.4.- Résultats.	82
III.5.- Surface Transverse Elastic Wave in N-layer Superlattices (Publication).	83
III.6.- Appendice B de la publication.	91

CHAPITRE IV
L'APPLICATION

IV.1.-	Introduction.	105
IV.2.-	Phonons longitudinaux et transversaux.	
	IV.2.1-Relations de dispersion et leurs conséquences.	106
	IV.2.2-Mini-Zone réduite, Folding, Gaps.	112
	IV.2.3-Branches Acoustiques Pliées transversales (FTA) et longitudinales (FLA).	116
IV.3.-	Dispersion Raman dans les superréseaux à 3 et 4-couches.	122
	IV.3.1-Echantillons.	122
	IV.3.2-Expérience Raman.Conditions et résultats.	124
IV.4.-	Interprétation des résultats.	132
IV.5.-	Discussion.	153
	CONCLUSION.	157
	BIBLIOGRAPHIE	159

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

La synthèse de nouveaux matériaux, caractérisés par de propriétés semiconductrices, supraconductrices, ayant une haute résistance à l'usure, etc. a été une conséquence directe des nombreux travaux théoriques et expérimentaux, menés à terme ces 50 dernières années. Une attention plus spéciale a été dévolue aux matériaux semiconducteurs, aux céramiques, aux nouveaux alliages et aux matériaux composites.

L'emploi des multicouches faites de différents matériaux, pour améliorer certaines propriétés (ex: haute réflectivité dans les interféromètres de Fabry-Perot [1]) et produire de nouveaux dispositifs (ex: lasers solides [2]), a été fréquent depuis des années. Cependant l'étude des propriétés spécifiques (vibrationnelles, électroniques, etc:), dans ces matériaux composites a commencé récemment.

L'étude théorique des propriétés vibrationnelles dans les matériaux composites multilamellaires et plus particulièrement superréseaux, à l'aide de la Théorie Générale de Réponse des Interfaces est le but du présent travail. Cette théorie mise au point récemment par L. DOBRZYNSKI [11,12], a permis d'arriver à des résultats analytiques pour les relations de dispersion des phonons dans les superréseaux à 3 et 4-couches.

Dans le chapitre I sont présentées brièvement les notions générales : de la théorie de l'élasticité (milieu continu infini), des vibrations dans les milieux cristallins (milieu discret infini), et de la théorie de Réponse des Interfaces.

Dans le chapitre II on présente un modèle simple de superréseau à N-couches pour les milieux discrets à structure cubique simple. Leurs propriétés vibrationnelles sont étudiées en utilisant la Théorie de Réponse des Interfaces [11], et les calculs et les résultats (relations de dispersion pour les

superréseaux à 3 et 4-couches) sont présentés dans deux publications annexes.

Dans le chapitre III on présente un modèle de superréseau à N-couches dans l'approximation des milieux continus, et l'on étudie la propagation des ondes élastiques transverses en utilisant la Théorie de Réponse des Interfaces [12]. Les calculs et les résultats (relations de dispersion pour les superréseaux à 3 et 4-couches) sont donnés dans une publication annexe.

Finalemment dans le chapitre IV on présente quelques conséquences découlant des relations de dispersion pour les phonons dans le cas continu. Ensuite on fait une comparaison entre nos résultats théoriques et les résultats expérimentaux des phonons acoustiques, obtenus par spectroscopie Raman (D.A. Lockwood, Ottawa, Canada).

CHAPITRE I
LES NOTIONS GENERALES .

I. INTRODUCTION

L'étude des phonons dans les superréseaux à N-couches, pour les cas discrets et continus, constitue le but de ce travail. Cependant vu que les superréseaux sont un arrangement de différents matériaux, chacun ayant des propriétés physiques spécifiques, et que ces propriétés déterminent celles de l'ensemble du système composite, il est nécessaire d'abord de connaître les propriétés individuelles de chaque composant; notamment, celles liées aux ondes élastiques dans les milieux isotropes et continus, aux vibrations dans les milieux cristallins et aux propriétés dynamiques dérivées.

Ce chapitre donne d'abord une définition générale des superréseaux à N-couches, puis aborde les aspects généraux de la dynamique de propagation des ondes dans les milieux continus, ou cristallins à structure cubique dans l'approximation de grande longueur d'onde.

Nous esquissons, très brièvement, la théorie générale qui permet l'obtention de la relation de dispersion pour les phonons dans les superréseaux à N-couches, en mettant l'accent sur les équations fondamentales et la méthodologie de leur application.

I.1.- SUPERRESEaux A N-COUCHES. DEFINITION.

On définit de façon générale les superréseaux, comme un matériau composite avec une structure multilamellaire périodique, où chaque super-cellule unité (Fig.I.1) est constituée par N-couches de i matériaux différents, cela signifie qu'un superréseau à N-couches est un matériau de périodicité définie construit en répétant la super-cellule dans l'espace ($-\infty < z < \infty$). La variable z indique la direction de croissance du superréseau. Chaque lame de matériau i et d'épaisseur d_i s'étend infiniment dans le plan (x,y) ; ces lames s'empilent l'une sur l'autre pour constituer la super-cellule unité. Cette

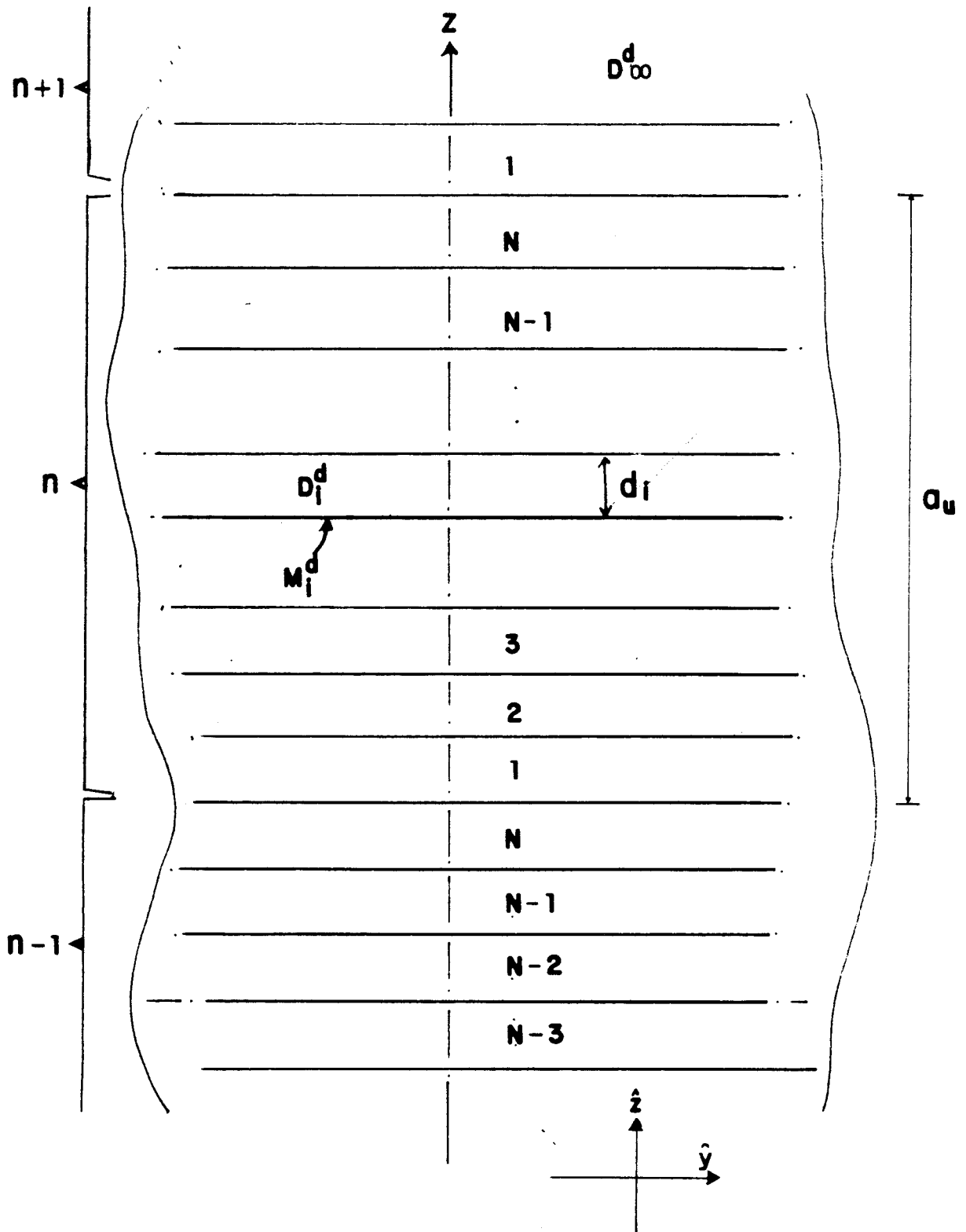


Figure I.1. Modèle de superréseau à N-Couches.

unité de base a un paramètre de réseau défini comme:

$$a_u \equiv \sum_{i=1}^N d_i \quad (1)$$

Le volume du superréseau constitue le domaine de définition D_∞ qui est formé par l'ensemble de tous les sous-domaines D_i définis pour chaque matériau i , plus l'ensemble des sous-domaines M_i qui intègrent l'espace M des interfaces.

C'est-à-dire:

$$D_\infty = \left\{ (\cup D_i) \cup (\cup M_i) \right\} \quad (2)$$

Les modèles des superréseaux utilisés pour le déroulement du travail dépendent du caractère continu ou discret de la matière; donc, une définition spécifique pour chaque approche sera présentée dans les chapitres correspondants.

I.2. - ONDES ELASTIQUES

La propagation des ondes élastiques dans les milieux infinis est déterminée par les caractéristiques et les propriétés du milieu.

Nous allons mentionner brièvement les notions de dynamique de propagation des ondes dans l'approximation des milieux continus, c'est-à-dire dans les matériaux pour lesquels la longueur d'onde λ est beaucoup plus grande que le paramètre du réseau.

Dans la théorie de l'élasticité, dans l'hypothèse des petites déformations (Loi de Hooke), et supposant les forces extérieures

appliquées au élément de volume négligables, on obtient pour l'expression de la force \vec{F} par unité de volume, due aux forces des contraintes appliquées sur la surface[3] :

$$F_{\alpha} = \sum_{\beta} \frac{\partial T_{\alpha\beta}}{\partial x_{\beta}} \quad (3)$$

où F_{α} est la composante de la force par unité de volume, $T_{\alpha\beta}$ est le tenseur des contraintes, α et $\beta = 1, 2, 3$.

En supposant des conditions isothermes, et des forces extérieures nulles, on peut déduire que les tenseurs des contraintes et des déformations pures auxquelles est soumis le corps sont linéaires et reliés par l'équation:

$$T_{\alpha\beta} = \sum_{\mu\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} e_{\mu\nu} \quad (4)$$

où $C_{\alpha\beta\mu\nu}$, $e_{\mu\nu}$ sont les tenseurs des constantes élastiques et des déformations respectivement. Les équations (3) et (4) permettent d'obtenir l'équation fondamentale de la dynamique pour un milieu élastique en considérant uniquement son isotropie ou la condition cristalline.

A un milieu isotrope, on associe un tenseur isotrope de constantes élastiques et on démontre [4] que

$$C_{\alpha\beta\mu\nu} = a \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} + b \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} + c \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} \quad (5)$$

a, b, c étant constants.

Il est aussi possible d'écrire:

$$C_{\alpha\beta\mu\nu} = \lambda \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} + \mu (\delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} + \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu}) \quad (6)$$

avec λ et μ les coefficients de Lamé

Ceci permet d'écrire le tenseur des contraintes comme

$$T_{\alpha\beta} = \lambda e_{\nu\nu} \delta_{\alpha\beta} + 2\mu e_{\alpha\beta} \quad (7)$$

D'autre part, le tenseur des déformations est une fonction qui dépend des variations de la fonction de déplacement local

$$e_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial U_{\alpha}}{\partial X_{\beta}} + \frac{\partial U_{\beta}}{\partial X_{\alpha}} \right] \quad (8)$$

où U_{α} , U_{β} sont les composants du déplacement local pour les directions α , β .

L'équation fondamentale de la dynamique pour les milieux élastiques isotropes est facilement obtenue à partir des équations (7) et (3):

$$F_{\alpha} = \mu \sum_{\beta} \frac{\partial^2 U_{\alpha}}{\partial X_{\beta}^2} + (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial X_{\alpha}} \left[\sum_{\beta} \frac{\partial U_{\beta}}{\partial X_{\beta}} \right] \quad (9a)$$

et sous la forme vectorielle:

$$\vec{F} = \mu \Delta \vec{U}(\vec{r}, t) + (\lambda + \mu) \nabla \left[\nabla \cdot \vec{U}(\vec{r}, t) \right] \quad (9b)$$

avec Δ et ∇ les opérateurs laplaciens et divergence; \vec{r} étant le vecteur position du point où on considère le déplacement.

Lorsqu'on considère les milieux cristallins, le tenseur des constantes élastiques est déterminé par la symétrie de la

structure cristalline du matériau. Normalement, dans un cristal, le tenseur $C_{\alpha\beta\mu\nu}$ dépend de 81 composantes, mais en tenant compte de la symétrie du milieu, mise en relief dans les tenseurs des contraintes et des déformations, de la condition d'équilibre thermodynamique [5] et dans le cadre de l'approximation harmonique, on peut montrer que ces constantes sont réduites à 21 composantes indépendantes.

Dans un cristal cubique, quels que soient les types, en tenant compte de toutes ses symétries, le tenseur des constantes élastiques s'exprime par la matrice [6]:

$$\Leftrightarrow C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad (10)$$

Pour le milieu isotrope,

$$C_{1111} \equiv C_{11} = C_{12} + 2 C_{44}, \quad (11)$$

et alord un élément peut s'écrire:

$$C_{\alpha\beta\mu\nu} = C_{12} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} + C_{44} \left(\delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\nu} + \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} \right) \quad (12)$$

avec α, β, μ et $\nu = 1, 2, 3$

L'équation fondamentale de la dynamique pour les milieux cristallins cubiques est obtenue à partir des équations (12), (4) et (3) :

$$F_{\alpha} = C_{44} \sum_{\beta} \frac{\partial^2 U_{\alpha}}{\partial X_{\beta}^2} + \left[C_{12} + C_{44} \right] \frac{\partial}{\partial X_{\alpha}} \left[\sum_{\beta} \frac{\partial U_{\beta}}{\partial X_{\beta}} \right] \quad (13a)$$

et sous la forme vectorielle:

$$\vec{F} = C_{44} \Delta \vec{U}(\vec{r}, t) + (C_{12} + C_{44}) \nabla \left[\nabla \cdot \vec{U}(\vec{r}, t) \right] \quad (13b)$$

Les équations de la dynamique pour les milieux élastiques isotropes et les milieux cristallins cubiques sont isomorphes, tel qu'on peut le remarquer dans les équations (9) et (13). Il y a une correspondance directe en changeant les coefficients de Lamé λ , μ et les constantes élastiques C_{44} et C_{12} .

C'est ainsi que nous considérerons la propagation des ondes planes dans les milieux isotropes ou cristallins cubiques.

Si dans le milieu il n'y a pas d'équilibre, mais des déformations, il se produit des forces nettes par unité de volume; ces forces produisent une accélération. D'après la deuxième loi de Newton

$$\vec{F} = \rho \frac{\partial^2 \vec{U}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} \quad (14)$$

où ρ est la masse volumique.

En tenant compte du mouvement du système, l'équation des ondes élastiques pour un milieu isotrope ou cristallin cubique, a la forme

$$\rho \frac{\partial^2 \vec{U}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = C_{44} \Delta \vec{U}(\vec{r}, t) + \left[C_{12} + C_{44} \right] \nabla \left[\nabla \cdot \vec{U}(\vec{r}, t) \right] \quad (15a)$$

$$\rho \frac{\partial^2 U_\alpha}{\partial t^2} = C_{44} \sum_{\beta} \frac{\partial U_\alpha}{\partial x_\beta^2} + [C_{12} + C_{44}] \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \sum_{\beta} \left[\frac{\partial U_\beta}{\partial x_\beta} \right] \quad (15b)$$

Les solutions sous la forme d'ondes planes se représentent par :

$$\vec{U}(\vec{r}, t) = \vec{U}_0 \exp i(\vec{K} \cdot \vec{r} - \omega t) \quad (16)$$

où \vec{U}_0 est l'amplitude de l'onde, \vec{K} le vecteur d'onde, et ω la fréquence.

Généralement, pour une grandeur et une direction du vecteur d'onde \vec{K} , il y a trois modes normaux de mouvement pour l'onde dans un cristal; ces modes ne sont pas nécessairement polarisés dans des directions perpendiculaires ou parallèles à \vec{K} . Cependant nous étudierons, sans perte de généralité, les cas particuliers pour lesquels \vec{K} a les orientations suivantes [100], [110] [111].

Pour la direction [100], la fonction d'onde (16) est réduite à :

$$\vec{U}(x_1, t) = \vec{U}_0 \exp i(k_1 x_1 - \omega t) \quad (17)$$

où \vec{U}_0 peut avoir différentes composantes de polarisation U_{oi} . Les fréquences pour les trois modes d'oscillation produits dans le milieu sont déduits des équations (17) et (15). Deux de ces modes sont dégénérés et ils sont, en plus, transversaux à la direction de propagation, avec polarisation dans les directions

X_2, X_3 . Le troisième mode est parallèle à la direction \vec{K} et il est appelé longitudinal. Les relations de dispersion pour les trois modes sont:

$$\omega_{T_1}^2 = V_T^2 K^2 \quad ; \quad V_T \equiv \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \quad (18a)$$

$$\omega_{T_2}^2 = \omega_{T_1}^2 \quad (18b)$$

$$\omega_L^2 = V_L^2 K^2 \quad ; \quad V_L \equiv \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} \quad (18c)$$

Aux directions de propagation $[110]$ et $[111]$ on associe les vecteurs d'onde $(K, K, 0)$ et (K, K, K) qui permettent de réduire la fonction d'onde (16) à chaque orientation respective. Les fréquences et modes d'oscillation pour ces orientations de propagation sont obtenus de façon analogue au cas précédent $[100]$. Une illustration est présentée dans la Fig I.2, pour les trois modes d'oscillation, avec les fréquences respectives et les directions de polarisation.

Il faut remarquer quelques propriétés apparaissant sur cette figure, pour les cas traités.

Il y aura toujours un mode d'oscillation longitudinal, parallèle au vecteur d'onde \vec{K} , tandis que les autres seront transversaux.

Les modes transversaux sont dégénérés pour les directions de propagation $[100]$, $[110]$ et $[111]$.

Les relations de dispersion $\omega(K)$ ont la forme

$$\omega = V.K \quad (19)$$

[100]

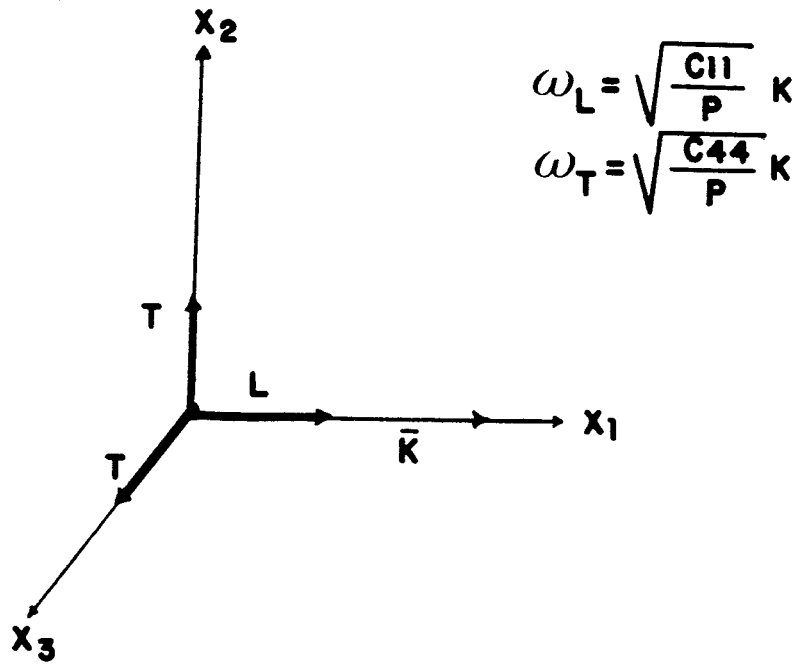


Figure 1.2a..-Direction de propagation [100].

[110]

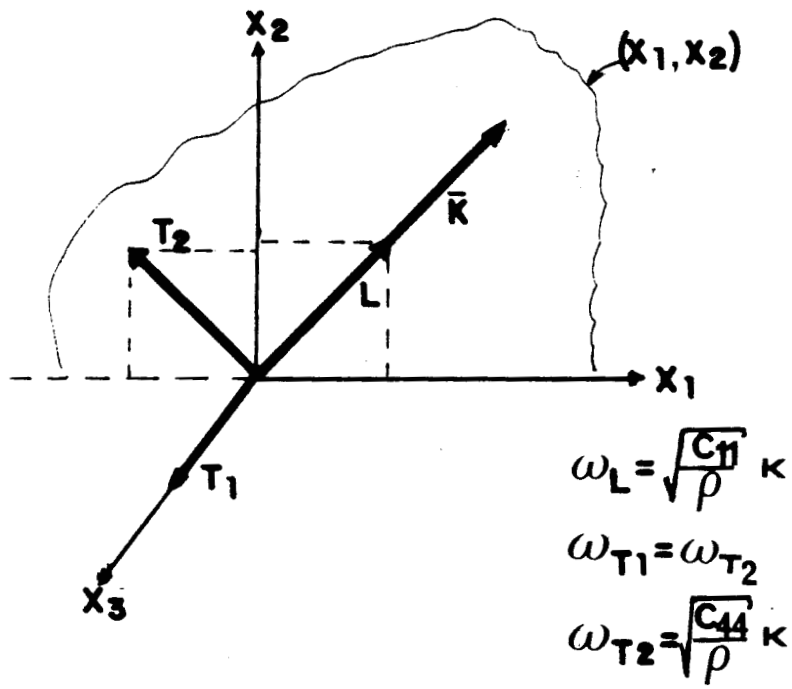
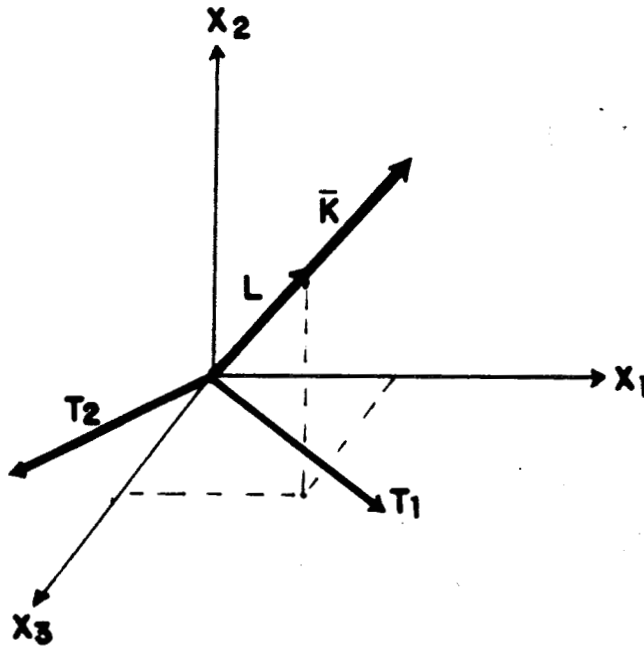


Figure 1.2b...-Direction de propagation [110].

[111]



$$\omega_L = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} K$$

$$\omega_{T_1} = \omega_{T_2}$$

$$\omega_{T_1} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} K$$

Figure 1.2c. -Direction de propagation [111].

où V , vitesse de phase, est indépendante du vecteur d'onde et dépend des paramètres caractérisant le milieu ($\rho, C_{11}, C_{12}, C_{44}$).

La Fig I.2b montre qu'il y a un mode, dans la direction X_3 , qui n'est pas couplé tandis que les autres, contenus dans un plan nommé sagittal, le sont.

Les solutions pour l'équation d'onde (15), sous une forme arbitraire, peuvent toujours se séparer en deux ondes se propageant indépendamment avec des vitesses V_T et V_L différentes. On peut donc écrire la fonction déplacement $\vec{U}(\vec{r}, t)$ comme la somme de deux fonctions:

$$\vec{U}(\vec{r}, t) = \vec{U}_T(\vec{r}, t) + \vec{U}_L(\vec{r}, t) \quad (20)$$

où \vec{U}_T et \vec{U}_L doivent satisfaire:

$$\nabla \cdot \vec{U}_T = 0 \quad \text{et} \quad \nabla \times \vec{U}_L = 0$$

Ces conditions signifient que lorsque l'onde élastique se propage, les changements de volume ont lieu uniquement dans la direction longitudinale, les directions transversales produisant seulement des changements de forme.

L'équation d'onde (15) prend la forme suivante:

$$\frac{\partial^2 \vec{U}(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = V_T^2 \Delta \vec{U}(\vec{r}, t) + [V_L^2 - V_T^2] \nabla \left[\nabla \cdot \vec{U}(\vec{r}, t) \right] \quad (21)$$

et avec (19) et (20) on peut obtenir:

$$\frac{\partial^2 \vec{U}_T(\vec{r}, t)}{\partial t^2} - V_T^2 \Delta \vec{U}_T(\vec{r}, t) = 0 \quad (22a)$$

et

$$\frac{\partial^2 \vec{U}_L(\vec{r}, t)}{\partial t^2} - V_L^2 \Delta \vec{U}_L(\vec{r}, t) = 0 \quad (22b)$$

Ces expressions sont des équations d'onde dans l'espace tridimensionnel et représentent les équations dynamiques pour les ondes élastiques avec des vitesses V_T et V_L différentes. Ces vitesses sont nommées vitesses transversale et longitudinale du son.

Bref, on peut déduire de l'analyse théorique qui vient d'être faite, trois conclusions générales.

Primo: l'équation d'onde pour les milieux isotropes et les milieux de structure cubique est la même, mis à part les coefficients qui, dans un des cas sont les coefficients de Lamé, et dans l'autre les constantes élastiques.

Secundo: La propagation des ondes dans les milieux élastiques produit des modes d'oscillation qui peuvent, dans certains cas particuliers, être perpendiculaires ou parallèles au vecteur d'onde \vec{K} .

Tertio: La relation de dispersion a une forme fonctionnelle linéaire entre ω et \vec{K} qui est donnée par

$$\omega = V.K \quad (23)$$

Ce qui est caractéristique des milieux non dispersifs puisque V ne dépend pas de \vec{K} .

Les idées présentées ici seront utiles à la compréhension des chapitres suivants.

I.3.- VIBRATION DU RESEAU. PHONONS

Dans ce chapitre de notions générales, nous élargissons la discussion des vibrations élastiques dans les cristaux au domaine des petites longueurs d'onde. Dans ce domaine, la périodicité de la structure cristalline a des conséquences très importantes pour les ondes élastiques et quelques concepts qui en dérivent seront utilisés par la suite.

Lorsqu'on considère des ondes élastiques se propageant dans une direction telle que la polarisation soit purement longitudinale ou transversale, il est possible d'effectuer un traitement simplifié du problème avec les hypothèses:

a) La propagation a lieu dans une direction de symétrie telle que, chaque plan contient le même type d'atome.

b) L'onde produit des déplacements des plans atomiques parallèles ou perpendiculaires au vecteur d'onde \vec{K} . Cette condition permet d'écrire le déplacement par une coordonnée U_n signifiant le changement relatif de la position du plan n par rapport à l'équilibre. En conséquence le problème se réduit à une dimension: chaîne linéaire [7].

c) On considère deux atomes dans chaque cellule élémentaire, de masse M_1 et M_2 et la constante β d'interaction atomique est la même dans toute la chaîne

d) Chaque plan atomique interagit uniquement avec les premiers voisins.

Avec ces hypothèses, et en utilisant le modèle de la chaîne linéaire biatomique de la FigI.3. où U_n et V_n représentent les déplacements des atomes de masses M_1 M_2 , on obtient les équations dynamiques:

$$M_1 \ddot{U}_n = \beta (V_n + V_{n+1} - 2U_n) \quad (24a)$$

$$M_2 \ddot{V}_n = \beta (U_n + U_{n-1} - 2V_n) \quad (24b)$$

des solutions sous la forme d'ondes planes pour U_n et V_n

$$U_n = U \exp i[n a k - \omega t] \quad (25a)$$

$$V_n = V \exp i[n a k - \omega t] \quad (25b)$$

permettent d'obtenir les fréquences et les modes d'oscillation des systèmes cristallins. (23) et (25) permettent d'obtenir la représentation matricielle :

$$\begin{pmatrix} 2\beta - M_1 \omega^2 & -\beta (1 + e^{ika}) \\ -\beta (1 + e^{-ika}) & 2\beta - M_2 \omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = 0 \quad (26)$$

Pour qu'il y ait des solutions, il faut que le déterminant soit nul et on aura donc:

$$M_1 M_2 \omega^4 + 2\beta (M_1 + M_2) \omega^2 + 2\beta^2 (1 - \cos Ka) = 0 \quad (27)$$

dont les solutions seront:

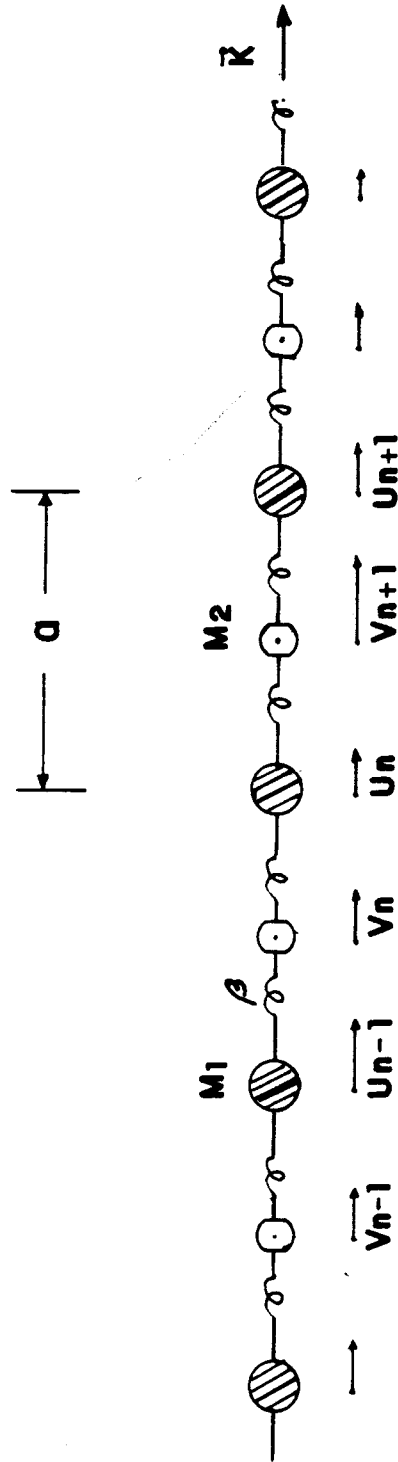


Figure 1.3.-Chaîne Linéaire biatomique.

$$\omega^2 = \beta \left[\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right] \pm \beta \left[\left[\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right]^2 - \frac{4 \sin^2 \left(\frac{Ka}{2} \right)}{M_1 M_2} \right]^{1/2} \quad (28)$$

et le rapport des amplitudes

$$\left[\frac{V}{U} \right] = \frac{2\beta - M_1 \omega^2}{2\beta \cos \left[\frac{Ka}{2} \right]} e^{i \frac{Ka}{2}} \quad (29)$$

A partir de (28) on peut voir que pour chaque mode de polarisation dans une direction de propagation fixe, la relation de dispersion $\omega(K)$ présente deux branches. Une solution exacte sera présentée graphiquement par la suite, mais il est intéressant de faire une analyse des cas limites $Ka \ll 1$ et $Ka = \pm \pi$:

$Ka \ll 1$

l'équation (28) peut alors s'exprimer comme

$$\omega_1^2 = 2\beta \left[\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right] \quad (30a)$$

$$\omega_2^2 = \alpha^2 K^2 \quad (30b)$$

$$\alpha^2 \equiv \left[\frac{\frac{1}{2} \beta a^2}{M_1 + M_2} \right]$$

et d'autre part (29) nous donne:

$$\left(\frac{v}{U} \right) = \begin{cases} -\frac{M_1}{M_2} & \text{si } \omega = \omega_1 \text{ et } K \rightarrow 0 \\ 1 & \text{si } \omega = \omega_2 \text{ et } K \rightarrow 0 \end{cases} \quad (31)$$

Cela signifie que lorsque Ka devient petit, la fréquence ω_1 du premier mode tend vers une constante différente de zéro, tandis que pour le deuxième mode on trouve une relation de dispersion qui coïncide avec le cas traité dans les milieux continus.

D'autre part, le rapport des amplitudes pour le mode $\omega = \omega_1$ indique que les atomes dans chaque cellule oscillent avec des phases opposées, le centre des masses restant fixe. Si on considère des atomes avec des charges opposées (Na^+ , Cl^-) on pourra exciter des mouvements de ce type en les faisant interagir avec des ondes électromagnétiques. C'est ainsi que cette branche est nommée la branche optique.

Pour le mode $\omega = \omega_2$ les atomes oscillent en phase et se déplacent ensemble, comme dans les vibrations acoustiques. C'est ainsi que cette branche est nommée branche acoustique.

Les concepts de branches optique et acoustique ont un caractère plus général, même si on les a déduit pour un cas très simple et particulier. Chaque atome dans la cellule élémentaire a trois degrés de liberté, donc il y aura 6 branches de dispersion possibles: trois sont acoustiques et le reste optiques. S'il n'y a pas de dégénérescence les six modes auront des fréquences différentes: (T_1A) , (T_2A) (LA) (T_1O) (T_2O) (LO) ; T pour les transversales, L pour les longitudinales, A pour les acoustiques, et O pour les optiques [8].

Dans les cas où la cellule élémentaire a p atomes, il y aura 3 branches acoustiques et $(3p-3)$ branches optiques. Ce fait est dû à ce qu'il n'y a que trois mouvements possibles dans lesquels les p atomes et leur centre de masses se meuvent en phase.

$$\underline{Ka = \pm\pi}$$

Pour les valeurs $Ka \rightarrow \pm \pi$, les fréquences de la branche optique et acoustique tendent vers:

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{2\beta}{M_2}} \quad (32-a)$$

$$\omega_2 = \sqrt{\frac{2\beta}{M_1}} \quad (32-b)$$

avec $M_1 > M_2$.

Les vecteurs d'onde \vec{K} des modes de vibration placés dans le voisinage de $\pm \pi/a$ ont une signification spéciale lorsqu'on analyse la propagation de l'énergie.

Rappelons-nous qu'une onde en se propageant dans un milieu, peut avoir une énergie avec une vitesse appelée vitesse de groupe [9]. Cette vitesse se définit par:

$$V_g = \frac{d\omega}{dK} \quad (33a)$$

où

$$\vec{V}_g = \nabla_{\vec{k}} \left[\omega(\vec{K}) \right] \quad (33b)$$

A partir de (33) et (32) on peut déduire que la vitesse de groupe est nulle. C'est-à-dire qu'il n'y a pas de transport d'énergie. Cette propriété est caractéristique des ondes stationnaires.

Autrement dit, les ondes de vecteur \vec{K} dans le voisinage de $K_{\max} = \pm \pi/a$ seulement peuvent être du type stationnaire.

Encore un autre aspect à souligner est celui du domaine de la relation de dispersion $\omega(K)$ [eq. (28)].

En principe K peut être une variable continue, cependant, comme on le verra par la suite, elle est discrète et, en plus, on la définit dans l'intervalle $[-\pi/a, \pi/a]$, appelée première zone de Brillouin. La non continuité de K est déduite en appliquant les conditions de Born-Von Karman [7], aux frontières de la chaîne, ce qui conduit aux N valeurs de K non équivalentes.

$$K = \frac{2\pi}{a} \frac{m}{N} \quad (34)$$

où m est un entier et N est le nombre de cellules dans la chaîne.

Les valeurs quantiques de K mènent à des valeurs quantiques de l'énergie des vibrations cristallines; ces quanta de vibration sont les phonons.

On démontre facilement, en considérant les amplitudes U_n et U_{n+1} qu'un vecteur d'onde quelconque étant hors de la 1^{er} zone de Brillouin, peut être réduit en faisant:

$$K' = K + G_m \quad (35a)$$

avec

$$G_m = \frac{2\pi m}{a} \quad (35b)$$

m étant un entier. Ce fait justifie l'intervalle défini précédemment pour le vecteur K .

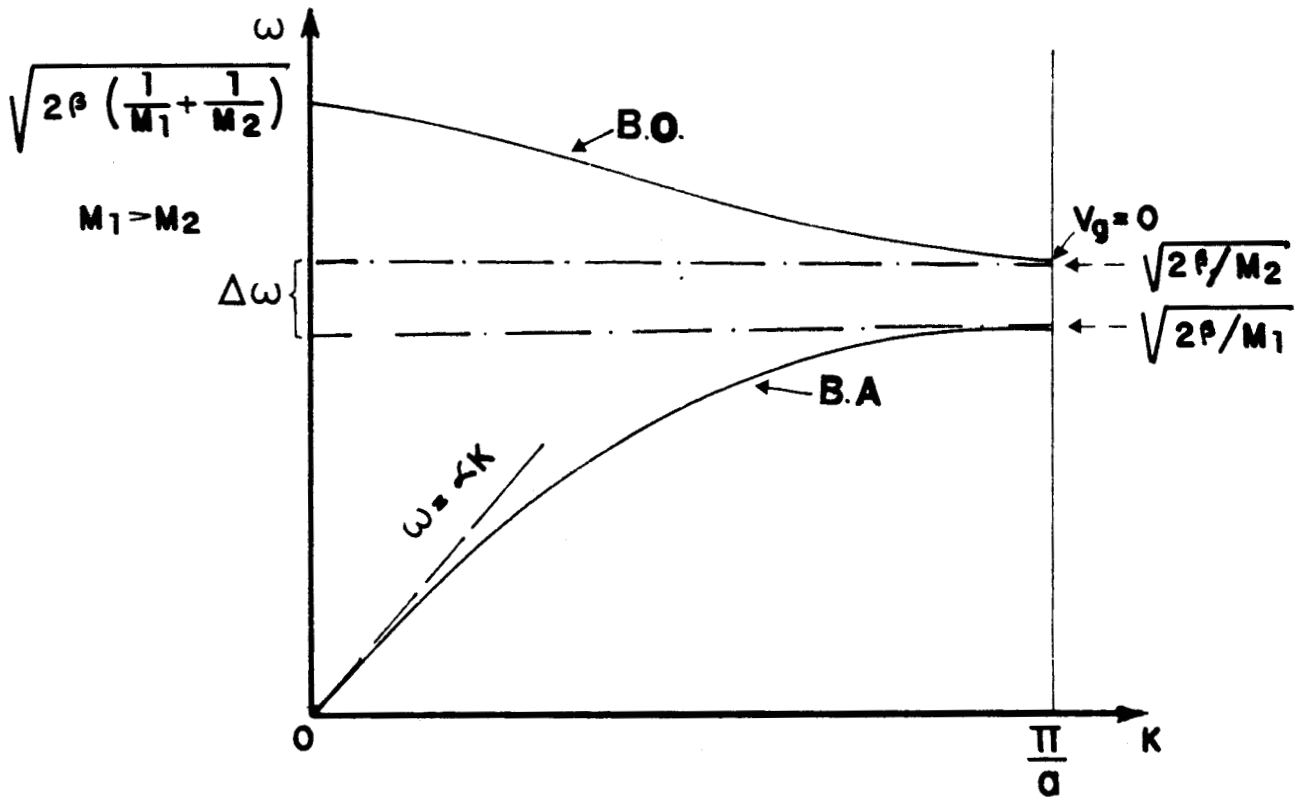
Sur les figures I.4 et I.5 nous présentons, de façon schématique les idées que nous venons de traiter. On peut avancer deux conclusions D'abord, aux limites de la 1^{er} Zone de Brillouin $K_{\max} = \pm \pi/a$ il y a une largeur de bande de fréquences interdites; donc cette region-là correspond à un vecteur d'onde K complexe, de façon telle que l'onde soit amortie.

Ensuite, sur la Fig.I.5 on a représenté d'une façon approximative la relation de dispersion pour une onde électromagnétique dans un milieu cristallin; on voit que les courbes associées se coupent avec les branches optiques, ce qui indique la possibilité d'exciter des modes du réseau avec la même fréquence, la même longueur d'onde et la même vitesse de phase que l'onde électromagnétique.

Si un photon est absorbé par le cristal et produit un seul phonon, la loi de conservation du vecteur d'onde établit que $K_p = K_f$. Les photons de fréquences de l'ordre de 10^{13} Hz. ont des vecteurs d'onde de l'ordre de 10^3 cm^{-1} , cependant les vecteurs d'onde des phonons peuvent atteindre des valeurs de 10^8 cm^{-1} . Cela implique que les phonons produits par les photons dans les processus directs ont des vecteurs d'ondes courts, donc les fréquences d'absorption dans la branche optique correspondent à la région infrarouge du spectre.

D'autre part, on peut aussi voir que la relation de dispersion de la lumière coupe les branches acoustiques seulement pour $K=0$. Des excitations pour cette valeur du vecteur d'onde se font dans les expériences de dispersion Brillouin [10].

Les idées développées jusqu'ici d'une façon élémentaire, sont de caractère général et elles serviront à la compréhension de notre travail.



B.O. _ Branche Optique

B.A. _ Branche Acoustique

Figure I.4.-Relation de dispersion par une chaîne linéaire biatomique.

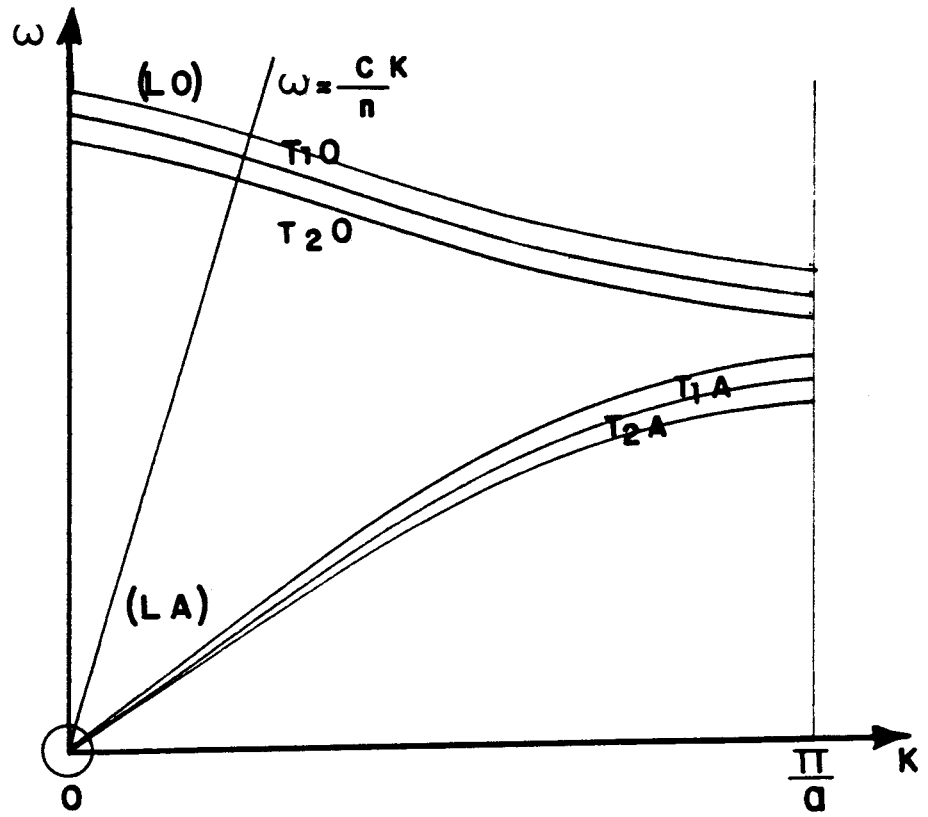


Figure 1.5.-Relation de dispersion par le réseau cubique simple.

II.4 THEORIE DE REPONSE DE INTERFACES

La méthode que nous avons employée pour le calcul des relations de dispersion pour les phonons dans les superréseaux à 3 et 4-couches, aussi bien pour le cas discret que dans l'approximation des milieux continus, est fondée sur la Théorie de Réponse des Interfaces développée par L. Dobrzynski [11,12]. Nous allons présenter ici un bref rappel des équations et la méthodologie.

Soit un système composite, défini dans un domaine infini D_∞ , formé par N matériaux différents (Fig. I.6a); la Théorie de Réponse des Interfaces établit la possibilité de connaître les propriétés du système, à travers la connaissance de la fonction réponse $\overset{\leftrightarrow}{g}$ (fonction de Green associée à l'opérateur h), si, pour chacun des matériaux composants (Fig. I.6b), on connaît les fonctions réponses $\overset{\leftrightarrow}{G}_{oi}$ et leurs opérateurs $\overset{\leftrightarrow}{H}_{oi}$ ($1 \leq i \leq N$). Les opérateurs h et $\overset{\leftrightarrow}{H}_{oi}$ peuvent être, selon la propriété à étudier, un hamiltonien, une matrice dynamique, etc.

Les équations fondamentales de la théorie découlent de:

$$\overset{\leftrightarrow}{g} \overset{\leftrightarrow}{h} = \overset{\leftrightarrow}{h} \overset{\leftrightarrow}{g} = \overset{\leftrightarrow}{I} \tag{36}$$

$$(\overset{\leftrightarrow}{G}_{oi} \overset{\leftrightarrow}{H}_{oi} = \overset{\leftrightarrow}{H}_{oi} \overset{\leftrightarrow}{G}_{oi} = \overset{\leftrightarrow}{I})$$

où $\overset{\leftrightarrow}{I}$ est l'identité

Elles permettent de mettre en rapport la fonction de référence $\overset{\leftrightarrow}{G}$ et la fonction réponse $\overset{\leftrightarrow}{g}$:

$$\overset{\leftrightarrow}{g} (\overset{\leftrightarrow}{I} + \overset{\leftrightarrow}{A}) = \overset{\leftrightarrow}{G} \tag{37}$$

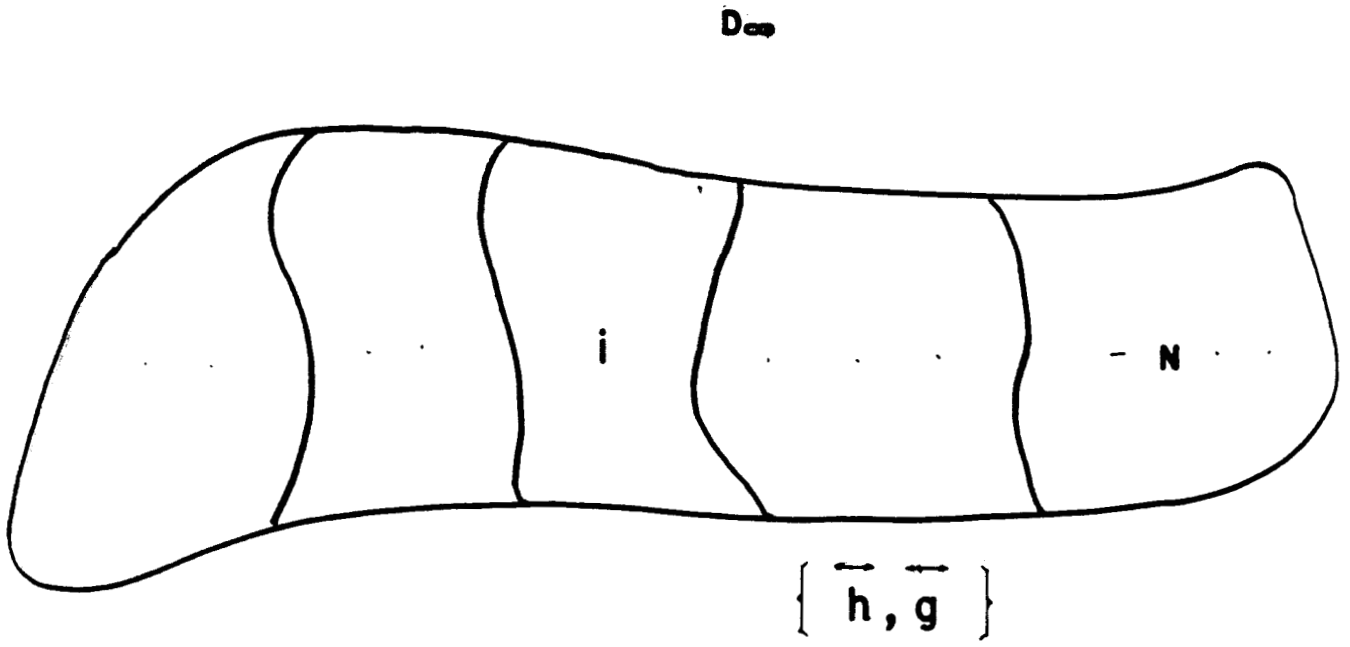


Figure 1.6a. -Système composite dans un domaine infini D_∞

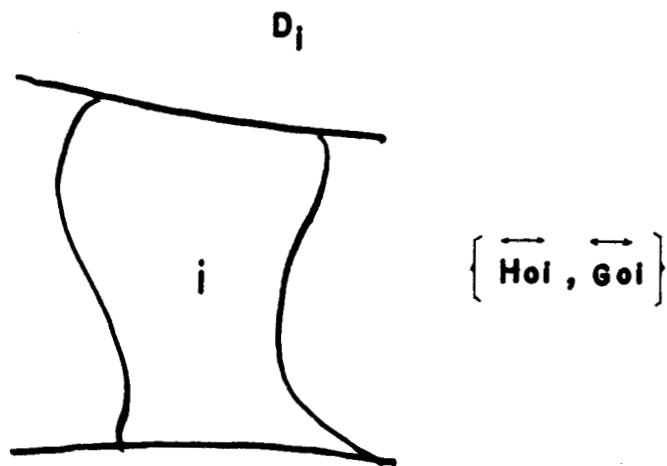


Figure 1.6b. -Sous-domaine D_1

définies dans D_{∞} . La fonction de référence $\overset{\leftrightarrow}{G}$ est une matrice diagonale par blocs; chacun d'entre eux construit avec les éléments de la fonction réponse $\overset{\leftrightarrow}{G}_{oi}$, définie dans son domaine respectif à l'intérieur du matériau composite.

$$\overset{\leftrightarrow}{G}(i, i') = \delta_{ii'} \overset{\leftrightarrow}{G}_{oi} \quad (38)$$

L'opérateur $\overset{\leftrightarrow}{A}$ (appelé opérateur réponse d'interface) contient l'information qui fait référence aux interfaces créées permettant de former le matériau composite.

$$\overset{\leftrightarrow}{A} = \overset{\leftrightarrow}{A}_s + \overset{\leftrightarrow}{V}_I \overset{\leftrightarrow}{G} \quad (39a)$$

avec :

$$\overset{\leftrightarrow}{A}_s \equiv \overset{\leftrightarrow}{V}_c \overset{\leftrightarrow}{G} \quad (39b)$$

où $\overset{\leftrightarrow}{V}_c$ est l'opérateur de clivage qui produit les interfaces, et $\overset{\leftrightarrow}{V}_I$ est l'opérateur d'interaction qui couple les N interfaces des différents matériaux pour constituer le matériau composite. Dans l'approximation des milieux continus l'opérateur $\overset{\leftrightarrow}{V}_I$ est nul (puisque le paramètre du réseau $a_i \rightarrow 0$).

Dans quelques applications il faut connaître de façon explicite les éléments $g(X, X')$ de la fonction $\overset{\leftrightarrow}{g}$ du système ($X, X' \in D_{\infty}$). Il est possible de les obtenir à partir des éléments de la fonction référence $\overset{\leftrightarrow}{G}$ et de l'opérateur d'interface $\overset{\leftrightarrow}{A}$.

Les éléments $A(X, X')$ de l'opérateur $\overset{\leftrightarrow}{A}$ satisfont

$$A(x, x') \equiv 0 \quad \text{si} \quad x \notin M \quad (40)$$

où M est le domaine des interfaces.

Cette propriété permet d'introduire la notation des matrices rectangulaires pour écrire l'équation (37)

$$\overset{\leftrightarrow}{G}(D D) + \overset{\leftrightarrow}{G}(D M) \overset{\leftrightarrow}{A}(M D) = \overset{\leftrightarrow}{G}(D D) \quad (41)$$

et en définissant :

$$\overset{\leftrightarrow}{\Delta}(M M) = \overset{\leftrightarrow}{I}(M M) + \overset{\leftrightarrow}{A}(M M) \quad (42)$$

nous aurons

$$\overset{\leftrightarrow}{G}(D D) = \overset{\leftrightarrow}{G}(D D) - \overset{\leftrightarrow}{G}(D M) \overset{\leftrightarrow}{\Delta}^{-1}(M M) \overset{\leftrightarrow}{A}(M D) \quad (43)$$

équation permettant de connaître tous les éléments de $\overset{\leftrightarrow}{G}$, de façon univoque, une fois connus les éléments de $\overset{\leftrightarrow}{G}$ et $\overset{\leftrightarrow}{A}$. Pour les cas des superréseaux à N-couches ils peuvent être calculés de façon analytique.

La théorie de Réponse des Interfaces, lorsqu'elle est appliquée à l'étude des superréseaux, permet d'écrire la relation de dispersion des phonons dans ce type de matériau composite. Cette équation est valable pour les milieux discrets et pour les milieux continus et s'exprime par:

$$\text{Cos}(K_y a_u) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{R}(N, m - N; \omega^2; K_{//}) \right] \quad (44)$$

où :

$$a_u \equiv \sum_{i=1}^N d_i \quad (45)$$

et K_{\perp} , K_{\parallel} sont les composantes du vecteur d'onde \vec{K} , perpendiculaire et parallèle au plan des interfaces; a_u est l'épaisseur de la super-cellule; m varie comme $1 \leq m \leq N$, et ω est la fréquence.

La matrice $R(N, m-N; \omega^2, K_{\parallel})$ est appelée matrice de transfert et elle est définie dans les publications qui suivent.

De l'équation (44) dérivent quelques propriétés. Elle établit une relation implicite entre la composante K_{\perp} et la fréquence. La périodicité de la fonction $\text{Cos}(K_{\perp} a_u) = \text{Cos}(K_{\perp} a_u - 2n\pi)$ montre que l'équation aura des solutions dans l'intervalle $[-1, 1]$ pour les valeurs réelles de K_{\perp} pour différents sous-domaines de l'espace (ω, K_{\parallel}) , qui forment une structure caractéristique de bandes.

CHAPITRE II

SUPERRESEAUX A N-COUCHES CAS DISCRET

II.1.- INTRODUCTION

Le but de ce chapitre est le calcul théorique des relations de dispersion pour les phonons de volume et de surface, dans les superréseaux à N-couches (N= 3,4) en employant la Théorie Générale de Réponse des Interfaces développée [11] pour ce type de matériau composite dans l'approximation discrète. Le modèle du superréseau est pris dans le domaine à l'intérieur duquel les propriétés dynamiques d'une onde se propageant dans ce milieu sont données par sa longueur d'onde λ . Lorsque $\lambda \approx a_0$ (a_0 paramètre du réseau cristallin) on aura l'approximation de courte longueur d'onde.

En principe, il est possible, avec cette théorie de trouver de façon générale les relations de dispersion des phonons dans les superréseaux ayant n'importe quelle cellule élémentaire pour la structure cristalline. Cependant le traitement théorique peut s'avérer très complexe, les calculs devant se faire à l'aide d'un ordinateur. Dans notre travail nous adoptons un modèle simple de cellule élémentaire, ce qui permet de mener, de façon totalement analytique, jusqu'à la fin, les calculs pour obtenir les relations de dispersion correspondantes.

Par la suite on va détailler le modèle du superréseau à N-couches, puis la situation particulière pour N= 3,4. On complètera le chapitre avec deux publications où on montrera les résultats obtenus.

II.2.- MODÈLE, HYPOTHESES ET NOTATIONS

Un schéma d'ensemble du modèle de superréseau projeté dans le plan x_0, x_1 , est présenté dans la Figure II.1. Pour une représentation tridimensionnelle les couches croissent indéfiniment parallèles au plan x_1, x_2 .

Le modèle qu'on propose est construit en répétant périodiquement, dans une direction donnée (x_3) une super-cellule élémentaire (n) formée par N lames de matériaux différents. On identifie les matériaux avec l'indice i , ($1 \leq i \leq N$).

Chaque i -ème lame est obtenue en clivant le matériau i , défini dans son domaine infini (Fig. II.2), et elle est constituée par L_i plans atomiques, où chaque atome est identifié par la masse M_i , et les interactions interatomiques, à l'intérieur de la couche, sont caractérisées par le paramètre β_i . Les plans atomiques sont notés par un indice entier l_i , ($1 \leq l_i \leq L_i$).

Pour les matériaux qui intègrent chaque lame on suppose une structure cristalline périodique, avec une cellule cubique simple et un paramètre a_0 (Fig. II.3). La géométrie de la cellule élémentaire est la même dans chacune des différentes lames.

Le couplage des couches dans le superréseau est caractérisé par les constantes β_{ij} ; où i et j signifient que l'interaction a lieu entre le plan atomique L_i , de la lame i , et le plan atomique 1 de la lame suivante (j) (Fig. II.4).

Le modèle du superréseau à N -couches proposé, a la propriété de symétrie de translation dans les directions parallèles aux plans $[001]$, ce qui permet de réduire le problème à trois dimensions au cas plus simple d'une dimension en employant la transformée de Fourier, selon laquelle n'importe quel opérateur ou fonction se transforme d'après

$$F(\vec{x}_{//}, x_3) = \sum_{\vec{K}_{//}} F(\vec{K}_{//}, x_3) e^{i(\vec{K}_{//} \cdot \vec{x}_{//})}$$

où

$$\vec{K}_{//} = K_1 \hat{x}_1 + K_2 \hat{x}_2 \quad \text{et} \quad \vec{x}_{//} = a_0 (l_1 \hat{x}_1 + l_2 \hat{x}_2).$$

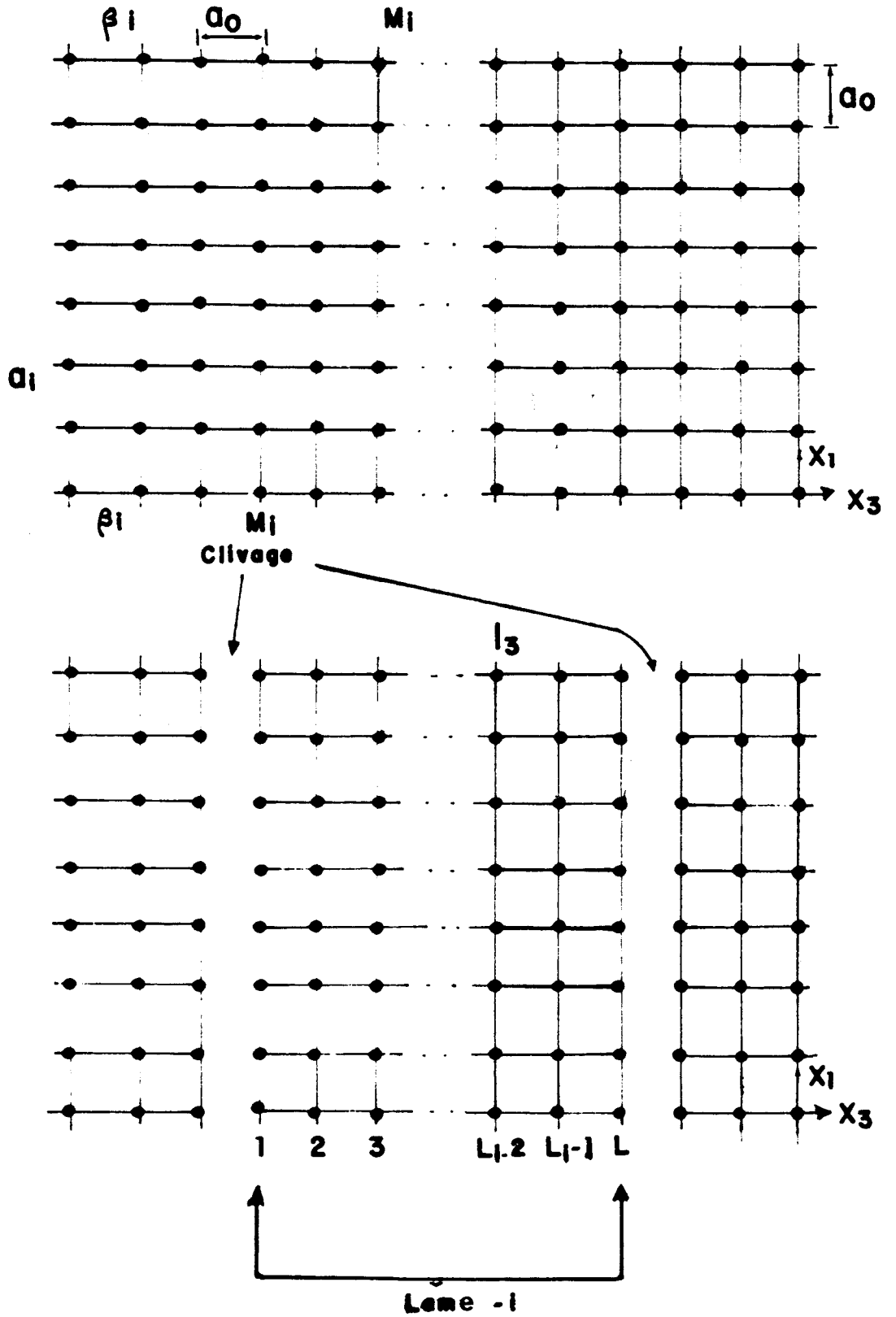


Figure II.2a. -Matériau 1 dans un domaine D_∞ .

.2b.-Couche i-ème.

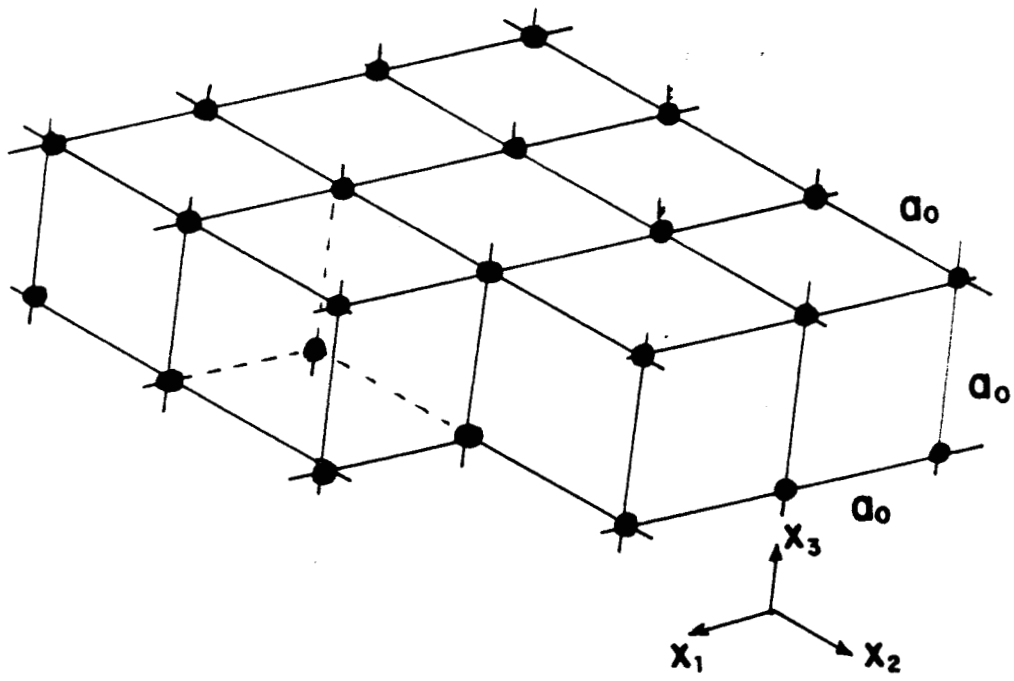


Figure II.3.-Le réseau cubique simple.

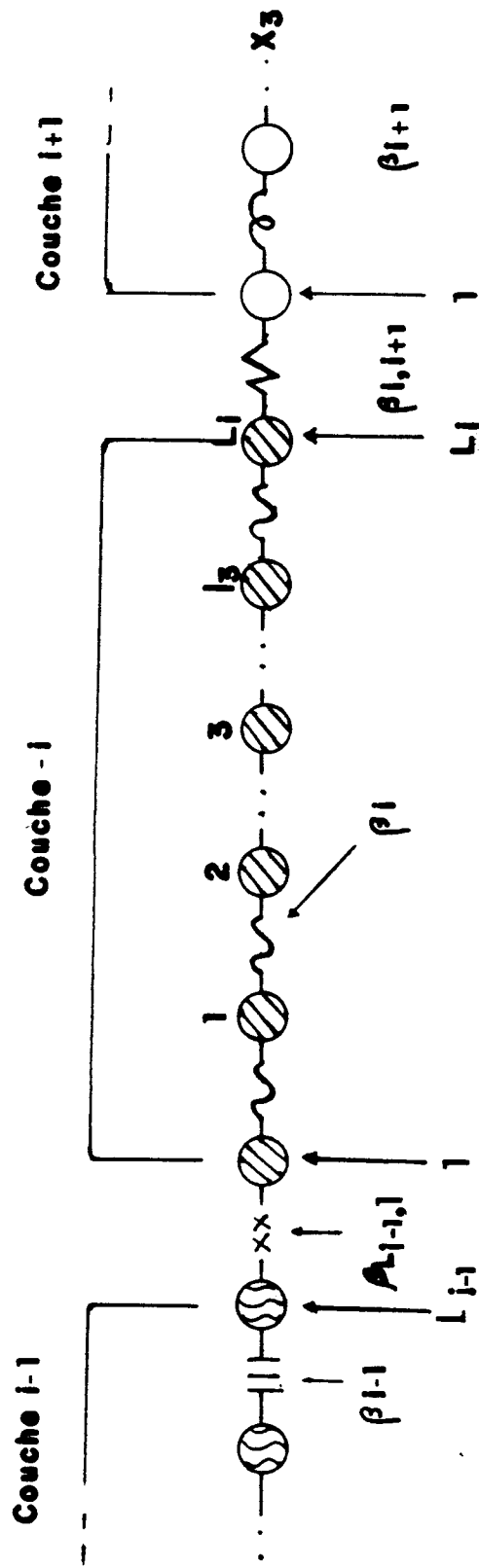


Figure II. 4. -L'interaction entre les plans atomiques.

Les cas des superréseaux avec trois et quatre matériaux à l'intérieur de la cellule élémentaire en tenant compte de l'invariance de translation sont montrés dans les Figures II.5 et II.6.

Bref, les hypothèses employées pour développer le modèle sont les suivantes.

Primo, approximation harmonique; dans cette hypothèse l'énergie potentielle du système est une fonction quadratique des déplacements atomiques par rapport aux positions d'équilibre; les forces sont proportionnelles aux déplacements.

Secundo; approximations des premiers voisins. L'interaction de chaque atome a lieu seulement avec les atomes de leur entourage placés à la même distance (Fig. II.7). Ceci signifie que les forces décroissent rapidement avec la distance. Nous avons appelé cette interaction β_i .

Tercio; pour les matériaux qui composent chacune des couches du superréseau, on suppose une cellule élémentaire cubique simple.

II.3.- RESUME DES NOTATIONS EMPLOYEES PAR LA SUITE

X_g : direction de croissance du superréseau

n : supercellule unitaire qui se répète périodiquement ($-\infty < n < \infty$)

N : nombre de couches dans la super-cellule n

i : indice fixant la couche du matériau i -ème dans la super-cellule ($1 \leq i \leq N$)

m : indice fixant la position de la couche i dans la structure infinie du superréseau

$$m = nN + i \equiv (n, i)$$

L_i : nombre de plans atomiques dans la lame i ou m

l_j : indice pour les plans atomiques dans chaque lame
($1 \leq l_j \leq L_i$)

M_i : masse des atomes dans la lame i

β_i : constante d'interaction interatomique dans la lame i

β_{ij} : constante d'interaction entre les atomes de l'interface entre deux lames ($K \equiv L_i, j \equiv 1$)

$\vec{x}(l) := a_0 (l_1 \hat{x}_1 + l_2 \hat{x}_2 + l_3 \hat{x}_3)$; vecteur position de l'atome l dans le réseau cristallin

l_ν : composante ν du vecteur \vec{x} ($\nu = 1, 2, 3$)

a_0 : paramètre du réseau dans la cellule cubique simple

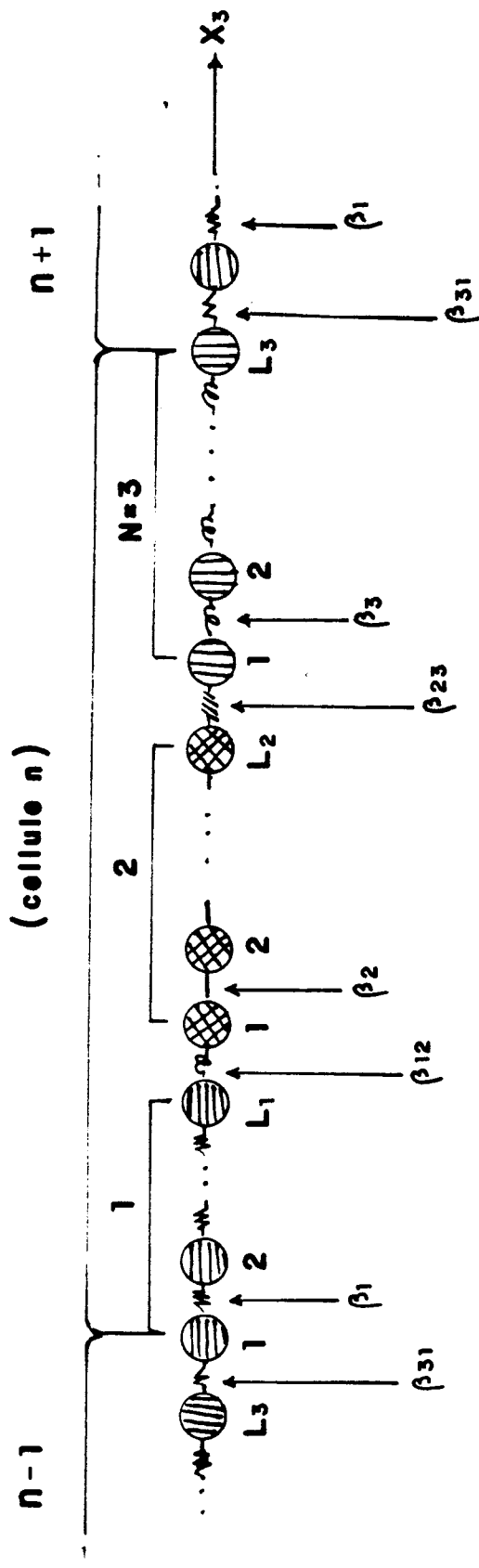


Figure II.5. -Le schéma d'un superréseau à 3-couches

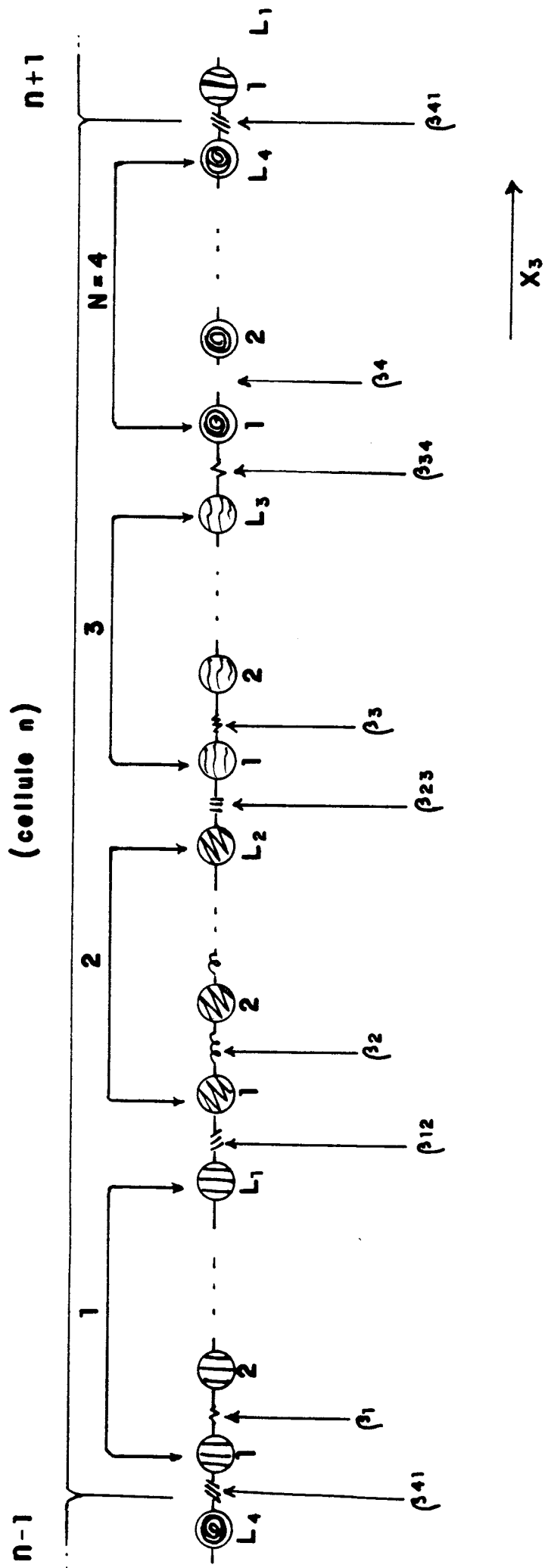
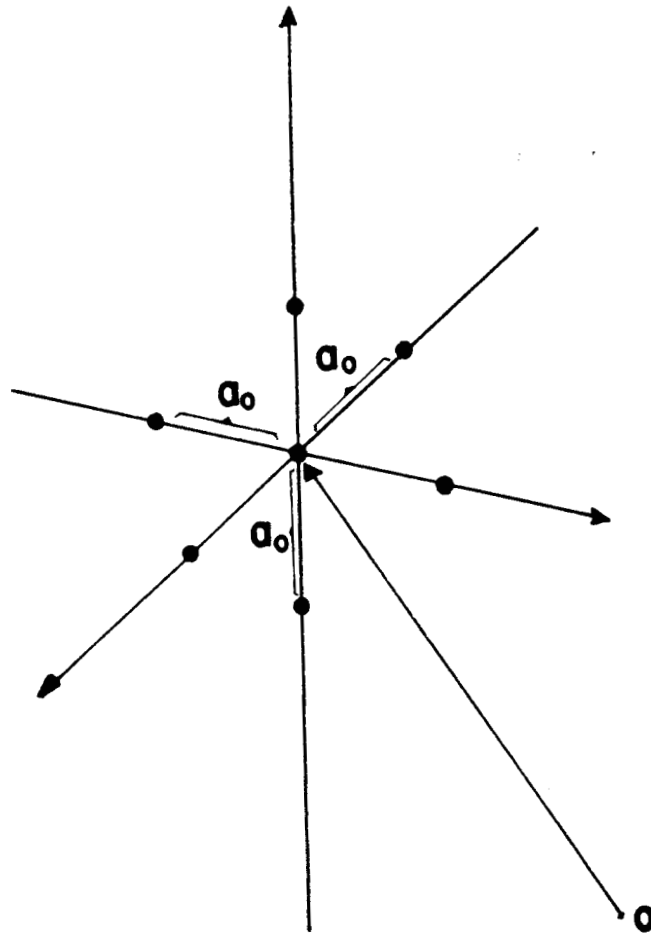


Figure II.6. - Le schéma d'un superréseau à 4-couches.



$$\vec{X}(l) = a_0 (l_1 \hat{X}_1 + l_2 \hat{X}_2 + l_3 \hat{X}_3)$$

Figure II.7. - L'approximation des premiers voisins
au atome l .

II.4.- RESULTATS.

Dans les publications qui suivent , nous montrons les résultats obtenus pour la relation de dispersion des phonons dans les superréseaux à 3 et 4-couches.

L'équation 36 de la première publication annexe définit la relation de dispersion par les phonons de volume dans les superréseaux à 3-couches , et l'équation 35 (2-ème publication) montre l'expression pour les superréseaux a 4-couches.

L'élément $g_s(111,111)$ de la fonction réponse $g_s(n1l, n1l')$ associée à la partie semi-infinie du superréseau coupé, est donné par l'équation 36 (2-ème publication). La connaissance des pôles de cette fonction permet de déterminer les fréquences des modes localisés à la surface du superréseau semi-infini.

Interface response theory of phonons in N -layer superlattices

T. Szwacka, A. Noguera, A. Rodriguez, and J. Mendiola

Departamento de Fisica, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Merida, Venezuela

L. Dobrzynski

Equipe Internationale de Dynamique des Interfaces, Laboratoire de Dynamique des Cristaux Moléculaires, Université des Sciences et Techniques de Lille-Flandres-Artois, F-59655 Villeneuve d'Ascq Cédex, France

(Received 5 August 1987; revised manuscript received 1 December 1987)

Bulk phonons were obtained previously for a two-layer superlattice, using slab response functions. We show that they can be obtained more directly using bulk response functions and the interface response theory. This new approach enables us to give for the first time a general theory of phonons in N -layer superlattices. As an illustration of the theory, we give a closed-form expression for phonons in three-layer superlattices.

I. INTRODUCTION

Phonons in two-layer superlattices are of interest theoretically¹ and also have been studied experimentally by Raman and Brillouin spectroscopies for several years. N -layer superlattices are formed out of a periodic repetition of a unit cell containing N ($N > 2$) different slabs. There has been progress recently in producing such materials² and we hope that the present theoretical paper will stimulate experimental investigations of phonons in N -layer superlattices. In the next section, we first present a simple three-dimensional phonon model and then give the surface response operators necessary for a theoretical investigation of N -layer superlattice phonons. We show in Sec. III how the interface response theory³ enables us to calculate the response function and the superlattice phonons. A closed-form expression for the phonons in a three-layer superlattice is presented here for the first time. Finally, we discuss some extensions of the present results.

II. BULK PHONON MODEL AND THE SURFACE RESPONSE OPERATORS

A. Bulk phonon model

We start from an infinite simple-cubic lattice of atoms of mass M_i . Let $u_\alpha(l)$ denote the α ($= 1, 2, \text{ or } 3$) component of the displacement of the atom at lattice site

$$\mathbf{x}(l) = a_0(l_1 \hat{\mathbf{x}}_1 + l_2 \hat{\mathbf{x}}_2 + l_3 \hat{\mathbf{x}}_3), \quad (1)$$

where a_0 is the lattice parameter and $\hat{\mathbf{x}}_1$, $\hat{\mathbf{x}}_2$, and $\hat{\mathbf{x}}_3$ are unit vectors. The potential energy Φ_i associated with the lattice vibrations of the model^{4,5} considered here has the form

$$\Phi_i = \frac{1}{2} \beta_i \sum_l \sum_p \sum_\alpha [u_\alpha(l) - u_\alpha(l+p)]^2, \quad (2)$$

where l ranges over all sites of the crystal, and p over the six nearest sites of the atom l .

This model is not rotationally invariant. Nevertheless, this deficiency is unimportant for the qualitative investigation of many physical properties and in particular for our study of the transverse and longitudinal polarized phonons.⁶

Using this form of the potential energy and assuming a sinusoidal time dependence for the displacements, we obtain three uncoupled equations of motion, which we can write in the form

$$\sum_l H_{\alpha l}(l'; \omega^2) u(l') = 0, \quad (3)$$

where

$$H_{\alpha l}(l'; \omega^2) = \left[\omega^2 - 6 \frac{\beta_i}{M_i} \right] \delta_{ll'} + \frac{\beta_i}{M_i} \sum_p \delta_{l, l'+p}. \quad (4)$$

The corresponding threefold-degenerate bulk phonon dispersion relation is

$$\omega^2 = 2 \frac{\beta_i}{M_i} [3 - \cos(k_1 a_0) - \cos(k_2 a_0) - \cos(k_3 a_0)], \quad (5)$$

where $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3)$ is the propagation vector.

B. Bulk response function

The bulk vibrational properties of the above crystal can be studied with the help of its bulk response function $\bar{G}_{\alpha l}$ defined by

$$\bar{H}_{\alpha l} \bar{G}_{\alpha l} = \bar{I}, \quad (6)$$

where \bar{I} stands for the unit matrix.

Taking advantage of the periodicity of the system in directions parallel to the (001) planes, we introduce the following two-dimensional vectors,

$$\mathbf{x}_{\parallel}(l) = a_0(l_1 \hat{\mathbf{x}}_1 + l_2 \hat{\mathbf{x}}_2), \quad (7a)$$

$$\mathbf{k}_{\parallel}(l) = k_1 \hat{\mathbf{x}}_1 + k_2 \hat{\mathbf{x}}_2, \quad (7b)$$

and a Fourier transformation of the response function

$$G_{0i}(l l'; \omega^2) = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} G_{0i}(l l'; \mathbf{k}_{\parallel} \omega^2) \times \exp\{i \mathbf{k}_{\parallel} \cdot [\mathbf{x}_{\parallel}(l) - \mathbf{x}_{\parallel}(l')]\}, \quad (8)$$

where N^2 is the number of atoms in a (001) plane. The corresponding bulk response function is⁶

$$G_{0i}(l_3 l'_3; \mathbf{k}_{\parallel} \omega^2) = \frac{M_i t_i^{|l_3 - l'_3| + 1}}{\beta_i t_i^2 - 1}, \quad (9)$$

with

$$t_i = \begin{cases} \xi_i - (\xi_i^2 - 1)^{1/2}, & \xi_i > 1 \\ \xi_i + i(1 - \xi_i^2)^{1/2}, & -1 < \xi_i < 1 \\ \xi_i + (\xi_i^2 - 1)^{1/2}, & \xi_i < -1, \end{cases} \quad (10)$$

$$V_{0i}(l_3 l'_3) = \frac{\beta_i}{M_i} (\delta_{l_3 0} \delta_{l'_3 0} + \delta_{l_3 1} \delta_{l'_3 1} - \delta_{l_3 0} \delta_{l'_3 1} - \delta_{l_3 1} \delta_{l'_3 0}) + \frac{\beta_i}{M_i} (\delta_{l_3 L_i} \delta_{l'_3 L_i} + \delta_{l_3, L_i+1} \delta_{l'_3, L_i+1} - \delta_{l_3 L_i} \delta_{l'_3, L_i+1} - \delta_{l_3, L_i+1} \delta_{l'_3 L_i}). \quad (12)$$

The surface response operator \bar{A}'_{si} associated to this slab is formed out of the elements of

$$\bar{A}'_{0i} = \bar{G}_{0i} \bar{V}_{0i}, \quad (13)$$

belonging strictly to the slab, namely

$$A'_{si}(l_3 l'_3) = -\frac{1}{t_i + 1} (\delta_{l'_3 1} t_i^{l_3} + \delta_{l'_3 L_i} t_i^{L_i - l_3 + 1}) \quad 1 \leq l_3, l'_3 \leq L_i. \quad (14)$$

The above expressions (9)–(14) in another form were used before⁷ for the study of sandwich phonons. They enable us to treat in the next section the N -layer superlattice phonons.

III. THE RESPONSE FUNCTION AND THE N -LAYER SUPERLATTICE PHONONS

A. Definition of the N -layer superlattice

Consider N different homogeneous slabs, each bounded by ideally truncated free surfaces. Let these N ideally cleaved slabs ($i=1, 2, \dots, N$) be coupled together by nearest-neighbor interactions $\beta_{ii'}$, between adjacent surface atoms; β_{12} couples surface atoms of the L_1 atomic plane of the slab $i=1$ to those of the $l_3=1$ atomic plane of the slab $i=2$ and so on. The unit cell formed by these N slabs will be labeled by an integer n .

In the same manner, one can couple periodically an infinite number ($-\infty < N < +\infty$) of the above N layered slabs in order to obtain a new bulk material, the N -layer superlattice.

In what follows, the following more condensed notation,

$$m \equiv nN + i \equiv (n, i),$$

$$m' \equiv n'N + i' \equiv (n', i').$$

and

$$\xi_i = 3 - \cos(k_1 a_0) - \cos(k_2 a_0) - \frac{M_i}{2\beta_i} (\omega^2 + i\epsilon), \quad (11)$$

where ϵ is an infinitesimal positive number.

C. The surface response operators for one slab

Let us now create a slab by removing in the infinite crystal all interactions between the atoms situated in the $l_3=0$ and $l_3=1$ planes, and also between those situated in the $l_3=L_i$ and $l_3=L_i+1$ planes. The corresponding cleavage operator \bar{V}_{0i} , which when added to the \bar{H}_{0i} gives the dynamical matrix \bar{h}_{0i} of the slab and of the two semi-infinite crystals, is

will prove convenient for labeling a given slab i (or i') in the unit cell n (or n').

The interface atomic interactions are globally represented by the coupling operator \bar{V}_I :

$$V_I(m l_m; m' l'_m) = \delta_{mm'} (\delta_{l_m, l'_m} \delta_{l'_m, l'_m} \beta_{m, m+1} + \delta_{l_m, 1} \delta_{l'_m, 1} \beta_{m-1, m}) - \delta_{m+1, m'} \delta_{l_m, l'_m} \delta_{l'_m, 1} \beta_{m, m+1} - \delta_{m, m'-1} \delta_{l_m, 1} \delta_{l'_m, l'_m} \beta_{m, m+1}. \quad (15)$$

B. Reference response function \bar{G} of the N -layer superlattice

Define³ for the N -layered superlattice a reference response function \bar{G} as a block-diagonal matrix formed out of only the elements of the bulk response functions \bar{G}_{0i} contained within the space of the definition of each slab, namely, with the notation given above:

$$G(m l_3, m' l'_3) = \delta_{mm'} G_m(l_3 l'_3), \quad 1 \leq l_3, l'_3 \leq L_m \quad (16)$$

where $\delta_{mm'}$ is the usual Kronecker symbol.

C. Response function \bar{g} of the N -layer superlattice

The response function \bar{g} of the N -layer superlattice can be calculated directly from the reference response function \bar{G} defined above, through the universal relation³

$$(\bar{I} + \bar{A}') \bar{g} = \bar{G}, \quad (17)$$

where the interface response operator \bar{A}' is defined³ by

$$\bar{A}' = \bar{A}'_i + \bar{G} \bar{V}_I. \quad (18)$$

\bar{A}_s is the block-diagonal surface response operator formed out of the $A'_s(ml_3; m'l'_3)$ given by Eq. (14),

$$A'_s(ml_3; m'l'_3) = \delta_{mm'} A'_{sm}(l_3 l'_3), \quad (19)$$

and \bar{V}_l is the coupling operator defined above.

The general solution of Eq. (17) for any model of an N -layer superlattice was given before.⁸ For the present model, the elements $g(ml_3; m'l'_3)$ are scalars and can be calculated in closed form with the help of the following (2×2) matrices:

$$\bar{K}(m) = \begin{pmatrix} A'(m1; mL_m) & A'(m1; m+1, 1) \\ 1 + A'(mL_m; mL_m) & A'(mL_m; m+1, 1) \end{pmatrix}, \quad (20)$$

$$\bar{H}(m) = \begin{pmatrix} A'(m1; m-1, L_{m-1}) & 1 + A'(m1; m1) \\ A'(mL_m; m-1, L_{m-1}) & A'(mL_m; m1) \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$\bar{P}(m) = -\bar{K}^{-1}(m) \bar{H}(m), \quad (22)$$

and

$$\bar{R}(N) = \bar{P}(N) \bar{P}(N-1) \cdots \bar{P}(1). \quad (23)$$

The explicit expressions for $\bar{K}(m)$ and $\bar{H}(m)$ are

$$\bar{K}(m) = \begin{pmatrix} \frac{t_m^{L_m}}{t_m+1} + \frac{\beta_{m,m+1}}{\beta_m} \frac{t_m}{t_m^2-1} & -\frac{\beta_{m,m+1}}{\beta_m} \frac{t_m^{L_m}}{t_m^2-1} \\ \frac{1}{t_m+1} + \frac{\beta_{m,m+1}}{\beta_m} \frac{t_m}{t_m^2-1} & -\frac{\beta_{m,m+1}}{\beta_m} \frac{t_m}{t_m^2-1} \end{pmatrix}, \quad (24)$$

and

$$\bar{H}(m) = \begin{pmatrix} -\frac{\beta_{m-1,m}}{\beta_m} \frac{t_m}{t_m^2-1} & \frac{1}{t_m+1} + \frac{\beta_{m-1,m}}{\beta_m} \frac{t_m}{t_m^2-1} \\ -\frac{\beta_{m-1,m}}{\beta_m} \frac{t_m^{L_m}}{t_m^2-1} & \frac{t_m^{L_m}}{t_m+1} + \frac{\beta_{m-1,m}}{\beta_m} \frac{t_m^{L_m}}{t_m^2-1} \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Note also that

$$\det \bar{K}(m) = -\frac{\beta_{m,m+1}}{\beta_m} \frac{t_m^{L_m}}{t_m^2-1}. \quad (26)$$

When calculating $\bar{P}(m)$, it is helpful to define

$$t_m = e^{q_m} \quad (27)$$

and

$$A_m = \frac{1}{\beta_m} \frac{\sinh[(L_m-1)q_m]}{\sinh(q_m)}, \quad (28)$$

$$B_m = \frac{\cosh[(L_m - \frac{1}{2})q_m]}{\cosh(q_m/2)}, \quad (29)$$

and

$$C_m = 2\beta_m \tanh(q_m/2) \sinh(q_m L_m). \quad (30)$$

Then $\bar{P}(m)$ is for the present phonon model given by

$$\bar{P}(m) = \begin{pmatrix} -\beta_{m-1,m} A_m & \beta_{m-1,m} A_m + B_m \\ -\beta_{m-1,m} A_m - \frac{\beta_{m-1,m}}{\beta_{m,m+1}} B_m & \beta_{m-1,m} A_m + \left(1 + \frac{\beta_{m-1,m}}{\beta_{m,m+1}}\right) B_m + \frac{i}{\beta_{m,m+1}} C_m \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Use can be made of these results (24)–(31) for the calculation of the elements of the response function \bar{g} for a two-layer superlattice⁹.

D. The N -layered superlattice phonons

The expression giving the N -layer superlattice phonons appears in the denominator of $g(nl_3; n'l'_3)$. It was also shown⁸ that one can obtain N -layered superlattice modes directly from the trace of the (2×2) matrix $\bar{R}(N)$, namely

$$\cos(k'_j a_u) = \text{Tr} \bar{R}(N), \quad (32)$$

where

$$a_u = a_0 \sum_{i=1}^N L_i \quad (33)$$

is the width of the unit cell of the superlattice and k'_j the component of propagation vector \mathbf{k} perpendicular to the interfaces.

So for any value of the integer $N \geq 1$, the result given by Eq. (32), together with the Eqs. (23) and (27)–(31), enables us to find a closed form for the expression for N -layered superlattice phonons. In what follows, we give the results for $N=2$ and $N=3$.

The expression for a two-layer superlattice phonon is

$$2 \cos(k'_j a_u) = 2B_1 B_2 + \frac{C_1 C_2}{\beta_{12}} + \epsilon_{ij} \left[\frac{1}{2} A_i C_j + \frac{1}{\beta_{12}} C_i B_j \right], \quad (34)$$

where the Einstein summation rule for tensors is used and the Levi-Civita symbol is

$$\epsilon_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } i, j = 1 \text{ or } 2, i \neq j \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (35)$$

This result was given before¹ in a less condensed form.

The new result for three-layer superlattice phonons is

$$2 \cos(k'_z a_z) = 2B_1 B_2 B_3 + \frac{C_1 C_2 C_3}{\beta_{12} \beta_{23} \beta_{31}} + |\epsilon_{ijk}| \left[B_i A_j C_k + \frac{1}{2} B_i B_j C_k \left(\frac{1}{\beta_{12}} + \frac{1}{\beta_{23}} + \frac{1}{\beta_{31}} \right) + \frac{1}{2\beta_{jk}} A_i C_j C_k + \frac{1}{2\beta_{jk}} B_i C_j C_k \left(\frac{1}{\beta_{ki}} + \frac{1}{\beta_{ij}} \right) \right], \quad (36)$$

bearing in mind again the Einstein summation rule for tensors and the Levi-Civita symbol,

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{if } i, j, k \text{ is an even permutation of } i, j, k = 1, 2, 3 \\ -1 & \text{if } i, j, k \text{ is an odd permutation of } i, j, k = 1, 2, 3 \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (37)$$

This closed-form result (36) gives implicitly the dispersion relations for three-layer superlattice phonons (frequency versus wave vector). In Eq. (36), the wave-vector component k'_z normal to the layers is clearly visible; the wave-vector components k_1, k_2 parallel to the layers and the frequency ω appear in the quantities defined by Eqs. (10), (11), and (27)–(30). If there are many atomic layers in each superlattice slab, there will be a large number of solutions ω inside the reduced Brillouin zone. Equation (36) can be solved easily numerically in the same manner as for a two-layer superlattice.¹ The results of an explicit calculation of three-layer superlattice phonons will be given in a forthcoming paper.⁹ An extension to a four-layer semiconductor superlattice,⁹ and a comparison with forthcoming experimental results,¹⁰ are also in progress.

IV. DISCUSSION

A general theory of phonons in N -layered superlattices was presented for the first time in this paper, in the frame of a simple phonon model. Although the lattice model is somewhat simple, it is sufficient to illustrate the salient features.

The present formalism can be made to deal fairly straightforwardly⁸ with more sophisticated models, in or-

der to deal with acoustic as well as optic modes in ionic N -layered superlattices. In such more-realistic models, there will also be, in general, a coupling between transversely and longitudinally polarized modes.

A complete discussion of all possible extensions and improvements of the present paper would be very lengthy, especially when one recalls that the interface response theory applies to any composite system, without any limitations in the shape of the interfaces and the number of components. If the present paper stimulates more realistic and interesting future theoretical and experimental studies of composite systems, that will be a source of considerably satisfaction to its authors.

ACKNOWLEDGMENT

Two of us (J.M. and L.D.) would like to acknowledge the support of the Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas, Venezuela, and of the Centre National de la Recherche Scientifique, France, through their exchange program. The Laboratoire de Dynamique des Cristaux Moléculaires is in the Unité de Formation et de Recherche de Physique and is associated with the Centre National de la Recherche Scientifique (No. 801).

¹L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani, and O. Hardouin-Duparc, *Phys. Rev. B* **29**, 3138 (1984).

²See, for example, H. Sakaki, M. Tsuchiya, and J. Yoshino, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 295 (1985).

³L. Dobrzynski, *Surf. Sci. Rep.* **6**, 119 (1986).

⁴H. B. Rosenstock and G. F. Newell, *J. Chem. Phys.* **21**, 1607 (1953).

⁵E. N. Montroll and R. B. Potts, *Phys. Rev.* **102**, 72 (1956).

⁶See, for example, A. A. Maradudin, R. F. Wallis, and L. Dobrzynski, in *Surface Phonons and Polaritons*, Vol. 3 of

Handbook of Surfaces and Interfaces, edited by L. Dobrzynski (Garland, New York, 1980), p. 327.

⁷A. Akjouj, B. Sylla, P. Zielinski, and L. Dobrzynski, *J. Phys. C* **20**, 6137 (1987).

⁸L. Dobrzynski, U.S.T.L. Physics Report No. 15.7, 1986 (unpublished); *Prog. Surf. Sci.* (to be published).

⁹A. Noguera, T. Szwacka, A. Rodriguez, and J. Mendialdua (unpublished).

¹⁰D. J. Lockwood (private communication).

Theory of phonons in three- and four-layer superlattices

A. Rodriguez, A. Noguera, T. Szwacka, and J. Mendiola

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Mérida 5101, Venezuela

L. Dobrzynski

Equipe Internationale de Dynamique des Interfaces, Laboratoire de Dynamique des Cristaux Moléculaires, Unité de Formation et de Recherche de Physique, Université de Lille I, F-59655 Villeneuve d'Ascq CEDEX, France

(Received 7 December 1988; revised manuscript received 7 February 1989)

A theory of bulk and surface phonons in N -layer superlattices is presented. As an application we give, for the first time, closed-form expressions for surface phonons in three-layer superlattices and bulk phonons for four-layer superlattices, together with a few phonon dispersion curves.

I. INTRODUCTION

Phonons in two-layer superlattices have been studied theoretically and experimentally by Raman and Brillouin spectroscopies for several years. The aim of this paper is not to review the existing literature,¹ but rather to address phonons in N -layer superlattices. N -layer superlattices are formed out of a periodic repetition of a unit cell containing N ($N > 2$) different slabs. There was progress recently in producing such materials² and in studying them experimentally by Raman spectroscopy.³ We hope that the present theoretical paper will stimulate further experimental investigation of phonons in N -layer superlattices. In Sec. II, we first present briefly a simple three-dimensional phonon model and then give the surface-response operators necessary for a theoretical investigation of N -layer superlattice phonons. We show in Sec. III how the interface response theory⁴ enables us to calculate the response function and the bulk superlattice phonons. In Sec. IV, we give closed-form expressions for bulk phonons in three-layer and four-layer superlattices and surface phonons in three-layer superlattices.

II. BULK-PHONON MODEL AND THE SURFACE-RESPONSE OPERATORS

The potential energy ϕ_i associated with the lattice vibrations of an infinite simple-cubic lattice of type i (Ref. 5) considered here has the form

$$\phi_i = \frac{1}{2} \beta_i \sum_l \sum_p \sum_\alpha [u_\alpha(l) - u_\alpha(l+p)]^2, \quad (1)$$

where l ranges over all sites of the crystal, p ranges over the six nearest sites of the atom at l , and $u_\alpha(l)$ with $\alpha = 1, 2, 3$ denotes the component of the displacement of the atom at site l . This model is not rotationally invariant and does not give rise to Rayleigh surface waves on a (001) surface. Nevertheless, these deficiencies are unimportant for the qualitative study of many physical properties of surfaces⁶ and superlattices^{7,8} and, in particular, for the study of the transverse polarized phonons we will consider here. Let us recall also that most of the experi-

mental results for phonons in two-layered superlattices are still interpreted^{1,3} with the help of even simpler models (linear chain or transverse elastic vibrations). So the results of the present paper can be considered realistic for phonons polarized perpendicularly to the sagittal plane and do not address the phonons polarized within the sagittal plane nor Rayleigh waves polarized within this plane.

The bulk vibrational properties of the above crystal can be studied with the help of its bulk-response function \bar{G}_{0i} defined by

$$\bar{H}_{0i} \bar{G}_{0i} = \bar{I}, \quad (2)$$

where \bar{I} stands for the unit matrix and \bar{H}_{0i} for the bulk dynamical matrix. Taking advantage of the periodicity of the system in directions parallel to the (001) plane, we introduce the following two-dimensional vectors:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_\parallel(l) &= a_0(l_1 \hat{\mathbf{x}}_1 + l_2 \hat{\mathbf{x}}_2), \\ \mathbf{k}_\parallel(l) &= k_1 \hat{\mathbf{x}}_1 + k_2 \hat{\mathbf{x}}_2, \end{aligned} \quad (3)$$

(where a_0 is the lattice parameter and $\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{x}}_2$ are unit vectors), and a Fourier transformation of the response function,

$$\begin{aligned} G_{0i}(l, l'; \omega^2) &= \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} G_{0i}(l_3, l'_3; \mathbf{k}_\parallel \omega^2) \\ &\quad \times \exp\{i \mathbf{k}_\parallel \cdot [\mathbf{x}_\parallel(l) - \mathbf{x}_\parallel(l')]\}, \end{aligned} \quad (4)$$

where N^2 is the number of atoms in a (001) plane.

The corresponding bulk-response function is⁶

$$G_{0i}(l_3, l'_3; \mathbf{k}_\parallel \omega^2) = \frac{M_i}{\beta_i} \frac{t_i^{|l_3 - l'_3| + 1}}{t_i^2 - 1}, \quad (5)$$

where M_i is the mass of the atoms.

Let us now establish a slab by removing in the infinite crystal all interactions between the atoms situated in the $l_3 = 0$ and $l_3 = 1$ planes and also between those situated in the $l_3 = L_i$ and $l_3 = L_i + 1$. The corresponding cleavage operator is^{7,8}

$$V_{0i}(l_3, l'_3) = \frac{\beta_i}{M_i} (\delta_{l_3,0} \delta_{l'_3,0} + \delta_{l_3,1} \delta_{l'_3,1} - \delta_{l_3,0} \delta_{l'_3,1} - \delta_{l_3,1} \delta_{l'_3,0}) + \frac{\beta_i}{M_i} (\delta_{l_3, L_i} \delta_{l'_3, L_i} + \delta_{l_3, L_i+1} \delta_{l'_3, L_i+1} - \delta_{l_3, L_i} \delta_{l'_3, L_i+1} - \delta_{l_3, L_i+1} \delta_{l'_3, L_i}). \quad (6)$$

The elements of the surface-response operator \tilde{A}'_{si} formed⁸ out of the elements within the slab of $\tilde{A}_{0i} = \tilde{G}_{0i} \tilde{V}_{0i}$ are

$$A'_{si}(l_3, l'_3) = -\frac{1}{l_i+1} (\delta_{l'_3,1} l_i^{l_3} + \delta_{l'_3, L_i} l_i^{L_i-l_3+1}) \quad \text{with } 1 \leq l_3, l'_3 \leq L_i. \quad (7)$$

III. THE RESPONSE FUNCTION AND THE N -LAYER SUPERLATTICE PHONONS

Define for the N -layer superlattice a reference response function \tilde{G} as a block-diagonal matrix formed out of only the elements of the bulk-response functions \tilde{G}_{0i} contained within the space of definition of each slab, namely, with the notation

$$m \equiv nN + i \equiv (n, i), \quad (8)$$

where n labels the unit cell formed out of N different slabs, $1 \leq i \leq N$ the position of the i th slab in this unit cell, and l_3 the atomic (001) plane within the i th slab:

$$G(m, l_3; m', l'_3) = \delta_{mm'} G_m(l_3, l'_3) \quad \text{with } 1 \leq l_3, l'_3 \leq L_m, \quad (9)$$

where $\delta_{mm'}$ is the usual Kronecker symbol.

The response function \tilde{g} of the N -layer superlattice can be calculated directly from the reference response function \tilde{G} through the universal relation⁴

$$(\tilde{I} + \tilde{A}') \tilde{g} = \tilde{G}, \quad (10)$$

where the interface operator \tilde{A}' is defined⁴ by

$$\tilde{A}' = \tilde{A}'_s + \tilde{G} \tilde{V}_I, \quad (11)$$

\tilde{A}' is the block-diagonal surface-response operator formed out of the $A'_s(m, l_3; m', l'_3)$ given by

$$\tilde{A}'_s(m, l_3; m', l'_3) = \delta_{mm'} A'_{sm}(l_3, l'_3) \quad (12)$$

and \tilde{V}_I is the coupling operator

$$V_I(m, l_3; m', l'_3) = \delta_{mm'} (\delta_{l_3, L_m} \delta_{l'_3, L_m} \beta_{m, m+1} + \delta_{l_3, 1} \delta_{l'_3, 1} \beta_{m-1, m}) - \delta_{m+1, m} \delta_{l_3, L_m} \delta_{l'_3, 1} \beta_{m, m+1} - \delta_{m, m'-1} \delta_{l_3, 1} \delta_{l'_3, L_{m-1}} \beta_{m, m-1}, \quad (13a)$$

where the force constants $\beta_{m, m'}$ coupling the interface atoms are taken as mean values between the bulk force constants of the adjacent layers

$$\beta_{m, m'} = \frac{\beta_m + \beta_{m'}}{2}. \quad (13b)$$

The general solution of Eq. (10) for any model of an N -layer superlattice was given before.⁹ For the present model, the elements $g(m, l_3; m', l'_3)$ are scalars and can be calculated in closed form with the help of the following (2×2) matrices:

$$\tilde{K}(m) = \begin{pmatrix} A'(m, 1; m, L_m) & A'(m, 1; m+1, 1) \\ 1 + A'(m, L_m; m, L_m) & A'(m, L_m; m+1, 1) \end{pmatrix}, \quad (14)$$

$$\tilde{H}(m) = \begin{pmatrix} A'(m, 1; m-1, L_{m-1}) & 1 + A'(m, 1; m, 1) \\ A'(m, L_m; m-1, L_{m-1}) & A'(m, L_m; m, 1) \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\tilde{P}(m) = -\tilde{K}^{-1}(m) \tilde{H}(m), \quad (16)$$

and

$$\tilde{R} \equiv \tilde{R}(N, 0) = \tilde{P}(N) \tilde{P}(N-1) \cdots \tilde{P}(1). \quad (17)$$

When calculating $\tilde{P}(m)$ it is helpful to define

$$t_m = e^{q_m}, \quad (18)$$

$$A_m = \frac{1}{\beta_m} \frac{\sinh[(L_m - 1)q_m]}{\sinh(q_m)}, \quad (19)$$

$$B_m = \frac{\cosh[(L_m - \frac{1}{2})q_m]}{\cosh(q_m/2)}, \quad (20)$$

and

$$C_m = 2\beta_m \tanh(q_m/2) \sinh(q_m L_m). \quad (21)$$

The $\tilde{P}(m)$ is, for the present phonon model, given by

$$\tilde{P}(m) = \begin{pmatrix} -\beta_{m-1, m} A_m & \beta_{m-1, m} A_m + B_m \\ -\beta_{m-1, m} A_m - \frac{\beta_{m-1, m}}{\beta_{m, m+1}} B_m & \beta_{m-1, m} A_m + \left[1 + \frac{\beta_{m-1, m}}{\beta_{m, m+1}} \right] B_m + \frac{1}{\beta_{m, m+1}} C_m \end{pmatrix}. \quad (22)$$

With the help of these expressions, Eq. (10) can be written¹⁰ as

$$\bar{\mathbf{K}}(m) \begin{bmatrix} g(m, L_m; m', l') \\ g(m+1, 1; m', l') \end{bmatrix} = -\bar{\mathbf{H}}(m) \begin{bmatrix} g(m-1, L_{m-1}; m', l') \\ g(m, 1; m', l') \end{bmatrix} + \delta_{mm'} \begin{bmatrix} G_m(1, l') \\ G_m(L_m, l') \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Using N times this equation, one obtains

$$\begin{bmatrix} g(n, N, L_N; n', i', l') \\ g(n+1, 1, 1; n', i', l') \end{bmatrix} = \bar{\mathbf{R}}(N, 0) \begin{bmatrix} g(n-1, N, L_N; n', i', l') \\ g(n, 1, 1; n', i', l') \end{bmatrix} + \delta_{nn'} \bar{\mathbf{R}}(N, i') \bar{\mathbf{K}}^{-1}(i') \begin{bmatrix} G_i(1, l'_3) \\ G_i(L_i, l'_3) \end{bmatrix}. \quad (24)$$

The dispersion relation for the eigenvalues of the N -layer superlattices is shown to be^{9,10}

$$2 \cos(k'_3 a_u) = \text{Tr} \bar{\mathbf{R}}(N, 0), \quad (25a)$$

where

$$a_u = a_0 \sum_{i=1}^N L_i \quad (25b)$$

is the width of the unit cell of the superlattice and k'_3 is the component of the propagation vector perpendicular to the interfaces.

From Eq. (24) one easily obtains

$$\begin{bmatrix} g(n, N, L_N; n', i', l'_3) + g(n-2, N, L_N; n', i', l'_3) \\ g(n+1, 1, 1; n', i', l'_3) + g(n-1, 1, 1; n', i', l'_3) \end{bmatrix} = (R_{11} + R_{22}) \bar{\mathbf{I}} \begin{bmatrix} g(n-1, N, L_N; n', i', l'_3) \\ g(n, 1, 1; n', i', l'_3) \end{bmatrix} + \delta_{nn'} \bar{\mathbf{B}} - \delta_{n-1, n'} \bar{\mathbf{R}}^{-1} \bar{\mathbf{B}}, \quad (26)$$

where

$$\bar{\mathbf{B}} = \bar{\mathbf{R}}(N, i') \bar{\mathbf{K}}^{-1}(i') \begin{bmatrix} G_i(1, l'_3) \\ G_i(L_i, l'_3) \end{bmatrix}. \quad (27)$$

The general solution of Eq. (26) is^{10,11}

$$\begin{bmatrix} g(n-1, N, L_N; n', i', l'_3) \\ g(n, 1, 1; n', i', l'_3) \end{bmatrix} = \frac{t}{t^2-1} (\bar{\mathbf{I}} t^{|n-n'|} - \bar{\mathbf{R}}^{-1} t^{|n-n'-1|}) \bar{\mathbf{B}}, \quad (28)$$

with

$$t = \begin{cases} \eta - (\eta^2 - 1)^{1/2}, & \eta > 1 \\ \eta + i(1 - \eta^2)^{1/2}, & -1 < \eta < 1 \\ \eta + (\eta^2 - 1)^{1/2}, & \eta < -1 \end{cases} \quad (29)$$

and

$$2\eta = R_{11} + R_{22}. \quad (30)$$

With the help of the definitions (14) and (17), and using Eq. (23), one also obtains¹⁰

$$\begin{bmatrix} g(n, i, L_i; n', i', l'_3) \\ g(n, i+1, 1; n', i', l'_3) \end{bmatrix} = \left[\frac{t}{t^2-1} [\bar{\mathbf{R}}(i, 0) \bar{\mathbf{R}}(N, i') t^{|n-n'|} - \bar{\mathbf{R}}(i, 0) \bar{\mathbf{R}}^{-1}(i', 0) t^{|n-n'-1|}] + \delta_{nn'} \bar{\mathbf{R}}(i, i') \right] \times \bar{\mathbf{K}}^{-1}(i') \begin{bmatrix} G_i(1, l'_3) \\ G_i(L_i, l'_3) \end{bmatrix}. \quad (31)$$

IV. THREE- AND FOUR-LAYER SUPERLATTICES

A. Bulk dispersion relations

The dispersion relation for the three-layer superlattice was presented before.⁸ We recall it here, as we will need it for the study of surface phonons in three-layer superlattices,

$$2 \cos(k'_3 a_u) = 2B_1 B_2 B_3 + \frac{C_1 C_2 C_3}{\beta_{12} \beta_{23} \beta_{31}} + |\epsilon_{ijk}| \left[B_i A_j C_k + \frac{1}{2} B_i B_j C_k \left(\frac{1}{\beta_{12}} + \frac{1}{\beta_{23}} + \frac{1}{\beta_{31}} \right) + \frac{1}{2\beta_{jk}} A_i C_j C_k + \frac{1}{2\beta_{jk}} B_i C_j C_k \left(\frac{1}{\beta_{ki}} + \frac{1}{\beta_{ij}} \right) \right], \quad (32)$$

where

$$a_u = a_0 \sum_{i=1}^3 L_i, \quad (33)$$

and bearing in mind the Einstein summation rule (over repeated indices) for tensors and the Levi-Civita completely antisymmetric tensor of rank 3,

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 \\ -1 \\ 0 \end{cases} \text{ if } i, j, k \text{ is an } \begin{cases} \text{even} \\ \text{odd} \\ \text{otherwise} \end{cases} \text{ permutation of } i, j, k = 1, 2, 3. \quad (34)$$

Equation (32) can be solved easily numerically. In Fig. 1 we present the results for the band structure of a superlattice with two atomic planes in each layer. We assume that the three crystals differ only by their atomic masses, while the force constants are identical ($\beta_1 = \beta_2 = \beta_3$). The bulk phonons of such a superlattice are inside the shaded areas. Between these shaded areas are gaps in which are represented surface phonons. We will discuss them in Sec. IV B.

We have also calculated the dispersion relation for a four-layer superlattice and it is given by

$$\begin{aligned} 2 \cos(k'_3 a_u) = & 2B_1 B_2 B_3 B_4 + \frac{C_1 C_2 C_3 C_4}{\beta_{12} \beta_{23} \beta_{34} \beta_{14}} + C_1 C_3 A_2 A_4 + A_1 A_3 C_2 C_4 \\ & + \sum_{\substack{i \neq j \neq k \neq l \\ i < j}} B_i B_j A_k C_l + \sum_{\substack{i \neq j \neq k \neq l \\ i < j < k}} \left[C_i C_j C_k C_l \left(\frac{1}{\beta_{ij} \beta_{jk} \beta_{kl}} + \frac{1}{\beta_{li} \beta_{ij} \beta_{jk}} \right) + C_i C_j C_k C_l \frac{1}{\beta_{i+1, l} + 2\beta_{l+2, l+3}} \right. \\ & \left. + B_i B_j B_k C_l \left(\frac{1}{\beta_{12}} + \frac{1}{\beta_{23}} + \frac{1}{\beta_{34}} + \frac{1}{\beta_{14}} \right) \right] \\ & + \sum_{\substack{i \neq j \neq k \neq l \\ i < j \\ k < l}} B_i B_j C_k C_l \left\{ \left(\frac{1}{\beta_{ik}} + \frac{1}{\beta_{il}} \right) \left(\frac{1}{\beta_{jl}} + \frac{1}{\beta_{jk}} \right) \delta_{i+1, j-1} \right. \\ & \left. + \frac{1}{\beta_{kl}} \left[\frac{1}{\beta_{ij}} + \frac{\delta_{l+1, i} + \delta_{i+1, l}}{\beta_{li}} + \frac{\delta_{j+1, l} + \delta_{j, l+1}}{\beta_{jl}} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\delta_{j+1, k} + \delta_{k+1, j}}{\beta_{kj}} + \frac{\delta_{k+1, i} + \delta_{i+1, k}}{\beta_{ki}} \right] (\delta_{i+1, j} + \delta_{i, j+1}) \right\} \\ & + \sum_{\substack{i \neq j \neq k \neq l \\ i < j}} C_i C_j A_k B_l \left[\frac{\delta_{i+1, j}}{\beta_{ij}} + \left(\frac{1}{\beta_{ij}} + \frac{1}{\beta_{li}} \right) \delta_{k+1, l-1} \right], \quad (35) \end{aligned}$$

where $a_u = a_0 \sum_{i=1}^4 L_i$. In Figs. 2 and 3 we present the results for the band structure of a superlattice with two atomic planes in each film. We first assume (Fig. 2) that the four materials differ only by their masses, while the force constants are identical. We next assume (Fig. 3) that all the atoms have the same mass, but the force constants are different and at the interfaces these constants are taken to be as defined by Eq. (13b).

The long-wavelength limit of these bulk phonons for three- and four-layer superlattices can be compared with

the transverse polarized vibrations in such superlattices reported and discussed before.¹¹ The results presented here give, in fact, the departure from linear elasticity of the transverse polarized vibrations of three- and four-layer superlattices.¹¹

B. Surface phonons for a three-layer superlattice

In order to obtain a semi-infinite three-layer superlattice with a free surface, we cleave the infinite superlattice

by removing all interactions between two adjacent slabs. This cleavage procedure enables us to calculate the response function \bar{g}_s of the semi-infinite superlattice from the knowledge of the response function \bar{g} of the infinite superlattice. For the purpose of studying surface-localized modes, we need only to calculate one element of \bar{g} . For a semi-infinite three-layer superlattice having a slab of type 1 at the surface and below slab 2 and then slab 3, and so on, one finds, with the help of Eq. (31),

$$g_s(1,1,1;1,1,1) = -\frac{A_s(\omega^2)-t}{D(\omega^2)}, \quad (36)$$

where

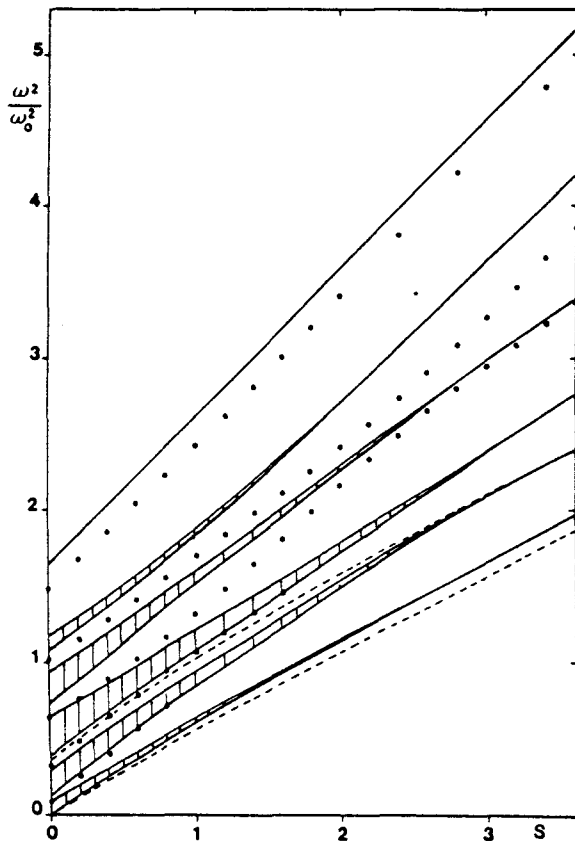


FIG. 1. Phonon band structure ω^2/ω_0^2 with $\omega_0^2=2\beta_1/M_1$ of a three-layer superlattice (with two atomic planes in each layer) as a function of the parameter $S=2-\cos k_1 a_0-\cos k_2 a_0$. The three crystals differ by their atomic masses ($M_2=1.5M_1$ and $M_3=2M_1$), while the force constants are identical everywhere ($\beta_1=\beta_2=\beta_3=\beta_{12}=\beta_{23}=\beta_{31}$). The five shaded areas and the curve highest in frequency represent the bulk bands. In the gaps between these bulk bands are represented the surface-phonon dispersion curves. The four highest curves represented by the dotted lines are for a surface terminated by two planes of crystal 1 having below them two planes of crystal 2 and then two planes of crystal 3, and so on. The two lowest curves represented by the dashed lines are for a surface terminated by two planes of crystal 3 having below them two planes of crystal 1 and then two planes of crystal 2, and so on.

$$A_s(\omega^2) = B_1 B_2 B_3 + A_1 C_2 B_3 + A_1 B_2 C_3 + B_1 A_2 C_3 + \frac{1}{\beta_{23}}(A_1 C_2 C_3 + B_1 B_2 C_3) + \frac{1}{\beta_{12}}(B_1 C_2 B_3 + B_1 B_2 C_3) + \frac{B_1 C_2 C_3}{\beta_{12} \beta_{31}}, \quad (37)$$

$$D(\omega^2) = B_1 B_2 C_3 + B_1 C_2 B_3 + C_1 B_2 B_3 + C_1 A_2 C_3 + \frac{1}{\beta_{23}}(C_1 B_2 C_3 + B_1 C_2 C_3) + \frac{1}{\beta_{12}}(C_1 C_2 B_3 + C_1 B_2 C_3) + \frac{C_1 C_2 C_3}{\beta_{12} \beta_{23}}. \quad (38)$$

From the poles of this response function, we find the frequencies ω_s of the surface modes localized at the free surface ($n=1, i=1, l_3=1$) and decaying inside the bulk situated at $n > 1$ and $l_3 > 1$. They are given by

$$D(\omega_s^2) = 0 \quad (39)$$

with the following condition,

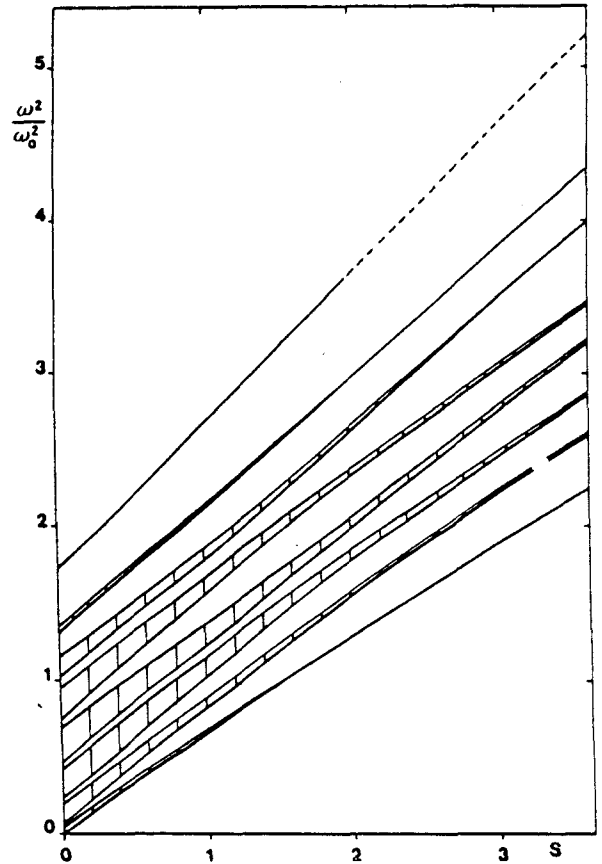


FIG. 2. Phonon band structure ω^2/ω_0^2 with $\omega_0^2=2\beta_1/M_1$ of a four-layer superlattice (with two atomic planes in each layer) as a function of the parameter $S=2-\cos k_1 a_0-\cos k_2 a_0$. The four crystals differ by their atomic masses ($M_2=1.25M_1, M_3=1.5M_1$, and $M_4=1.75M_1$), while the force constants are identical everywhere.

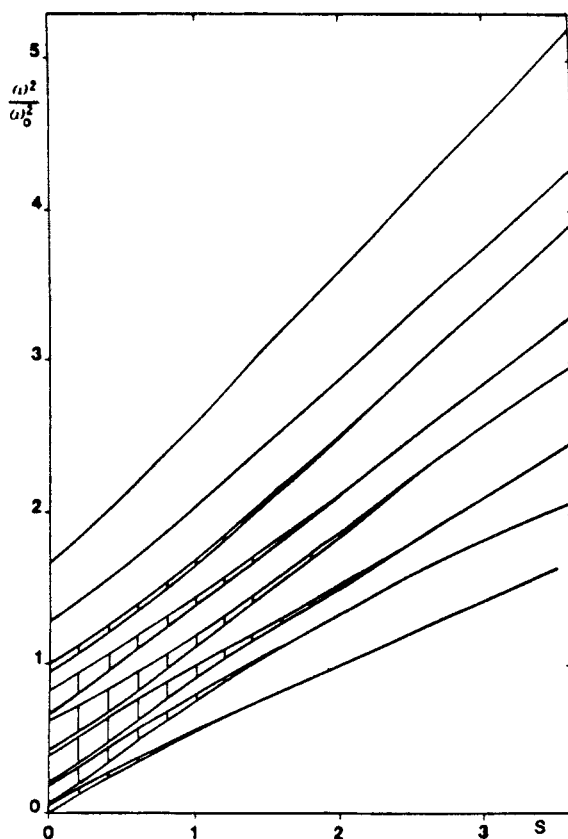


FIG. 3. Phonon band structure ω^2/ω_0^2 with $\omega_0^2 = 2\beta_1/M_1$ of a four-layer superlattice (with two atomic planes in each layer) as a function of the parameter $S = 2 - \cos k_1 a_0 - \cos k_2 a_0$. The four crystals differ by their force constants [$\beta_1 = 2.5\beta_4$, $\beta_2 = 2.0\beta_4$, $\beta_3 = 1.5\beta_4$, and $\beta_{ij} = (\beta_i + \beta_j)/2$], while the masses are identical everywhere.

$$|A_s| > 1, \quad (40)$$

which ensures⁷ that these modes decay inside the bulk of the superlattice.

In order to illustrate this result, we investigated for the three-layer superlattice described in Sec. IV A and Fig. 1 the occurrence of surface phonons in the gaps between the bulk bands. We have first chosen the case for which the lighter slab 1 is at the surface. In that case, four branches of surface phonons were found and are

represented by dotted lines. Then we chose the case for which the heavier slab 3 is at the surface. For this case two branches of surface phonons appear and are represented by dashed lines.

The surface mode lying below the lowest bulk band is similar in the long-wavelength limit to Love waves in several respects. This surface wave exists when the outermost medium has the lower transverse sound velocity. In the large- k_{\parallel} limit the velocity of this mode approaches the transverse sound velocity in the outermost (slower) medium.

In contrast, the surface modes that lie between the gaps of the bulk modes may also exist even if the outermost medium has a higher transverse sound velocity.

The long-wavelength limit of these surface modes can also be compared to the transverse elastic waves reported before for two-layer¹² and three- and four-layer¹³ superlattices. The results presented here also provide the departure from linear elasticity of the surface transverse elastic waves reported before¹³ for three- and four-layer superlattices.

V. CONCLUSIONS

In this paper we obtained for the first time bulk phonons for a four-layer superlattice and surface phonons for a three-layer superlattice. These results were obtained with the help of a three-dimensional lattice model, which addresses only transversely polarized lattice vibrations in such superlattices. Although simple, the model is sufficient to illustrate the salient features. In more realistic models, the coupling between transverse and longitudinally polarized modes will have to be included, especially if one would like to study the Rayleigh waves on such materials.¹⁴ A complete list of all other possible improvements to the present work would be very lengthy and will have to be considered in relation with the forthcoming experimental results.³

ACKNOWLEDGMENTS

Three of us (A.R., J.M., and L.D.) would like to acknowledge the support of the Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas, Venezuela, and of the Centre National de la Recherche Scientifique, France, through their exchange program. The Laboratoire de Dynamique des Cristaux Moléculaires is Unité Associée au Centre National de la Recherche Scientifique No. 801.

¹See, for example, for a literature review, B. Djafari-Rouhani and J. Sapiel, Surf. Sci. Rep. (to be published); J. H. Worlock, *Proceedings of the Second International Conference on Phonon Physics*, edited by J. Kollar et al. (World Scientific, Singapore, 1985), p. 506; M. V. Klein, IEEE J. Quantum Electron. QE-22, 1970 (1986).

²L. Esaki, L. L. Chang, and E. E. Mendez, Jpn. J. Appl. Phys. 20, L529 (1981).

³D. J. Lockwood, M. W. C. Dharma-wardana, J. M. Baribeau, and D. C. Houghton, Phys. Rev. B 35, 2243 (1987); D. J.

Lockwood (private communication).

⁴L. Dobrzynski, Surf. Sci. Rep. 6, 119 (1986).

⁵H. B. Rosenstock and G. F. Newell, J. Chem. Phys. 21, 1607 (1953); E. N. Montroll and R. B. Potts, Phys. Rev. 102, 72 (1956).

⁶See, for example, A. A. Maradudin, R. F. Wallis, and L. Dobrzynski, in *Handbook of Surfaces and Interfaces*, edited by L. Dobrzynski (Garland Scientific, Technical, Professional, and Medical, New York, 1980), Vol. 3, p. 327.

⁷L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani, and O. Hardouin-Duparc,

- Phys. Rev. B **29**, 3138 (1984).
- ⁸T. Szwacka, A. Noguera, A. Rodriguez, J. Mendialdua, and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B **37**, 8451 (1988).
- ⁹L. Dobrzynski, Prog. Surf. Sci. **26**, 103 (1987).
- ¹⁰P. Masri and L. Dobrzynski, Surf. Sci. **198**, 285 (1988).
- ¹¹B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, Solid State Commun. **62**, 609 (1987).
- ¹²R. E. Camley, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B **27**, 7318 (1983).
- ¹³J. Mendialdua, T. Szwacka, A. Rodriguez, and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B **39**, 10 674 (1989).
- ¹⁴B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, O. Hardouin Duparc, R. E. Camley, and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B **28**, 1711 (1983).

CHAPITRE III
SUPERRESEAUX A N-COUCHES CAS CONTINU

III.1.- INTRODUCTION

Dans le deuxième chapitre on a traité le problème des phonons dans les superréseaux à N-couches et on y a supposé un modèle discret pour les N matériaux intégrant la super-cellule élémentaire. Dans ce chapitre nous allons traiter le cas des phonons de volume et de surface dans les superréseaux, mais dans l'approximation des milieux continus. C'est à dire que pour des conditions telles que, pour une onde se propageant dans ce milieu, la longueur d'onde λ est beaucoup plus grande que les distances interatomiques.

Le modèle proposé se caractérise par le fait qu'il possède à l'intérieur de son domaine de continuité D_∞ , un espace discret $M^{(3)}$ associé aux interfaces. Chacune de ces interfaces est générée en mettant en contact deux surfaces libres appartenant à deux couches de matériaux différents et contigües dans la superstructure.

La théorie de Réponse des Interfaces développée pour les matériaux composites continus [12], permet de calculer les relations de dispersion pour les phonons de volume et de surface par une méthode totalement analytique dans le cas de notre modèle.

La dynamique des ondes dans les milieux continus est le but de la théorie d'élasticité, qu'on a brièvement exposée dans le chapitre I. Maintenant nous allons employer les équations fondamentales de cette théorie pour définir l'opérateur H_{oi} et la fonction Réponse G_{oi} associée aux ondes élastiques dans le matériau i , dans son domaine de définition D_∞ . Cet opérateur et la fonction correspondante sont le point de départ pour l'étude théorique du superréseau et de ses propriétés respectives.

Ensuite on décrira le modèle du superréseau à N-couches et les cas particuliers traités ($N= 3,4$); les hypothèses fondamentales et les notations employées sont aussi données.

Ensuite l'opérateur H_{oi} et la fonction correspondante G_{oi} du i -ème matériau dans le domaine D_{∞} sont définis, et on discutera les retombées de certaines des hypothèses formulées pour simplifier le calcul. Finalement une publication montre les résultats obtenus.

III.2.- MODELE, HYPOTHESES ET NOTATION

Le modèle proposé, dans cette approximation des milieux continus, est présenté dans la Fig. III.1. De la même façon que dans le cas discret, le superréseau est formé par une répétition périodique de la super-cellule élémentaire n ($-\infty < n < \infty$), dans une direction donnée (X_3).

La super-cellule est constituée par N couches de matériaux différents signalés par l'indice i ($1 \leq i \leq N$). Dans chaque lame i , dont l'épaisseur est $2a_i$, les propriétés du matériau sont caractérisées par la densité ρ_i et les constantes élastiques $C_{44}(\omega)$, $C_{11}(\omega)$. Chaque lame i est construite par clivage du matériau infini isotrope et homogène i dans son domaine D_{∞} , Fig III.2a .

On peut indiquer chaque lame d'une autre manière par rapport à l'étendue infinie du superréseau, en employant l'indice m . Ce paramètre entier permet de placer une couche, dans l'intervalle $(-\infty, \infty)$ en mettant:

$$m = Nn + i \equiv (m, i)$$

Les coupes effectuées pour construire chaque lame et l'empilement suivant pour former le superréseau, produit un ensemble discret d'interfaces qui définissent le domaine M (domaine des interfaces). Pour signaler chaque élément dans ce

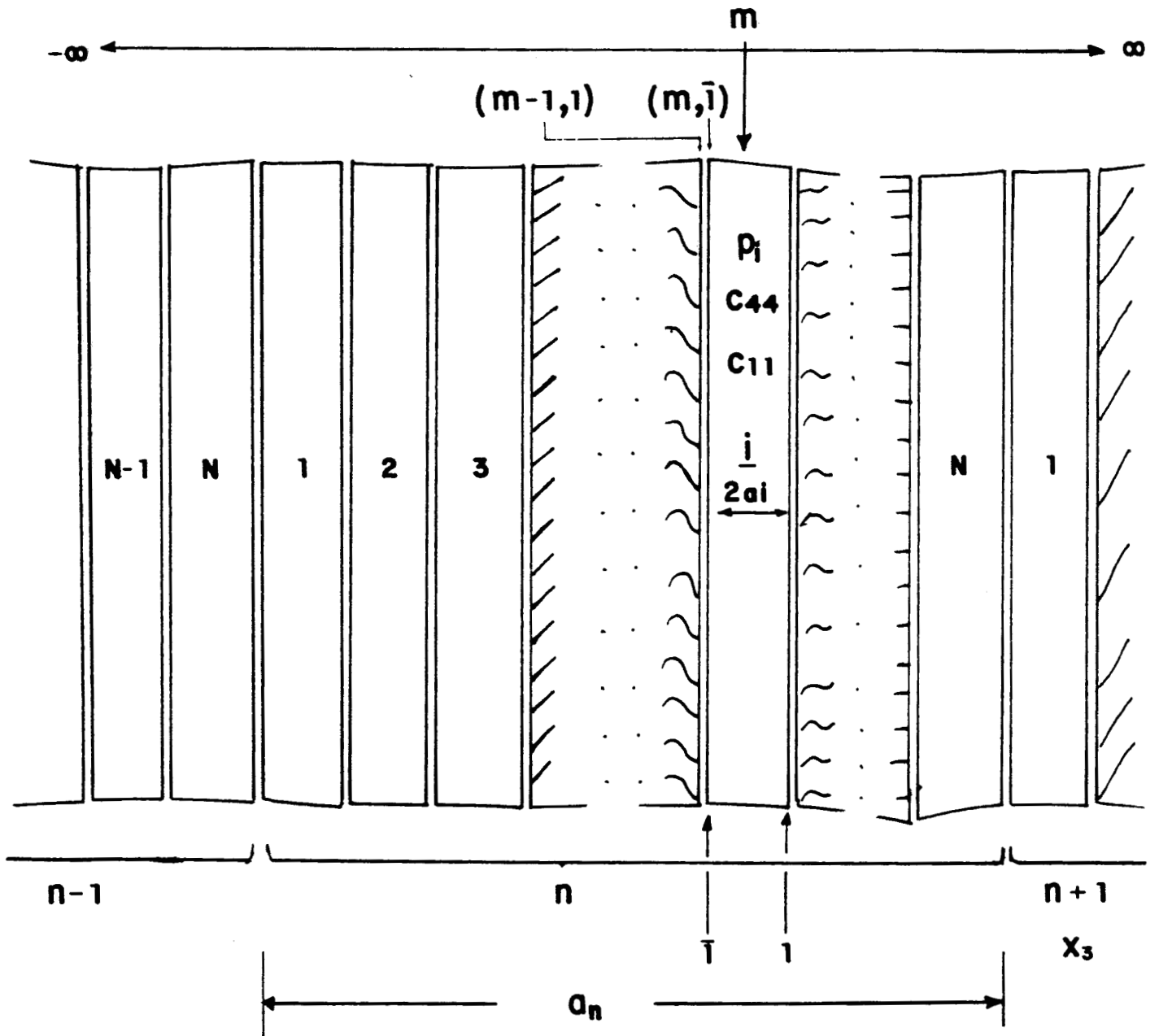


Figure III.1. -Modèle de superréseau à N-couches, cas continu.

domaine, on introduit une variable sans dimensions Z .

$$-1 \leq Z \equiv \frac{x_3}{a} \leq 1$$

où x_3 est la variable dans la direction de croissance du superréseau; a_i est la moitié de l'épaisseur de la lame i et $\bar{i}, 1$ identifient les surfaces de la lame (Fig. III.2b). Avec cette définition il est possible d'indiquer les interfaces adjacentes avec les symboles (n, i, Z_n) avec $Z = \pm 1$, ou bien par (m, \bar{i}) et $(m, 1)$. Remarquons que, avec cette dernière notation, il y a deux façons équivalentes de signaler une interface: ainsi (m, \bar{i}) ou $(m-1, 1)$.

Dans les cas particuliers des superréseaux avec 3 ou 4 matériaux différents dans chaque cellule élémentaire on utilise la notation décrite et les hypothèses énoncées. Une illustration graphique est détaillée dans la Figure III.3 et 4.

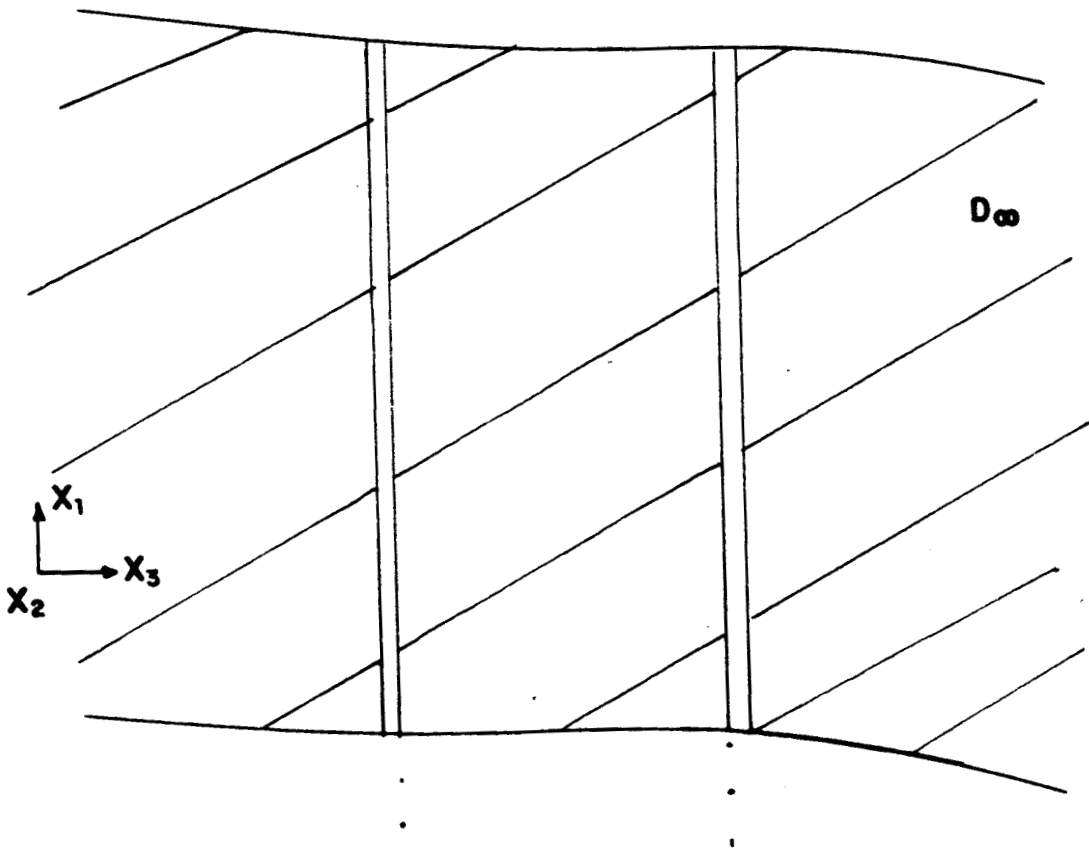
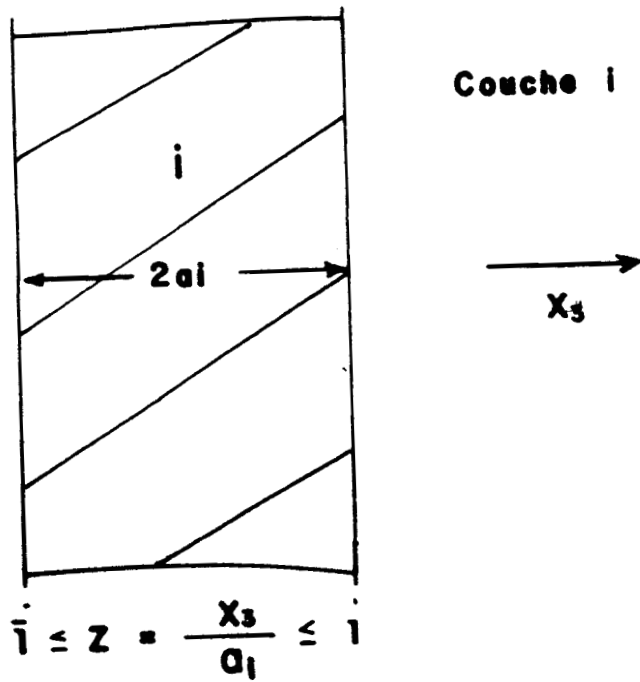


Figure III.2.-Matériau i dans un domaine infini D_∞ .



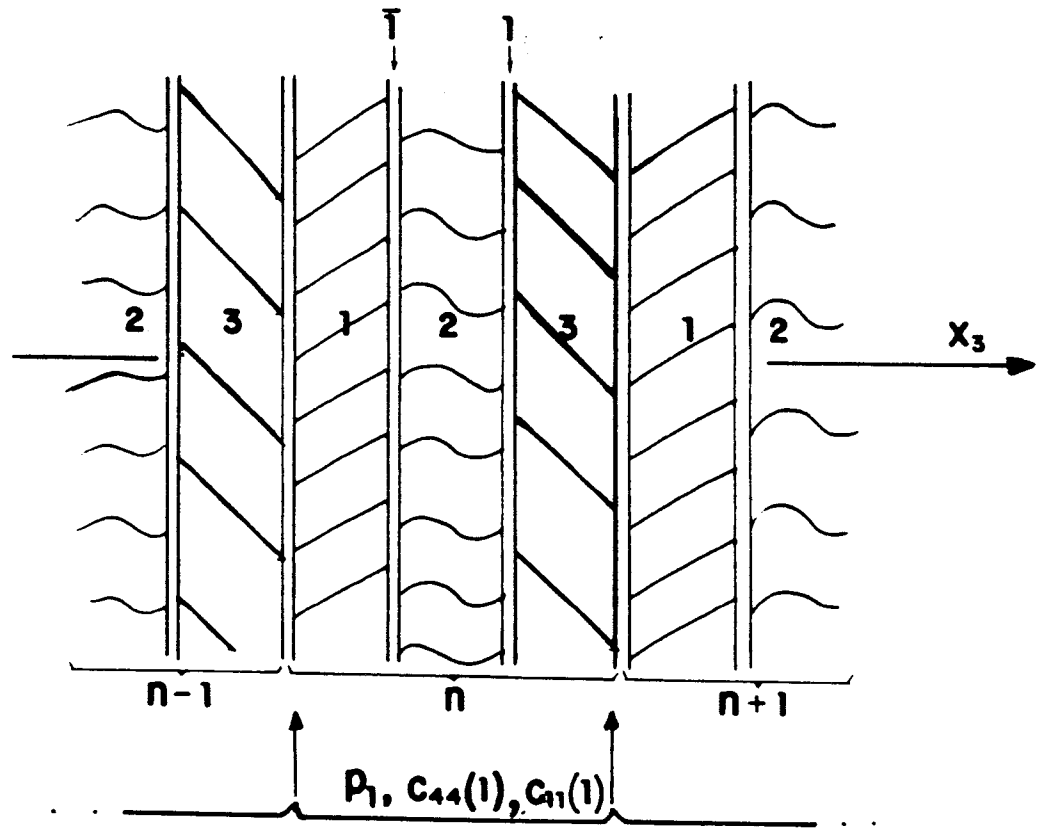


Figure III.3-Schéma de superréseau à 3-couches.

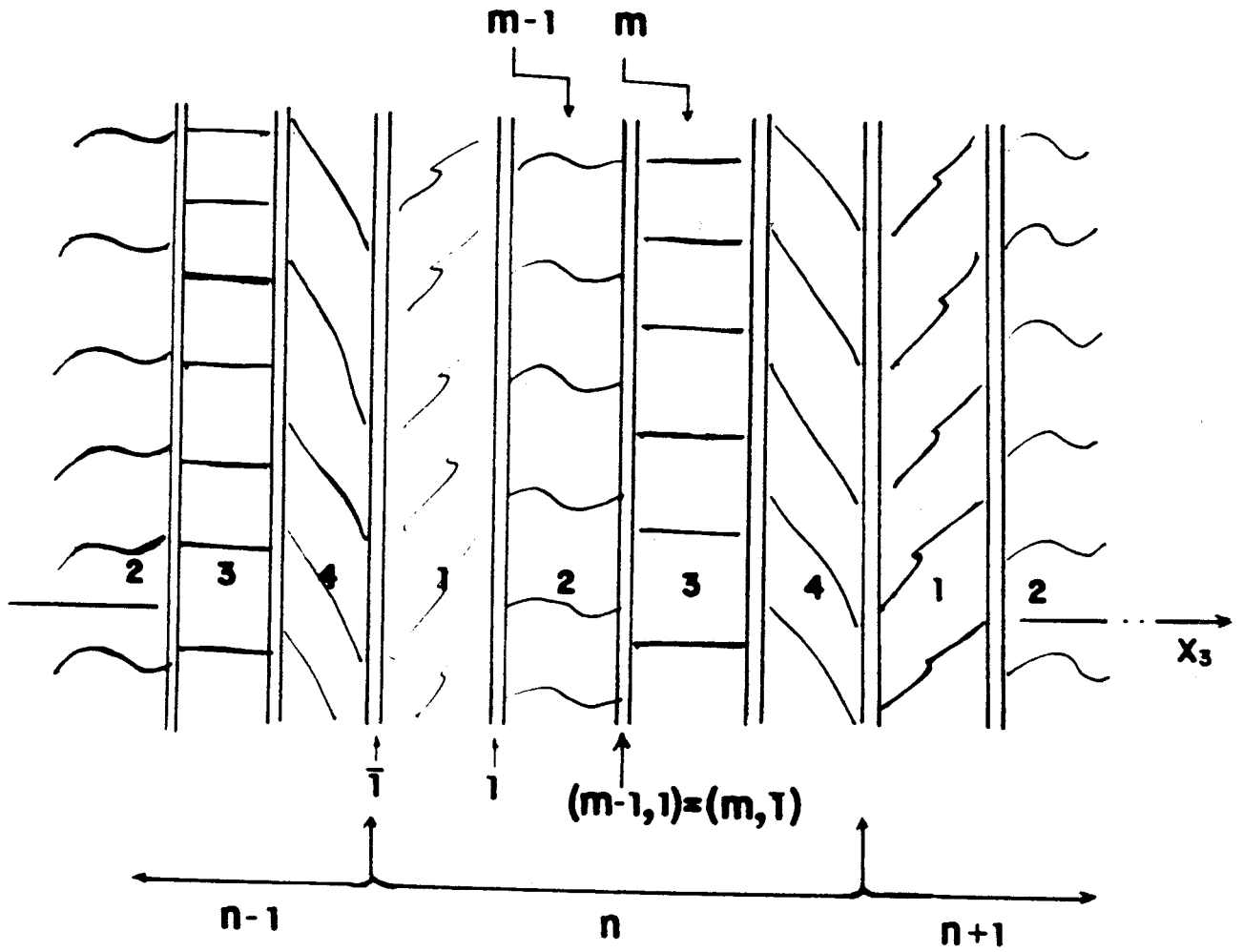


Figure III.4-Schéma de superréseau à 4-couches.

III.3 OPERATEUR $\overset{\leftrightarrow}{H}_{oi}$ ET FONCTION REPONSE $\overset{\leftrightarrow}{G}_{oi}$

(Matériau i dans son domaine D_{∞})

L'équation de la théorie d'élasticité (chapitre I) permet d'écrire:

$$\sum_{\mu} \left\{ -\rho \delta_{\alpha\mu} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \sum_{\beta\nu} \left[\frac{\partial C_{\alpha\beta\mu\nu}}{\partial x_{\beta}} \right] \frac{\partial}{\partial x_{\nu}} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_{\beta} \partial x_{\nu}} \right\} U_{\alpha}(x,t) = 0 \quad (1)$$

($\alpha, \beta, \mu, \nu = 1, 2, 3$),

qui donne en fonction du temps, le déplacement relatif U_{α} , dans la direction α , d'un point du matériau placé dans la position \vec{X} , lorsqu'une onde acoustique se propage dans le milieu. Dans l'équation (1) nous avons supposé qu'il tenseur d'élasticité $C_{\alpha\beta\mu\nu}$ peut dépendre de la variable \vec{X} , comment nous verrons dans le cas des superréseaux.

Dans les milieux isotropes infinis les constantes élastiques $C_{\alpha\beta\mu\nu}$ ne dépendent pas de \vec{X} ce qui réduit l'équation (1) à:

$$\sum_{\mu} \left[-\rho \delta_{\alpha\mu} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_{\beta} \partial x_{\nu}} \right] U_{\alpha}(\vec{x},t) = 0 \quad (2)$$

Pour les phonons acoustiques l'opérateur $\overset{\leftrightarrow}{H}_{oi}(\vec{x},t)$, dans le matériau i et le domaine D_{∞} , est défini par:

$$H_{\alpha\mu} \equiv -\rho \delta_{\alpha\mu} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_{\beta} \partial x_{\nu}} \quad (3)$$

Cet opérateur est constitué par un arrangement matriciel d'équations différentielles, où les propriétés du matériau sont décrites par la densité ρ et les constantes élastiques $C_{\alpha\beta\mu\nu}$.

Dans la théorie de la Fonction Réponse des Interfaces pour les milieux continus est définie la fonction réponse $G_{oi}^{\leftrightarrow}(\vec{X}, \vec{X}', tt')$ par l'équation :

$$H_{oi}^{\leftrightarrow}(\vec{x}, t) G_{oi}^{\leftrightarrow}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = I \delta(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t') \quad \vec{x}, \vec{x}' \in D_{\infty} \quad (4)$$

ou bien par le système d'équations :

$$\sum_{\mu} H_{\alpha\mu}(\vec{x}, t) G_{\mu\nu}(\vec{x}, \vec{x}', t, t') = \delta_{\alpha\nu} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t') \quad (5)$$

Bref, la fonction réponse G_{oi}^{\leftrightarrow} est un arrangement matriciel des fonctions qui sont une solution de l'opérateur H_{oi}^{\leftrightarrow} .

L'application de l'analyse de Fourier à l'opérateur $H_{oi}^{\leftrightarrow}(\vec{x}, t)$ et à la fonction réponse $G_{oi}^{\leftrightarrow}(\vec{x}, \vec{x}', tt')$ dans les variables $(t, t' \rightarrow \omega)$ réduit l'équation(5) à une dépendance en fréquence:

$$\sum_{\mu} \left\{ \rho_i \omega^2 \delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_{\beta} \partial x_{\nu}} \right\} G_{\mu\gamma}(\vec{x}, \vec{x}', \omega) = \delta_{\alpha\gamma} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (6)$$

Il est encore possible de simplifier l'équation en considérant les hypothèses de l'isotropie et l'homogénéité du

milieu, ce qui réduit la dépendance fonctionnelle à une seule dimension, dans la partie spatiale \vec{x} .

En ce qui concerne le modèle de superréseau proposé (Fig.III.1), on remarque que chaque couche de la structure lamellaire est limitée par des surfaces planes parallèles au plan (x_1, x_2) et perpendiculaires à x_3 , direction dans laquelle s'établit la périodicité du superréseau.

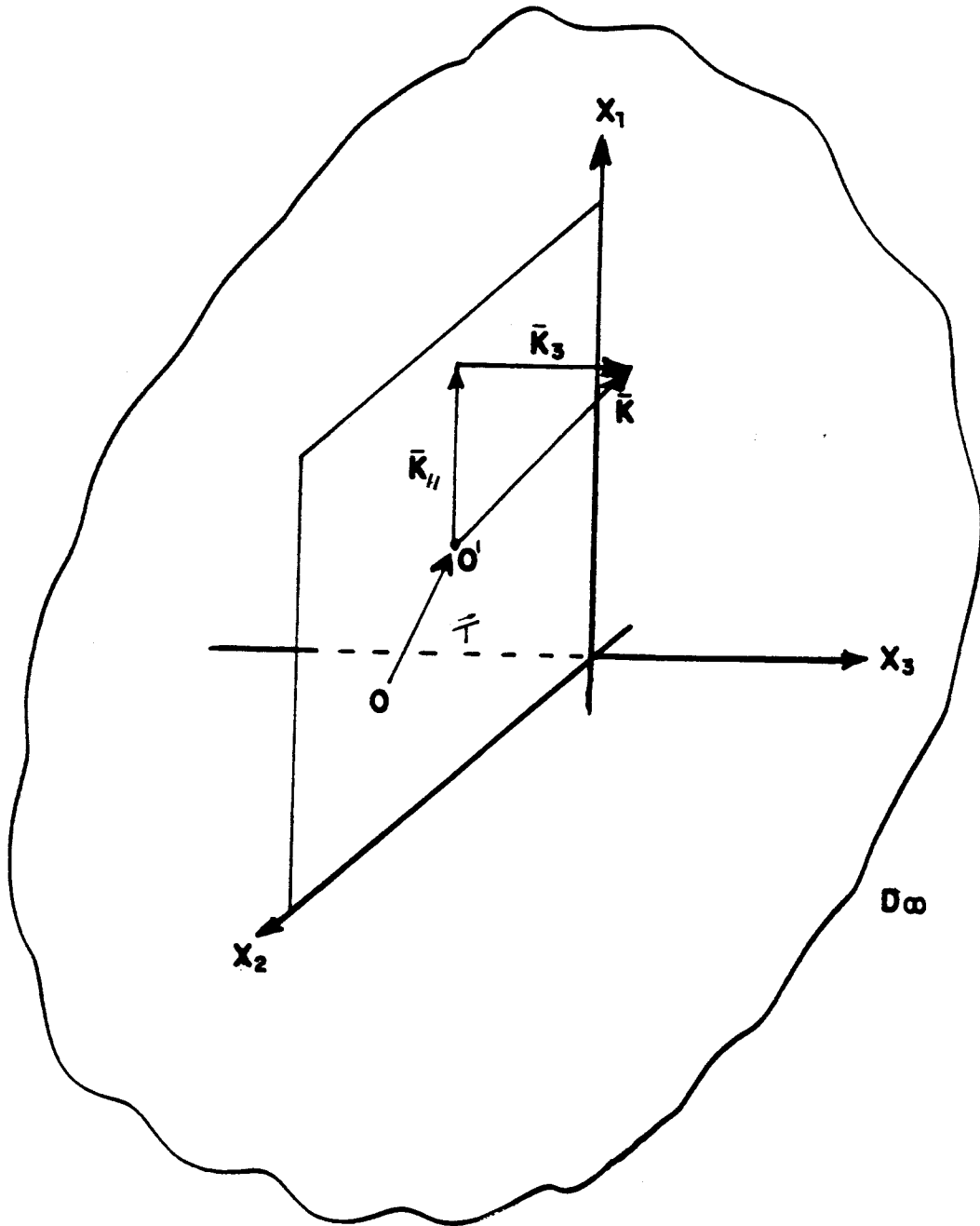
Pour une onde acoustique de vecteur d'onde \vec{k} , Fig.III.5, deux points dans le matériau i sont équivalents, si celui-ci est homogène; c'est à dire s'il est invariant pour une translation infinitésimale \vec{T} . Cette invariance est considérée pour des points situés dans le plan (x_1, x_2) et cela permet de faire une analyse de Fourier de l'opérateur H_{oi} et de la fonction réponse G_{oi} pour les variables $(\vec{x}_{//}, \vec{x}'_{//} \rightarrow \vec{k}_{//})$ ce qui réduit l'équation (6) à une dépendance de la variable x_3 . Il faut rappeler que la transformée de Fourier d'un opérateur différentiel est telle que:

$$\mathcal{F} \left[\frac{\partial g}{\partial x_l} \right] = i k_l \mathcal{F} [g] \quad (7a)$$

et

$$\mathcal{F} \left[\frac{\partial^2 g}{\partial x_l^2} \right] = - k_l^2 \mathcal{F} [g] \quad (7b)$$

L'équation (6) devient :



Translation infinitesimale \vec{T} .

$$\sum_{\mu} \left\{ \rho \delta_{\alpha\mu} \omega^2 + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \left\{ \left[1 - \delta_{\beta 3} \right] iK_{\beta} + \delta_{\beta 3} \frac{d}{dx_3} \right\} \right\} .$$

$$\left\{ \left[1 - \delta_{\nu 3} \right] iK_{\nu} + \delta_{\nu 3} \frac{d}{dx_3} \right\} G_{\mu\gamma} = \delta_{\alpha\gamma} \delta(x_3 - x'_3) \quad (8)$$

où

$$G_{\mu\gamma} = G_{\mu\gamma} \left(\vec{K}_{//}, \omega \mid x_3, x'_3 \right)$$

et

$$G_{\mu\gamma} \left(\vec{K}_{//}, \omega \mid x_3, x'_3 \right) = \int d\vec{X}_{//} G_{\mu\gamma} \left(\vec{x}_{//}, \vec{x}'_{//}; \omega, x_3, x'_3 \right) e^{-i\vec{k}_{//}(\vec{x}_{//} - \vec{x}'_{//})} \quad (9)$$

avec

$$\vec{K}_{//} = K_1 \hat{X}_1 + K_2 \hat{X}_2 \quad . \quad (10)$$

L'opérateur $\overset{\leftrightarrow}{H}_{oi}$ et la fonction réponse $\overset{\leftrightarrow}{G}_{oi}$ ne dépendent donc que des variables $x_3, \omega,$ et $\vec{K}_{//}$.

L'hypothèse de l'isotropie du milieu signifie que dans ce matériau il n'y a pas de directions privilégiées, elles sont toutes équivalentes.

L'opérateur $\overset{\leftrightarrow}{H}_{oi}(X_3, \omega, \vec{K}_{//})$ et la fonction $\overset{\leftrightarrow}{G}_{oi}(X_3, X'_3, \omega, \vec{K}_{//})$ dépendront donc, dans le plan (X_1, X_2) uniquement (Fig.III.6), de

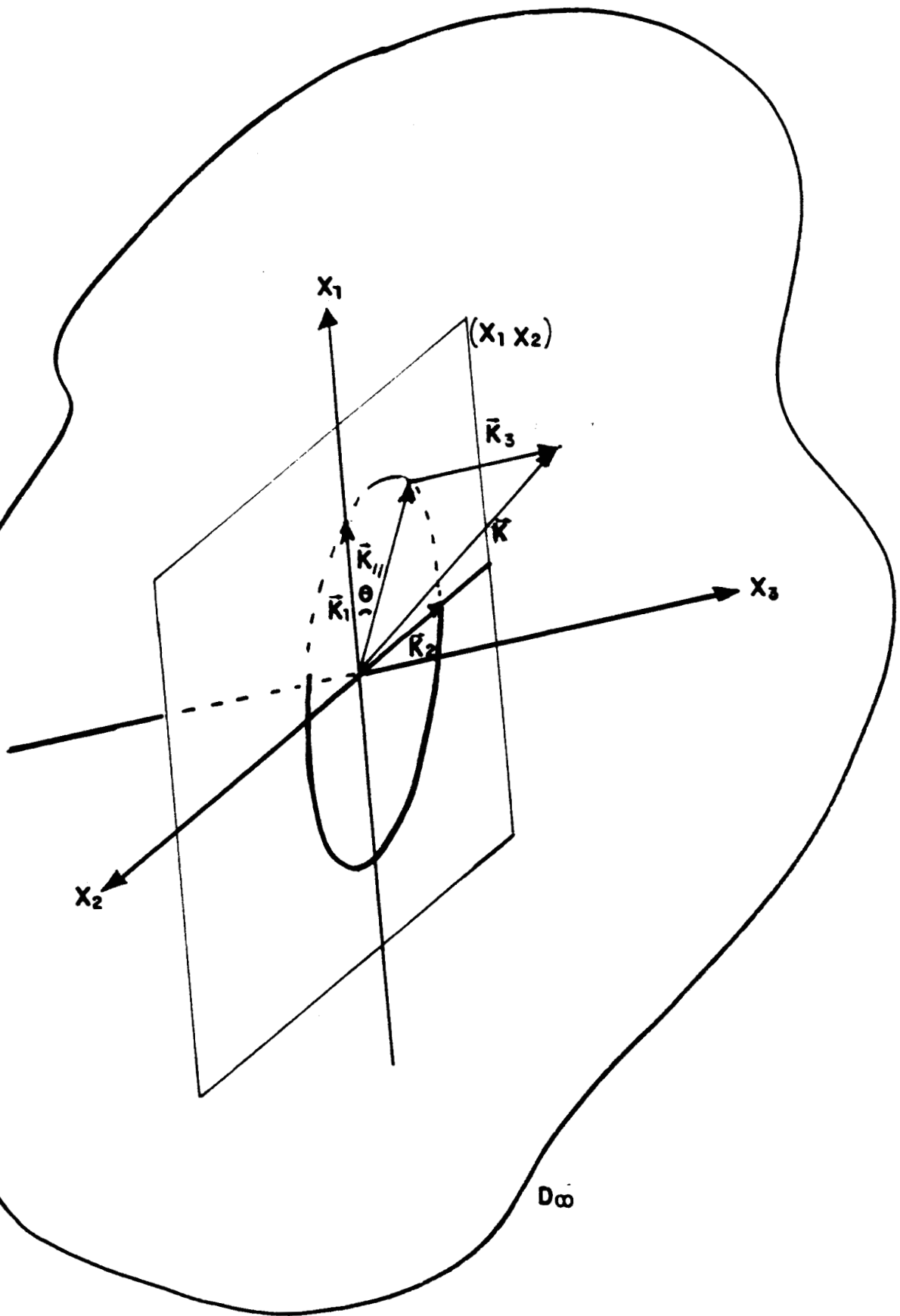


Figure III.6-Rotation unitaire \leftrightarrow S.

la grandeur $|\vec{K}_{//}|$ du vecteur $\vec{K}_{//}$. Pour le montrer, il est possible d'utiliser une rotation représentée par la matrice unitaire S :

$$S = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

où

$$\cos \theta \equiv \frac{K_1}{K_{//}} \quad \text{et} \quad \sin \theta \equiv \frac{K_2}{K_{//}} \quad (12)$$

$$K_{//} \equiv \sqrt{K_1^2 + K_2^2} .$$

On démontre que l'application de la rotation S à l'opérateur H_{oi} et à la fonction G_{oi} équivaut à définir le vecteur $\vec{K}_{//}$ le long de la direction \hat{x}_1 , en faisant $K_2 = 0$ (Fig. III.7).

C'est à dire :

$$\vec{K}_{//} \equiv K_1 \hat{x}_1 \quad (13)$$

$$|\vec{K}_{//}| \equiv K_1 \equiv K_{//} ,$$

et l'application de la rotation S à l'opérateur H_{oi} et à la fonction G_{oi} nous donne :

$$S H_{oi}(x_3, \omega, K_{//}) S^{-1} = G_{oi}(x_3, x'_3 | \omega, K_{//}) S^{-1} = I \delta(x_3 - x'_3)$$

donc

$$H_{oi}(x_3, \omega, K_{//}) G_{oi}(x_3, x'_3 | \omega, K_{//}) = I \delta(x_3 - x'_3) . \quad (15)$$

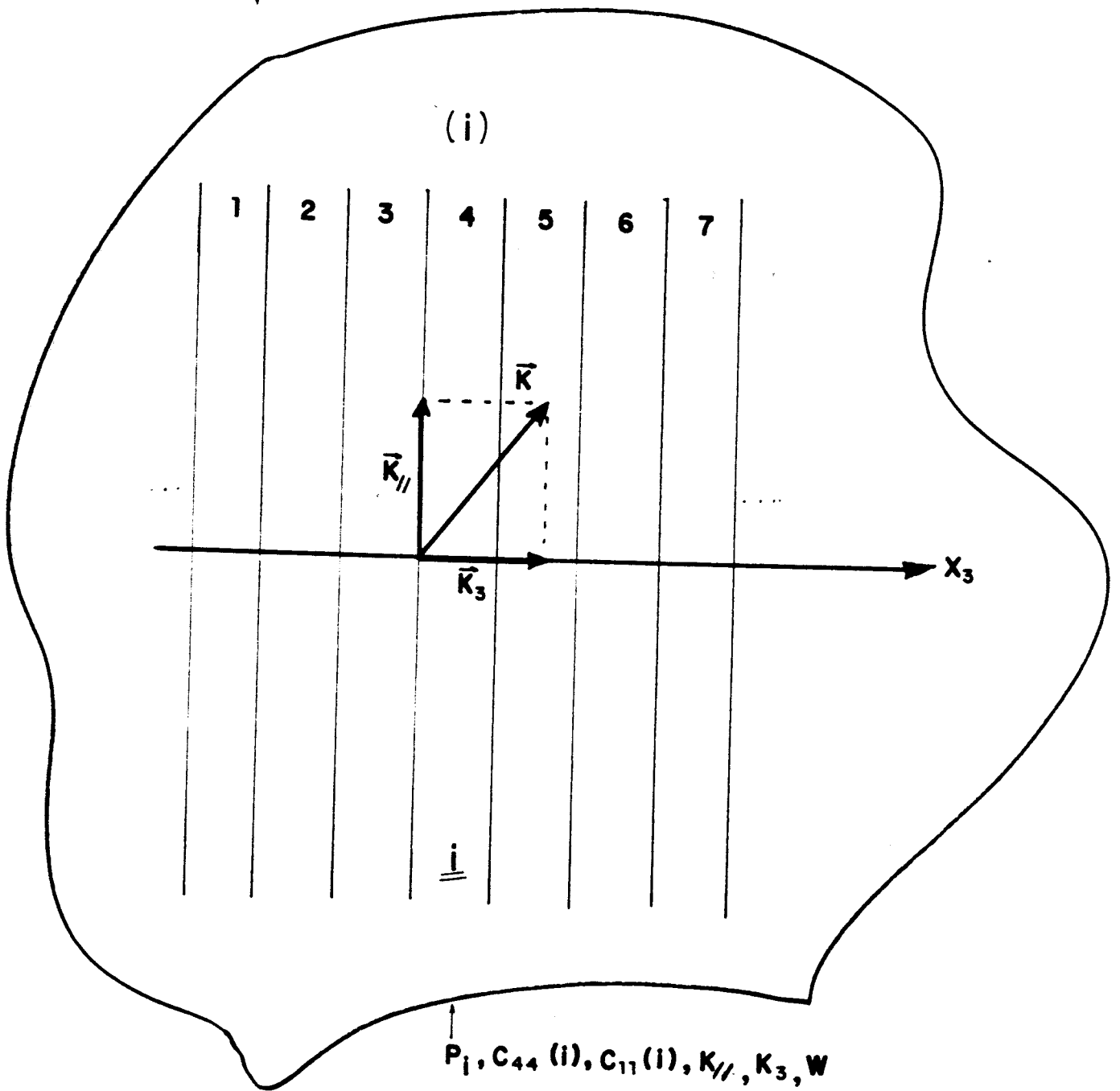


Figure III.7- $K_{//}$ le long de la direction \hat{X}_1 .

La forme matricielle $H_{oi}(X_3, \omega, K_{//})$ est donnée par :

$$H_{oi}(X_3, \omega, K_{//}) = \rho_i \begin{bmatrix} C_t^2 D^2 - C_l^2 \alpha_l^2 & 0 & iK_{//} (C_l^2 - C_t^2) D \\ 0 & C_t^2 (D^2 - \alpha_t^2) & 0 \\ iK_{//} (C_l^2 - C_t^2) D & 0 & C_l^2 D^2 - C_t^2 \alpha_t^2 \end{bmatrix} \quad (16)$$

où $D \equiv \frac{d}{dx_3}$; C_T, C_l sont les vitesses transversale et longitudinale définies par rapport aux constantes élastiques du matériau i. $C_{44}(i)$ et $C_{11}(i)$ par :

$$C_T^2 = \frac{C_{44}(i)}{\rho_i}$$

$$C_l^2 = \frac{C_{11}(i)}{\rho_i} \quad (17)$$

et avec

$$\alpha_{l,t}^2 = K_{//}^2 - \frac{\omega^2}{C_{l,t}^2} \quad (18)$$

La fonction réponse correspondante, satisfaisant l'équation (15) sera donnée par :

$$\leftrightarrow G_{oi}(X_s, X'_s / \omega, k_{//}) = \begin{pmatrix} G_{11}(X_s, X'_s / \omega, k_{//}) & 0 & G_{1s}(X_s, X'_s / \omega, k_{//}) \\ 0 & G_{22}(X_s, X'_s / \omega, k_{//}) & 0 \\ G_{s1}(X_s, X'_s / \omega, k_{//}) & 0 & G_{ss}(X_s, X'_s / \omega, k_{//}) \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$X_s, X'_s \in D_\infty$$

où les éléments $G_{\alpha\gamma}$ non nuls sont [13]:

$$G_{11}(x_s, x'_s / \omega, k_{//}) = - \frac{k_{//}^2}{2 \rho \alpha_t \omega^2} \left\{ e^{-\alpha_t |x_s - x'_s|} - \epsilon e^{-\alpha_t |x_s - x'_s|} \right\}$$

$$\epsilon \equiv \frac{\alpha_t \alpha_l}{k_{//}^2} \quad (20a)$$

$$G_{22}(x_s, x'_s / \omega, k_{//}) = - \frac{1}{2 \rho \alpha_t C_t^2} e^{-\alpha_t |x_s - x'_s|} \quad (20b)$$

$$G_{1s}(x_s, x'_s / \omega, k_{//}) = G_{s1} = \frac{-ik_{//}}{2\rho\omega^2} \text{sign}(x_s - x'_s) \left\{ e^{-\alpha_t |x_s - x'_s|} - e^{-\alpha_t |x_s - x'_s|} \right\} \quad (20c)$$

$$G_{33}(x_3, x'_3 / \omega, K_{//}) = \frac{-K_{//}^2}{2\rho\alpha_l \omega^2} \left\{ e^{-\alpha_l |x_3 - x'_3|} - \epsilon e^{-\alpha_l |x_3 - x'_3|} \right\} \quad (20d)$$

L'opérateur H_{oi} et la fonction réponse G_{oi} donnés par les équations 3-16 et 3-19 sont le point de départ pour l'étude des phonons acoustiques dans les superréseaux à N-matériaux.

Ces équations nous montrent le découplage du mode polarisé transversalement dans la direction X_2 et des modes contenus dans le plan $X_1 X_3$, appelé plan sagittal. Ce fait permet l'étude séparée du mode transversal puisque cette condition se maintient dans toute la structure lamellaire du matériau composite.

III.4. -RESULTATS.

Dans la publication qui suit nous montrons le traitement, le développement et les résultats théoriques de l'étude des vibrations élastiques transversales (polarisées suivant X_2), dans les superréseaux à 3 et 4 matériaux différents.

Soulignons en particulier l'obtention des relations de dispersion (eq. 27 et 40 de la publication annexe), et leur dépendance fonctionnelle par rapport à K_3 , $K_{//}$, ω et les différents paramètres (ρ_i , C_{44} , C_{11}) caractérisant les divers matériaux.

Le traitement numérique de ces équations donne les résultats que nous montrons dans la figure 1.

Surface transverse elastic waves in N -layer superlattices

J. Mendiola, T. Szwacka, and A. Rodriguez

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Los Andes, Merida, Venezuela

L. Dobrzynski

Equipe Internationale de Dynamique des Interfaces, Laboratoire de Dynamique des Cristaux Moléculaires, Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, F-59655 Villeneuve d'Ascq CEDEX, France

(Received 25 October 1988)

N -layered superlattices are formed from a periodic repetition of N different slabs. A theory of surface transverse elastic waves in such new materials is given here, with specific results for $N=3$ and 4.

I. INTRODUCTION

The dispersion relations for bulk and surface transverse elastic waves in two-layer superlattices are well known.^{1,2} The dispersion relation for bulk transverse elastic waves in N -layer superlattices was also recently given.³ We propose here a general theory of surface transverse elastic waves in N -layer superlattices.

These novel materials formed out of a periodic repetition of N ($N > 2$) different slabs have been studied experimentally by the Raman spectroscopy.⁴ We believe that the present theoretical results may stimulate future investigations of surface phonons in such materials by Brillouin and inelastic electron spectroscopies.

In the next section we describe the geometry of the N -layer superlattice. In Sec. III we give the bulk-response function and the surface-response operators for one slab. These results are then used in Sec. IV for the calculation of the surface transverse elastic waves in N -layer superlattices. Closed-form results for $N=3$ and 4, in particular, are given, and can be compared with those obtained with the help of a simple atomic model.⁵

II. THE GEOMETRY OF AN N -LAYER SUPERLATTICE

The superlattice is formed out of an infinite repetition of the ensemble (labeled by the unit-cell index n) of N different slabs. Each of these slabs of width $2a_i$ is labeled by the index i , $1 \leq i \leq N$, within the unit cell n . All the interfaces are taken to be parallel to the (x_1, x_2) plane. Rather than using x_3 ranging from $-\infty$ to $+\infty$, it is more convenient for what follows to replace x_3 by the three variables (n, i, z) . We define within each slab (n, i) the dimensionless space coordinate z , which appears as the space position x_3/a_i , the origin being chosen in the middle of each slab. Therefore,

$$-1 \leq z = x_3/a_i \leq 1, \quad (1)$$

within the slab (n, i) .

The elastic properties (needed for the study of transverse elastic waves) of an isotropic slab i are described by

two parameters—the density ρ_i and the transverse sound velocity C_{ii} , such that

$$C_{ii}^2 = \frac{C_{44}(i)}{\rho_i}, \quad 1 \leq i \leq N \quad (2)$$

where $C_{44}(i)$ is the usual bulk elastic constant of medium i .

We consider transverse elastic waves for which the space displacement is in a direction parallel to the plane of the interfaces and perpendicular to the propagation vector $\mathbf{k}_{\parallel} \equiv (k_1, k_2)$. It is well known^{2,6} that for lamellar isotropic media these transverse waves are not coupled to the other waves polarized in the sagittal plane which contains the normal to the interfaces and the vector \mathbf{k}_{\parallel} .

We also take advantage of the infinitesimal translational invariance in directions parallel to the interfaces and Fourier-analyze the equations of motion and all operators according to, for example,

$$g(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int \frac{d^2 \mathbf{k}_{\parallel}}{(2\pi)^2} g(\mathbf{k}_{\parallel} | x_3, x'_3) e^{i\mathbf{k}_{\parallel}(\mathbf{x}_{\parallel} - \mathbf{x}'_{\parallel})}, \quad (3)$$

where $\mathbf{x}_{\parallel} \equiv (x_1, x_2)$ is the component parallel to the interfaces of the real-space position \mathbf{x} .

Note that all functions which are functions of \mathbf{k}_{\parallel} and of the frequency ω , for simplicity, will not explicitly show this dependence in the following text.

III. BULK-RESPONSE FUNCTION AND THE SURFACE-RESPONSE OPERATORS FOR ONE SLAB

A. Bulk-response function

With the above definitions the response function for transverse elastic waves in an infinite isotropic elastic matter is defined by⁶

$$\left[-\alpha_i^2 + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right] G_i(\mathbf{k}_{\parallel} | x_3 - x'_3) = \delta(x_3 - x'_3), \quad (4a)$$

or

$$\frac{F_i}{a_i \alpha_i} \left[-a_i^2 \alpha_i^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] G_i(k_{\parallel}, \omega | z, z') = \delta(z - z'), \quad (4b)$$

where

$$\alpha_i = \begin{cases} \left[k_{\parallel}^2 - \frac{\omega^2}{C_{ii}^2} \right]^{1/2}, & k_{\parallel} > \omega / C_{ii} \\ -i \left[\frac{\omega^2}{C_{ii}^2} - k_{\parallel}^2 \right]^{1/2}, & k_{\parallel} < \omega / C_{ii} \end{cases} \quad (5)$$

$$F_i = C_{44}(i) \alpha_i, \quad (6)$$

$$\frac{F_i}{a_i \alpha_i} \left[\Theta(1+z)\Theta(1-z) \left[-a_i^2 \alpha_i^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \hat{V}_i(z) \right] g_{si}(z, z') = \delta(z - z'), \quad (8)$$

where $\Theta(z)$ is the Heaviside step function,

$$\Theta(z) = \begin{cases} 1, & z > 0 \\ 0, & z < 0 \end{cases} \quad (9)$$

and $\hat{V}_i(z)$ is

$$\hat{V}_i(z) = [\delta(z+1) - \delta(z-1)] \frac{\partial}{\partial z}. \quad (10)$$

In order to solve Eq. (8), it is convenient to define⁷ a surface-response operator $A_{si}(z, z')$ such that

$$A_{si}(z, z') = V_i(z'') G_i(z'', z') \Big|_{z''=z} \quad (11)$$

for $-1 \leq z', z'' < +1$ and $z = \pm 1$.

One finds easily that

$$A_{si}(\bar{1}, z') = -\frac{1}{2} e^{-\alpha_i a_i (1+z')}, \quad (12a)$$

$$A_{si}(1, z') = -\frac{1}{2} e^{-\alpha_i a_i (1-z')}. \quad (12b)$$

The two points $z = \pm 1$ form the interface space M_i for this slab.

Finally, the slab response function can be calculated from

$$g_{si}(z, z') = G_i(z, z') - [G_i(z, \bar{1}), G_i(z, 1)] \bar{\Delta}_{si}^{-1} \begin{bmatrix} A_{si}(\bar{1}, z') \\ A_{si}(1, z') \end{bmatrix}, \quad (13)$$

where $-1 \leq z, z' \leq 1$, and the matrix $\bar{\Delta}_{si}^{-1}$ is the inverse of the 2×2 matrix,

$$\bar{\Delta}_{si} = \begin{bmatrix} 1 + A_{si}(\bar{1}, \bar{1}) & A_{si}(\bar{1}, 1) \\ A_{si}(1, \bar{1}) & 1 + A_{si}(1, 1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} e^{-2\alpha_i a_i} \\ -\frac{1}{2} e^{-2\alpha_i a_i} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \quad (14)$$

Note that in Eq. (13) $\bar{\Delta}_{si}^{-1}$ is preceded by a 1×2 rectangular matrix and followed by a 2×1 rectangular one.

Note also a useful particular value⁸ of Eq. (13),

$$g_{si}^{-1}(M_i, M_i) = \bar{\Delta}_{si} G_i^{-1}(M_i, M_i), \quad (15)$$

and $\delta(z)$ is the usual Dirac δ function.

The solution of Eq. (4b) is easily found to be

$$G_i(k_{\parallel}, \omega | z, z') = -\frac{1}{2F_i} e^{-\alpha_i a_i |z-z'|}, \quad -\infty < z, z' < +\infty. \quad (7)$$

B. The surface-response operators for one slab

For a slab of width $2a_i$ such that $-1 \leq z \leq 1$, the response function $g_{si}(z, z')$ associated with the transverse elastic waves can be defined by⁷

which leads directly to

$$\begin{bmatrix} g_{si}^{-1}(\bar{1}, \bar{1}) & g_{si}^{-1}(\bar{1}, 1) \\ g_{si}^{-1}(1, \bar{1}) & g_{si}^{-1}(1, 1) \end{bmatrix} = \frac{-\alpha_i C_{ii}^2 \rho_i}{\sinh(2\alpha_i a_i)} \begin{bmatrix} \cosh(2\alpha_i a_i) & -1 \\ -1 & \sinh(2\alpha_i a_i) \end{bmatrix}. \quad (16)$$

IV. RESPONSE FUNCTION OF THE THREE-LAYER SUPERLATTICE

The interface space M of the three-layer superlattice is the infinite set of the discrete points (n, i, z_M) , where the integers take the following values: $-\infty < n < \infty$, $1 \leq i \leq 3$, and $z_M = \pm 1$. Let us also use the following notation for referring to a given slab:

$$m \equiv (n, i) \equiv 3n + i. \quad (17)$$

Note that with these notations there are two different ways to label the same interface:

$$(m, \bar{1}) \equiv (m-1, 1). \quad (18)$$

The inverse $g^{-1}(MM)$ of $g(MM)$, the truncated part of the response function g of the three-layer superlattice, is a block tridiagonal matrix whose elements are⁸

$$g^{-1}(m, \bar{1}; m', \bar{1}) = \delta_{mm'} [g_{s,m}^{-1}(\bar{1}, \bar{1}) + g_{s,m-1}^{-1}(1, 1)], \quad (19a)$$

$$g^{-1}(m, 1; m', 1) = \delta_{mm'} [g_{s,m}^{-1}(1, 1) + g_{s,m+1}^{-1}(\bar{1}, \bar{1})], \quad (19b)$$

$$g^{-1}(m, \bar{1}; m', 1) = \delta_{mm'} g_{s,m}^{-1}(\bar{1}, 1), \quad (19c)$$

$$g^{-1}(m, 1; m', \bar{1}) = \delta_{mm'} g_{s,m}^{-1}(1, \bar{1}). \quad (19d)$$

In what follows, we will use the following more compact notations:

$$F_m = C_{44}(m) \alpha_m,$$

$$C_m = \cosh(2\alpha_m a_m), \quad (20)$$

$$S_m = \sinh(2\alpha_m a_m).$$

From Eqs. (19) and (16), one obtains, with these notations,

$$g^{-1}(m, 1; m, 1) = -F_m \frac{C_m}{S_m} - F_{m+1} \frac{C_{m+1}}{S_{m+1}}, \quad (21a)$$

$$g^{-1}(m, \bar{1}; m, \bar{1}) = -F_{m-1} \frac{C_{m-1}}{S_{m-1}} - F_m \frac{C_m}{S_m}, \quad (21b)$$

$$g^{-1}(m, \bar{1}; m, 1) = g^{-1}(m, 1; m, \bar{1}) = \frac{F_m}{S_m}. \quad (21c)$$

We invert⁸ this tridiagonal infinite matrix $g^{-1}(MM)$. For this purpose, let us define

$$K(m) = \begin{pmatrix} -F_m \frac{C_m}{S_m} - F_{m+1} \frac{C_{m+1}}{S_{m+1}} & \frac{F_{m+1}}{S_{m+1}} \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$H(m) = \begin{pmatrix} \frac{F_m}{S_m} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (23)$$

$$P(m) = -K^{-1}(m)H(m) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{F_m}{F_{m+1}} \frac{S_{m+1}}{S_m} & \frac{F_m}{F_{m+1}} \frac{F_{m+1}}{S_m} C_m + C_{m+1} \end{pmatrix}, \quad (24)$$

and

$$R(3,0) = P(3)P(2)P(1). \quad (25)$$

The explicit expression of this last 2×2 matrix is found to be

$$R(3,0) = \begin{pmatrix} -\frac{F_1}{F_2} \frac{S_2}{S_1} C_3 - \frac{F_1}{F_3} \frac{S_3}{S_1} C_2 & \frac{F_1}{F_2} \frac{S_2}{S_1} C_1 C_3 + \frac{F_1}{F_3} \frac{S_3}{S_1} C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_3} S_2 S_3 + C_2 C_3 \\ -\frac{F_1}{F_3} \frac{S_3}{S_1} C_1 C_2 - \frac{F_1}{F_2} \frac{S_2}{S_1} C_1 C_3 - \frac{F_3}{F_2} S_2 S_3 - C_2 C_3 & 2C_1 C_2 C_3 + S_1 S_2 C_3 \left(\frac{F_2}{F_1} + \frac{F_1}{F_2} \right) + S_1 S_3 C_2 \left(\frac{F_1}{F_3} + \frac{F_3}{F_1} \right) \\ + S_2 S_3 C_1 \left(\frac{F_2}{F_3} + \frac{F_3}{F_2} \right) + \frac{F_1}{F_3} \frac{S_3}{S_1} C_2 + \frac{F_1}{F_2} \frac{S_2}{S_1} C_3 \end{pmatrix} \quad (26)$$

The trace of this matrix enables us⁸ to recover³ the bulk-dispersion relation for transverse elastic waves in three-layer superlattices as an implicit relation between the frequency ω and the propagation vector $\mathbf{k} \equiv (\mathbf{k}_\parallel, k_3)$:

$$2 \cos(k_3 a_u) = 2C_1 C_2 C_3 + S_1 S_2 C_3 \left[\frac{F_2}{F_1} + \frac{F_1}{F_2} \right] + S_1 S_3 C_2 \left[\frac{F_1}{F_3} + \frac{F_3}{F_1} \right] + S_2 S_3 C_1 \left[\frac{F_3}{F_2} + \frac{F_2}{F_3} \right], \quad (27)$$

where $a_u = 2(a_1 + a_2 + a_3)$ is the width of the elementary

cell of the three-layer superlattice.

In order to calculate the elements of the three-layer superlattice response function g , let us define⁸

$$2\eta = \text{Tr}R(3,0) \quad (28)$$

and

$$t = \begin{cases} \eta - (\eta^2 - 1)^{1/2}, & \eta > 1 \\ \eta + i(1 - \eta^2)^{1/2}, & -1 < \eta < 1 \\ \eta + (\eta^2 - 1)^{1/2}, & \eta < -1. \end{cases} \quad (29)$$

The procedure of inversion of the tridiagonal matrix $g^{-1}(MM)$ is given in the Appendix. One obtains the following results:

$$\begin{pmatrix} g(n, 1, \bar{1}; n', 1, 1) \\ g(n, 1, 1; n', 1, 1) \end{pmatrix} = \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1} \begin{pmatrix} \frac{S_3}{F_3} C_2 + \frac{S_2}{F_2} C_3 \\ \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 + \frac{F_3}{F_1 F_2} S_1 S_2 S_3 \end{pmatrix} - \frac{t^{|n-n'-1|+1}}{t^2-1} \begin{pmatrix} -\frac{S_1}{F_1} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (30a)$$

$$\begin{pmatrix} g(n, 1, \bar{1}; n', 2, 1) \\ g(n, 1, 1; n', 2, 1) \end{pmatrix} = \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1} \begin{pmatrix} \frac{S_3}{F_3} \\ \frac{S_1}{F_1} C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 \end{pmatrix} + \frac{t^{|n-n'-1|+1}}{t^2-1} \begin{pmatrix} \frac{S_2}{F_2} C_1 + \frac{S_1}{F_1} C_2 \\ \frac{S_2}{F_2} \end{pmatrix}, \quad (30b)$$

$$\begin{bmatrix} g(n, 1, \bar{1}; n', 3, 1) \\ g(n, 1, 1; n', 3, 1) \end{bmatrix} = \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1} \begin{bmatrix} 0 \\ S_1 \\ F_1 \end{bmatrix} + \frac{t^{|n-n'-1|+1}}{t^2-1} \begin{bmatrix} \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1 F_3} S_1 S_2 S_3 \\ \frac{S_2}{F_2} C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_2 \end{bmatrix}. \quad (30c)$$

The other matrix elements of $g(MM)$ are given in the Appendix.

The response function between a point (m', z') situated in the slab m' and a point (m, z) situated in the slab m is then given⁸ by

$$g(m, z; m', z') = \delta_{mm'} G_m(z, z') - [G_m(z, \bar{1}), G_m(z, 1)] G_m^{-1}(M_m, M_m) [\delta_{mm'} - g(M_m, M_m)] G_m^{-1}(M_m, M_m) \begin{bmatrix} G_m(\bar{1}, z') \\ G_m(1, z') \end{bmatrix}, \quad (31)$$

where $G_m(z, z')$ is given by Eq. (7). The second term contains both the rectangular 1×2 and 2×1 matrices. $G_m^{-1}(M_m, M_m)$ is the inverse of the 2×2 $G_m(M_m, M_m)$ matrix written in the interface space of slab m .

$g(M_m, M_m)$ is a similar 2×2 matrix whose matrix elements between $(m, \bar{1}), (m, 1)$ and $(m', \bar{1}), (m', 1)$ are given by Eqs. (30) and (A8)-(A13).

With the help of this response function, one can study all the physical properties associated with transverse elastic waves of three-layer superlattices. In what follows, we restrict ourselves only to the surface-response function of a semi-infinite three-layer superlattice and to the corresponding surface transverse elastic waves.

V. RESPONSE FUNCTION OF A SEMI-INFINITE THREE-LAYER SUPERLATTICE

Let us now create a semi-infinite three-layer superlattice with a free surface parallel to the interfaces. This can be achieved by removing the slab ($n = 1, i = 1$) from the infinite superlattice. This cleavage creates two semi-infinite superlattices. In what follows we address the one terminated by the free surface ($n = 1, i = 2, z = -1$). The response function d associated with this semi-infinite superlattice can be calculated as explained in Ref.8 by inverting first the semi-infinite tridiagonal matrix $d^{-1}(MM)$. This inversion procedure uses the following entities: the cleavage operator

$$\begin{aligned} d(1, 2, \bar{1}; 1, 2, \bar{1}) &= g(1, 2, \bar{1}; 1, 2, \bar{1}) - g(1, 2, \bar{1}; 1, 2, \bar{1}) \Delta^{-1}(1, 2, \bar{1}; 1, 2, \bar{1}) A_{sf}(1, 2, \bar{1}; 1, 2, \bar{1}) \\ &= \frac{t}{-1+tA} \left[\frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 + \frac{F_3}{F_1 F_2} S_1 S_2 S_3 \right]. \end{aligned} \quad (36)$$

It is helpful to multiply the numerator and the denominator of Eq. (36) by $-1 + A/t$. This provides

$$d(1, 2, \bar{1}; 1, 2, \bar{1}) = \frac{t-A}{D(\omega^2)}, \quad (37a)$$

$$\begin{aligned} V_f &= - \begin{bmatrix} g_s^{-1}(1, 1, \bar{1}; 1, 1, \bar{1}) & g_s^{-1}(1, 1, \bar{1}; 1, 1, 1) \\ g_s^{-1}(1, 1, 1; 1, 1, \bar{1}) & g_s^{-1}(1, 1, 1; 1, 1, 1) \end{bmatrix} \\ &= - \begin{bmatrix} -F_1 \frac{C_1}{S_1} & \frac{F_1}{S_1} \\ \frac{F_1}{S_1} & -F_1 \frac{C_1}{S_1} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (32)$$

the surface-response operator

$$\begin{aligned} A_{sf}(1, 2, \bar{1}; 1, 2, \bar{1}) &= F_1 \frac{C_1}{S_1} g(1, 1, 1; 1, 1, 1) \\ &\quad - \frac{F_1}{S_1} g(1, 1, \bar{1}; 1, 1, 1) \\ &= \frac{t}{t^2-1} (A-t), \end{aligned} \quad (33)$$

with

$$A = C_1 C_2 C_3 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 C_3 + \frac{F_1}{F_3} S_1 S_3 C_2 + \frac{F_3}{F_2} S_2 S_3 C_1, \quad (34)$$

and

$$\begin{aligned} \Delta(1, 2, \bar{1}; 1, 2, \bar{1}) &= 1 + A_{sf}(1, 2, \bar{1}; 1, 2, \bar{1}) \\ &= \frac{1}{t^2-1} (-1+tA). \end{aligned} \quad (35)$$

Finally, the surface element of the response function d of the semi-infinite superlattice is given by

$$\begin{aligned} D(\omega^2) &= F_1 S_1 C_2 C_3 + F_2 S_2 C_1 C_3 \\ &\quad + F_3 S_3 C_1 C_2 + \frac{F_1 F_2}{F_3} S_1 S_2 S_3. \end{aligned} \quad (37b)$$

From the poles of this function, we find the frequencies ω_s of the surface modes of transverse vibrations localized at the free surface ($n=1, i=2, z=-1$) and decaying inside the bulk. For a given value of k_{\parallel} , these frequencies ω_s of the surface phonons can be calculated from the following implicit equation:

$$D(\omega^2)=0, \tag{38a}$$

with

$$|A| > 1. \tag{38b}$$

Let us now present briefly the same analysis and results for a four-layer superlattice.

VI. RESPONSE FUNCTION OF A SEMI-INFINITE FOUR-LAYER SUPERLATTICE

In the same manner as for the three-layer case, we can obtain the matrix

$$R(4,0)=P(4)P(3)P(2)P(1). \tag{39}$$

Its matrix elements and also the interface elements of the response function g of a four-layer superlattice will be presented elsewhere.⁹

The corresponding bulk-dispersion relation for transverse elastic waves in a four-layer superlattice was found to be in agreement with the result given in Ref. 3:

$$\begin{aligned} 2 \cos(k_3 a_u) = & 2C_1 C_2 C_3 C_4 + S_1 S_2 S_3 S_4 \left[\frac{F_4 F_2}{F_3 F_1} + \frac{F_3 F_1}{F_1 F_2} \right] + S_1 S_2 C_3 C_4 \left[\frac{F_2}{F_1} + \frac{F_1}{F_2} \right] \\ & + S_1 S_3 C_2 C_4 \left[\frac{F_3}{F_1} + \frac{F_1}{F_3} \right] + S_1 S_4 C_2 C_3 \left[\frac{F_4}{F_1} + \frac{F_1}{F_4} \right] + S_2 S_3 C_1 C_4 \left[\frac{F_3}{F_2} + \frac{F_2}{F_3} \right] \\ & + S_2 S_4 C_1 C_3 \left[\frac{F_4}{F_2} + \frac{F_2}{F_4} \right] + S_3 S_4 C_1 C_2 \left[\frac{F_4}{F_3} + \frac{F_3}{F_4} \right], \end{aligned} \tag{40}$$

with $a_u = 2 \sum_{i=1}^4 a_i$. The infinite four-layer superlattice is cleaved in the same manner as the three-layer one. The cleavage operator is here also given by Eq. (32). The expression equivalent to Eq. (34) is, in this case,

$$\begin{aligned} A = & \frac{F_3 F_1}{F_4 F_2} S_1 S_2 S_3 S_4 + C_1 C_2 C_3 C_4 + \frac{F_3}{F_2} S_2 S_3 C_1 C_4 + \frac{F_4}{F_2} S_2 S_4 C_1 C_3 \\ & + \frac{F_4}{F_3} S_3 S_4 C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_4} S_1 S_4 C_2 C_3 + \frac{F_1}{F_3} S_1 S_3 C_2 C_4 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 C_3 C_4. \end{aligned} \tag{41}$$

t is still given by Eq. (29), but with 2η having the value given by the second term of Eq. (40). The surface phonon which may appear can be found from the new poles in the surface-response function d . We worked its surface element out explicitly. It has the same expression, (37), as for the three-layer superlattice, bearing in mind that t and A now have the values defined in this section,

$$\begin{aligned} D(\omega^2) = & \frac{F_1 F_2}{F_3} S_1 S_2 S_3 C_4 + \frac{F_1 F_3}{F_4} S_1 S_3 S_4 C_2 + \frac{F_1 F_2}{F_4} S_1 S_2 S_4 C_3 + \frac{F_2 F_4}{F_3} S_2 S_3 S_4 C_1 \\ & + F_1 C_2 C_3 C_4 S_1 + F_2 C_1 C_3 C_4 S_2 + F_3 C_1 C_2 C_4 S_3 + F_4 C_1 C_2 C_3 S_4. \end{aligned} \tag{42}$$

The surface phonons localized at the free surface ($n=1, i=2, z=-1$) of this four-layer superlattice can again be calculated from Eqs. (38) with $D(\omega^2)$ given by Eq. (42) and A given by Eq. (41).

VII. APPLICATION

We now illustrate the theoretical results obtained in the preceding sections by calculations for a specific exam-

ple of a three-layer superlattice. The calculations were performed using the parameters listed in Table I.

We first consider the infinitely extended three-layer superlattice.

The implicit bulk-dispersion relation, Eq. (27), was solved numerically and the results are shown in Fig. 1 for $\omega = f(2k_{\parallel} a_1)$ by the hatched areas. In the gaps appearing between these bulk bands, we then found surface-localized modes for two peculiar semi-infinite three-layer

TABLE I. Densities ρ_i , transverse speeds of sound C_{ii} , and width $2a_i$ of the Nb, Cu, and Fe slabs.

<i>i</i>	Layer	ρ_i (g/cm ³)	C_{ii} (10 ⁵ cm/s)	$2a_i$ (10 ⁻⁵ cm)
1	Nb	8.57	1.83	1
2	Cu	8.92	2.905	0.5
3	Fe	7.8	5.13	0.33

superlattices, whose geometry is also presented in the figure. The surface modes found for the semi-infinite superlattice having the Fe layer at the surface are presented in the figure by the dotted lines. The surface modes appearing on the semi-infinite superlattice having the Cu layer at the surface are represented by the dashed lines. The figure shows some continuity between the surface phonons corresponding to two different surfaces of the same three-layer superlattice. This is due to the fact that for these two different surface phonons the expression of $D(\omega^2)$ given by Eq. (37) is the same, and the corresponding expressions of A given by Eq. (34) are the inverse ones of the other.

ACKNOWLEDGMENTS

Three of us (J.M., A.R., and L.D.) acknowledge the support of the French Centre National de la Recherche Scientifique and of the Venezuelan Consejo Nacional de Investigaciones Cientificas through their exchange program. They also acknowledge the hospitality of the Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois and of the Universidad de Los Andes. The Laboratoire de Dynamique des Cristaux Moleculaires is "Unité associée No. 801 au Centre National de la Recherche Scientifique, and is part of the "Unité de Formation et de Recherche de Physique de l'Université.

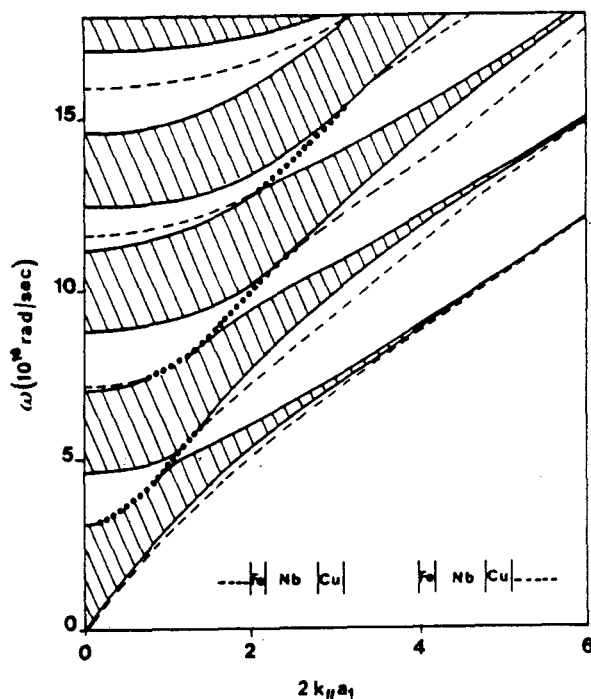


FIG. 1. Bulk and surface transverse elastic waves in a three-layer superlattice formed out of Nb, Cu, and Fe layers. This curve represents the frequencies ω as a function of $2k_{\parallel}a_1$; k_{\parallel} is the propagation vector parallel to the interfaces and $2a_1$ the width of the Nb layer. The hatched areas represent the bulk phonons. The dotted lines appearing in the gaps represent the surface phonons for the surface terminated by the Fe layer. The dashed-dotted lines represent the surface phonons for the surface terminated by the Cu layer. The parameters used in these calculations are given in Table I.

APPENDIX: INTERFACE ELEMENTS OF THE RESPONSE FUNCTION g OF A THREE-LAYER SUPERLATTICE

The definition

$$g^{-1}(MM)g(MM)=I \tag{A1}$$

can be rewritten as⁸

$$K(m) \begin{bmatrix} g(m, 1; m'1) \\ g(m+1, 1; m'1) \end{bmatrix} + H(m) \begin{bmatrix} g(m, \bar{1}; m', 1) \\ g(m, 1; m', 1) \end{bmatrix} = \delta_{mm'} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{A2}$$

where $K(m)$ and $H(m)$ are defined by Eqs. (22) and (23).

Using N times Eq. (A2), one obtains

$$\begin{bmatrix} g(n+1, 1, \bar{1}; n', i', 1) \\ g(n+1, 1, 1; n', i', 1) \end{bmatrix} = R(3, 0) \begin{bmatrix} g(n, 1, \bar{1}; n', i', 1) \\ g(n, 1, 1; n', i', 1) \end{bmatrix} + \delta_{nn'} B(i'), \tag{A3}$$

where

$$B(i') = R(3, i') K^{-1}(i') \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad i \leq i' \leq 3, \tag{A4a}$$

and

$$R(3, 3) = I, \quad R(3, 2) = P(3), \quad R(3, 1) = P(3)P(2), \quad R(3, 0) = P(3)P(2)P(1). \tag{A4b}$$

From Eq. (A3) one then obtains

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} g(n+1, 1, \bar{1}; n', i', 1) + g(n-1, 1, \bar{1}; n', i', 1) \\ g(n+1, 1, 1; n', i', 1) + g(n-1, 1, 1; n', i', 1) \end{bmatrix} &= [\text{Tr} \mathbf{R}(3, 0)] \begin{bmatrix} g(n, 1, \bar{1}; n', i', 1) \\ g(n, 1, 1; n', i', 1) \end{bmatrix} \\ &+ \delta_{nn'} \mathbf{B}(i') - \delta_{n-1, n} \mathbf{R}^{-1}(3, 0) \mathbf{B}^{-1}(i'), \end{aligned} \tag{A5}$$

whose general solution is⁸

$$\begin{bmatrix} g(n, 1, \bar{1}; n', i', 1) \\ g(n, 1, 1; n', i', 1) \end{bmatrix} = \frac{t}{t^2-1} [\mathbf{I} t^{|n-n'|} - \mathbf{R}^{-1}(3, 0) t^{|n-n'-1|}] \mathbf{B}(i'). \tag{A6}$$

Using several times Eq. (A2), one obtains⁸

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} g(n, i, \bar{1}; n', i', 1) \\ g(n, i, 1; n', i', 1) \end{bmatrix} &= \frac{t}{t^2-1} \mathbf{R}(i-1, 0) [\mathbf{R}(N, i') t^{|n-n'|} - \mathbf{R}^{-1}(i', 0) t^{|n-n'-1|}] \\ &+ \delta_{nn'} \mathbf{R}(i-1, i') \mathbf{K}^{-1}(i') \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{A7}$$

With the help of Eqs. (A6) and (A7), we obtain Eqs. (30) and also the other elements of $g(MM)$, namely

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} g(n, 2, \bar{1}; n', 1, 1) \\ g(n, 2, 1; n', 1, 1) \end{bmatrix} &= \frac{t}{t^2-1} t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{F_3}{F_1 F_2} S_1 S_2 S_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 \\ \frac{S_2}{F_2} (2\eta) + \frac{S_1}{F_1} C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 \end{bmatrix} - t^{|n-n'-1|} \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{S_2}{F_2} \end{bmatrix} + \delta_{nn'} \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{S_2}{F_2} \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{A8}$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} g(n, 2, \bar{1}; n', 2, 1) \\ g(n, 2, 1; n', 2, 1) \end{bmatrix} &= \frac{t}{t^2-1} t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{S_1}{F_1} C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 \\ \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2 F_3} S_1 S_2 S_3 \end{bmatrix} - \frac{t}{t^2-1} t^{|n-n'-1|} \begin{bmatrix} -\frac{S_2}{F_2} \\ 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{A9}$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} g(n, 2, \bar{1}; n', 3, 1) \\ g(n, 2, 1; n', 3, 1) \end{bmatrix} &= \frac{t}{t^2-1} t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{S_1}{F_1} \\ \frac{S_2}{F_2} C_1 + \frac{S_1}{F_1} C_2 \end{bmatrix} + \frac{t^{|n-n'-1|+1}}{t^2-1} \begin{bmatrix} \frac{S_2}{F_2} C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_2 \\ + \frac{S_3}{F_3} \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{A10}$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} g(n, 3, \bar{1}; n', 1, 1) \\ g(n, 3, 1; n', 1, 1) \end{bmatrix} &= \frac{t}{t^2-1} t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{S_2}{F_2} (2\eta) + \frac{S_1}{F_1} C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 \\ \frac{S_1}{F_1} + 2\eta \left[\frac{S_2}{F_2} C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_2 \right] \end{bmatrix} \\ &- \frac{t^{|n-n'-1|+1}}{t^2-1} \begin{bmatrix} \frac{S_2}{F_2} \\ \frac{S_3}{F_3} C_2 + \frac{S_2}{F_2} C_3 \end{bmatrix} + \delta_{nn'} \begin{bmatrix} \frac{S_2}{F_2} \\ \frac{S_3}{F_3} C_2 + \frac{S_2}{F_2} C_3 \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{A11}$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} g(n, 3, \bar{1}; n', 2, 1) \\ g(n, 3, 1; n', 2, 1) \end{bmatrix} &= \frac{t}{t^2-1} t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2 F_3} S_1 S_2 S_3 \\ \frac{S_3}{F_3} (2\eta) + \frac{S_2}{F_2} C_1 + \frac{S_1}{F_1} C_2 \end{bmatrix} \\ &- \frac{t^{|n-n'-1|+1}}{t^2-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{S_3}{F_3} \end{bmatrix} + \delta_{nn'} \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{S_3}{F_3} \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{A12}$$

$$\begin{pmatrix} g(n, 3, \bar{1}; n', 3, 1) \\ g(n, 3, 1; n', 3, 1) \end{pmatrix} = \frac{t}{t^2-1} t^{|n-n'|} \begin{pmatrix} \frac{S_2}{F_2} C_1 + \frac{S_1}{F_1} C_2 \\ \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1 F_3} S_1 S_2 S_3 \end{pmatrix} - \frac{t^{|n-n'-1|+1}}{t^2-1} \begin{pmatrix} -\frac{S_3}{F_3} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A13})$$

¹J. Sapriel, B. Djafari-Rouhani, and L. Dobrzynski, *Surf. Sci.* **126**, 197 (1983).

²R. E. Camley, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **27**, 7318 (1983).

³B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, *Solid State Commun.* **62**, 609 (1987).

⁴D. J. Lockwood (private communication).

⁵T. Szwacka, A. Noguera, A. Rodriguez, J. Mendiola, and L. Dobrzynski, *Phys. Rev. B* **37**, 8451 (1988); *Phys. Rev. B* (to be published).

⁶See, for example, A. A. Maradudin, R. F. Wallis, and L. Dobrzynski, in *Surface Phonons and Polaritons*, Vol. 3 of *The Handbook of Surfaces and Interfaces*, edited by L. Dobrzynski (Garland STPM, New York, 1980).

⁷L. Dobrzynski, *Surf. Sci.* **180**, 489 (1987).

⁸L. Dobrzynski, *Surf. Sci.* **182**, 362 (1987). A printer's error appears in Eq. (32) of this reference; in the second term of this equation, i should be replaced by $(i-1)$.

⁹A. Rodriguez, Ph.D. thesis, University of Lille, 1989.

APPENDIX B

The elements of the matrix

$$\overleftrightarrow{R} (4,0) = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix}$$

are

$$R_{11} = - \frac{F_3 F_1 S_2 S_3 S_4}{F_4 F_2 S_1} - \frac{F_1 S_4}{F_4 S_1} C_2 C_3 - \frac{F_1 S_3}{F_3 S_1} C_2 C_4 - \frac{F_1 S_2}{F_2 S_1} C_3 C_4$$

$$R_{12} = \frac{F_2 S_2 S_3 C_4}{F_3 S_2 S_3 C_4} + \frac{F_3 S_3 S_4 C_2}{F_4 S_3 S_4 C_2} + \frac{F_2 S_2 S_4 C_3}{F_4 S_2 S_4 C_3} + \frac{F_3 F_1 S_2 S_3 S_4}{F_4 F_2 S_1} C_1$$

$$R_{21} = - \frac{F_3 S_2 S_3 C_4}{F_2 S_2 S_3 C_4} + \frac{F_4 S_3 S_4 C_2}{F_3 S_3 S_4 C_2} + \frac{F_4 S_2 S_4 C_3}{F_2 S_2 S_4 C_3} + \frac{F_3 F_1 S_2 S_3 S_4}{F_4 F_2 S_1} C_1 - \frac{F_1 S_3}{F_3 S_1} C_1 C_2 C_4$$

$$- \frac{F_1 S_2}{F_2 S_1} C_1 C_3 C_4 - \frac{F_1 S_4}{F_4 S_1} C_1 C_2 C_3 - C_2 C_3 C_4$$

$$R_{22} = 2C_1 C_2 C_3 C_4 + S_2 S_3 C_1 C_4 \left(\frac{F_3}{F_2} + \frac{F_2}{F_3} \right) + S_1 S_2 C_3 C_4 \left(\frac{F_2}{F_1} + \frac{F_1}{F_2} \right) +$$

$$S_1 S_3 C_2 C_4 \left(\frac{F_3}{F_1} + \frac{F_1}{F_3} \right) + S_1 S_4 C_2 C_3 \left(\frac{F_4}{F_1} + \frac{F_1}{F_4} \right) + S_2 S_4 C_1 C_3 \left(\frac{F_4}{F_2} + \frac{F_2}{F_4} \right) +$$

$$S_3 S_4 C_1 C_2 \left(\frac{F_4}{F_3} + \frac{F_3}{F_4} \right) + \frac{F_4 F_2 S_1 S_2 S_3 S_4}{F_1 F_3 S_1 S_2 S_3 S_4} + \frac{F_1 F_3 S_1 S_2 S_3 S_4}{F_4 F_2 S_1 S_2 S_3 S_4} + \frac{F_1 S_4}{F_4 S_1} C_2 C_3 +$$

$$\frac{F_1 S_3}{F_3 S_1} C_2 C_4 + \frac{F_1 S_2}{F_2 S_1} C_3 C_4 + \frac{F_3 F_1 S_2 S_3 S_4}{F_4 F_2 S_1} \tag{B-1}$$

With the same method employed in the case of 3-layered material one can obtain the elements of the response function \overleftrightarrow{g} for the

case of 4-layered materials; they are given by:

$$\begin{bmatrix} g(n,1,1,n',1,1) \\ g(n,1,1,n',1,1) \end{bmatrix} = \begin{matrix} \text{---} \\ \text{---} \end{matrix}$$

$$\frac{t}{t^2 - 1} \left\{ t^{|n-n'|} \left[\begin{array}{l} \frac{S_3}{F_3} C_2 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_3 C_4 + \frac{F_3}{F_4 F_2} S_2 S_3 S_4 \\ \frac{F_3}{F_4 F_2} S_2 S_3 S_4 C_4 + \frac{F_3}{F_1 F_2} S_1 S_2 S_3 C_4 + \frac{F_4}{F_1 F_2} S_1 S_2 S_4 C_3 + \frac{F_4}{F_1 F_3} S_1 S_3 S_4 C_2 \\ \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 C_4 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 C_4 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 C_2 C_3 \end{array} \right] \right\}$$

$$t^{|n-n'-1|} \left\{ \begin{array}{l} - \frac{S_1}{F_1} \\ 0 \end{array} \right\}$$

(B-2)

$$\begin{bmatrix} g(n,1,\bar{1},n',2,1) \\ g(n,1,1,n',2,1) \end{bmatrix} =$$

$$\frac{t}{t^2-1} \left\{ t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{S_4}{F_4} C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_4 \\ \frac{F_4}{F_1 F_3} S_1 S_3 S_4 + \frac{S_1}{F_1} C_3 C_4 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 C_3 \end{bmatrix} \right\}$$

$$t^{|n-n'-1|} \left[\begin{array}{l} -\frac{S_2}{F_2} C_1 - \frac{S_1}{F_1} C_2 \\ -\frac{S_2}{F_2} \end{array} \right] \quad (B-3)$$

$$\begin{bmatrix} g(n,1,1,n',3,1) \\ g(n,1,1,n',3,1) \end{bmatrix} =$$

$$\frac{t}{t^2-1} \left\{ t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{S_4}{F_4} \\ \frac{S_1}{F_1} C_4 - \frac{S_4}{F_4} C_1 \end{bmatrix} \right\} -$$

$$t^{|n-n'-1|} \left[\begin{array}{l} -\frac{F_2}{F_1 F_3} S_1 S_2 S_3 + \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 \\ -\frac{S_3}{F_3} C_2 - \frac{S_2}{F_2} C_3 \end{array} \right] \right\}$$

(B-4)

$$\begin{bmatrix} g(n,1,1,n',4,1) \\ g(n,1,1,n',4,1) \end{bmatrix} =$$

$$\frac{t}{t^2-1} \left\{ t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{S_1}{F_1} \end{bmatrix} - \right.$$

$$\left. t^{|n-n'-1|} \begin{bmatrix} \frac{F_2}{F_1 F_3} S_1 S_2 S_3 C_4 - \frac{F_3}{F_1 F_4} S_1 S_3 S_4 C_2 - \frac{F_2}{F_1 F_4} S_1 S_2 S_4 C_3 - \frac{F_3}{F_2 F_4} S_2 S_3 S_4 C_1 \\ - \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 C_4 - \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 C_4 - \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 C_4 - \frac{S_4}{F_4} C_1 C_2 C_3 \\ - \frac{F_3}{F_2 F_4} S_2 S_3 S_4 - \frac{S_2}{F_2} C_3 C_4 + \frac{S_3}{F_3} C_2 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_2 C_3 \end{bmatrix} \right\}$$

(B-5)

$$\begin{bmatrix} g(n,2,1,n',1,1) \\ g(n,2,1,n',1,1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \\ \\ \end{bmatrix}$$

$$\frac{t}{t^2-1} \left\{ t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{F_3}{F_4 F_2} S_2 S_3 S_4 C_1 + \frac{F_3}{F_1 F_2} S_1 S_2 S_3 C_4 + \frac{F_4}{F_1 F_2} S_1 S_2 S_4 C_3 + \frac{F_4}{F_1 F_3} S_1 S_3 S_4 C_2 \\ \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 C_4 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 C_4 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 C_2 C_3 \\ \frac{S_2}{F_2} (2\eta) + \frac{F_4}{F_1 F_3} S_1 S_3 S_4 + \frac{S_1}{F_1} C_3 C_4 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_4 \end{bmatrix} \right\}$$

$$t^{|n-n'-1|} \left[\begin{array}{c} 0 \\ \frac{S_2}{F_2} \end{array} \right] + \delta_{nn'} \left[\begin{array}{c} 0 \\ \frac{S_2}{F_2} \end{array} \right] \tag{B-6}$$

$$\begin{bmatrix} g(n,2,1,n',2,1) \\ g(n,2,1,n',2,1) \end{bmatrix} =$$

$$\frac{t}{t^2-1} \left\{ t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{S_1}{F_1} C_3 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_4 + \frac{F_4}{F_1 F_3} S_3 S_4 \\ \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 C_4 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 C_4 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 C_2 C_3 + \\ \frac{F_4}{F_1 F_3} S_1 S_3 S_4 C_2 + \frac{F_4}{F_2 F_3} S_2 S_3 S_4 C_1 + \frac{F_1}{F_2 F_4} S_1 S_2 S_4 C_3 + \frac{F_1}{F_2 F_3} S_1 S_2 S_3 C_4 \end{bmatrix} \right\}$$

$$t^{|n-n'-1|} \left[\begin{array}{c} \frac{S_2}{F_2} \\ 0 \end{array} \right]$$

(B-7)

$$\begin{bmatrix} g(n,2,1,n',3,1) \\ g(n,2,1,n',3,1) \end{bmatrix} =$$

$$\frac{t}{t^2-1} \left\{ t^{|n-n'|} \left[\begin{array}{c} \frac{S_1}{F_1} C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 \\ \frac{S_1}{F_1} C_2 C_4 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2 F_4} S_1 S_2 S_4 \end{array} \right] \right\}$$

$$t^{|n-n'-1|} \left[\begin{array}{c} -\frac{S_3}{F_3} C_2 - \frac{S_2}{F_2} C_3 \\ -\frac{S_3}{F_3} \end{array} \right]$$

(B-8)



$$\begin{bmatrix} g(n, 2, 1, n', 4, 1) \\ g(n, 2, 1, n', 4, 1) \end{bmatrix} =$$

$$\frac{t}{t^2 - 1} \left\{ t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{S_1}{F_1} \\ \frac{S_1}{F_1} C_2 - \frac{S_2}{F_2} C_1 \end{bmatrix} - t^{|n-n'-1|} \begin{bmatrix} -\frac{F_3}{F_2 F_4} S_2 S_3 S_4 - \frac{S_4}{F_4} C_2 C_3 - \frac{S_3}{F_3} C_2 C_4 - \frac{S_2}{F_2} C_3 C_4 \\ -\frac{S_4}{F_4} C_3 - \frac{S_3}{F_3} C_4 \end{bmatrix} \right\}$$

(B-9)

$$\begin{bmatrix} g(n, 3, 1, n', 1, 1) \\ g(n, 3, 1, n', 1, 1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(n, 2, 1, n', 1, 1) \\ g(n, 1, 1, n', 3, 1) \end{bmatrix} \quad (B-10)$$

$$\begin{bmatrix} g(n, 3, 1, n', 2, 1) \\ g(n, 3, 1, n', 2, 1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(n, 2, 1, n', 2, 1) \\ g(n, 2, 1, n', 3, 1) \end{bmatrix} \quad (B-11)$$

$$\begin{bmatrix} g(n, 3, \bar{1}, n', 3, 1) \\ g(n, 3, 1, n', 3, 1) \end{bmatrix} =$$

$$\left\{ t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{F_1}{F_2 F_4} S_1 S_2 S_4 + \frac{S_1}{F_1} C_2 C_4 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 C_2 \\ \frac{F_2}{F_3 F_4} S_2 S_3 S_4 C_1 + \frac{F_1}{F_3 F_4} S_1 S_3 S_4 C_2 + \frac{F_1}{F_2 F_4} S_1 S_2 S_4 C_3 + \frac{F_2}{F_1 F_3} S_1 S_2 S_3 C_4 \\ \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 C_4 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 C_4 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 C_2 C_3 \end{bmatrix} \right\}$$

$$\left\{ t^{|n-n'-1|} \begin{bmatrix} -\frac{S_3}{F_3} \\ 0 \end{bmatrix} \right\} \frac{t}{t^2 - 1} \quad (B-12)$$

$$\begin{bmatrix} g(n,3,1, n',4,1) \\ g(n,3,1, n',4,1) \end{bmatrix} =$$

$$\frac{t}{t^2-1} \left\{ t^{|n-n'|} \left[\begin{aligned} &-\frac{S_2}{F_2} C_1 + \frac{S_1}{F_1} C_2 \\ &\frac{F_2}{F_1 F_3} S_1 S_2 S_3 + \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 \end{aligned} \right] \right\}$$

$$t^{|n-n'-1|} \left[\begin{aligned} &-\frac{S_4}{F_4} C_3 - \frac{S_3}{F_3} C_4 \\ &-\frac{S_4}{F_4} \end{aligned} \right]$$

(B-13)

$$\begin{bmatrix} g(n,4,\bar{1},n',1,1) \\ g(n,4,1,n',1,1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(n,1,1,n',1,1) \\ g(n,1,1,n',4,1) \end{bmatrix} \quad (B-14)$$

$$\begin{bmatrix} g(n,4,\bar{1},n',2,1) \\ g(n,4,1,n',2,1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(n,1,1,n',2,1) \\ g(n,2,1,n',4,1) \end{bmatrix} \quad (B-15)$$

$$\begin{bmatrix} g(n,4,\bar{1},n',3,1) \\ g(n,4,1,n',3,1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(n,1,\bar{1},n',3,1) \\ g(n,3,1,n',4,1) \end{bmatrix} \quad (B-16)$$

$$\begin{bmatrix} g(n,4,\bar{1},n',4,1) \\ g(n,4,1,n',4,1) \end{bmatrix} =$$

$$\left\{ t^{|n-n'|} \begin{bmatrix} \frac{F_2}{F_1 F_3} S_1 S_2 S_3 + \frac{S}{F} \frac{1}{1} | -C_2 C_3 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 \\ \frac{F_3}{F_2 F_4} S_2 S_3 S_4 C_1 + \frac{F_3}{F_1 F} \frac{1}{4} | S_1 S_3 S_4 C_2 + \frac{F_2}{F_1 F_4} S_1 S_2 S_4 C_3 + \frac{F_2}{F_1 F_3} S_1 S_2 S_3 C_4 \\ + \frac{S_1}{F_1} C_2 C_3 C_4 + \frac{S_2}{F_2} C_1 C_3 C_4 + \frac{S_3}{F_3} C_1 C_2 C_4 + \frac{S_4}{F_4} C_1 C_2 C_3 \end{bmatrix} \right\}$$

$$t^{|n-n'-1|} \left[\begin{array}{c} -\frac{S_4}{F_4} \\ 0 \end{array} \right] \left\{ \frac{t}{t^2 - 1} \right\} \quad (B-17)$$

CHAPITRE IV L'APPLICATION

IV.1. INTRODUCTION

Le développement technologique actuel a permis la mise au point de techniques modernes de croissance contrôlée des matériaux composites. On s'est surtout intéressé aux structures multilamellaires synthétisées par la méthode Molecular Beam Epitaxy (M.B.E.) ou d'autres techniques.

La possibilité d'application des hétérostructures en tant que prototypes électroniques ou électro-optiques, construits avec des matériaux semiconducteurs, a beaucoup intéressé les scientifiques et les technologues. Des superréseaux à deux couches de matériaux différents par cellule unitaire, tels que $(\text{GaAs} - \text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As})$, $(\text{GaAs} - \text{AlAs})$, $(\text{CdTe} - \text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te})$, $(\text{Si} - \text{Ge}_x\text{Si}_{1-x})$; etc. ont été l'objet d'études théoriques et expérimentales intenses et les publications sont nombreuses. Cependant, le cas des matériaux à 3 ou 4 couches est encore peu étudié et les publications sont rares.

Des études sur les propriétés de diffusion de la lumière par les phonons optiques et acoustiques, l'existence de bandes et la présence d'une minizone de Brillouin, comme conséquence de la périodicité de la super-structure, sont les aspects les plus marquants qui ont fait l'objet de recherches sur les vibrations dans ces matériaux composites, [14].

Différents modèles et approximations ont été développés pour expliquer ces propriétés: le modèle de Ritov, dans l'approximation continue [15], celui de Sung-Kit Yia [16], celui de la chaîne linéaire de Colvard et coll [17], celui de C. Tamura pour les superréseaux à N-couches [18], et d'autres, fondés sur la méthode de la Matrice de Transfert, développée par B. Djafari-Rouhani et coll.[19].

Dans ce chapitre nous montrons une application des résultats théoriques obtenus avec la théorie Universelle de Fonction Réponse des Interfaces, dans l'approximation des milieux continus pour les

cas de 3 et 4 couches par cellule unitaire.

Nous explicitons d'abord quelques conséquences dérivant des relations de dispersion pour les phonons acoustiques sous la condition particulière $K_{//} = 0$.

Nous donnons ensuite les caractéristiques des quatre superréseaux synthétisés, les conditions des expériences Raman pour ces échantillons et les résultats expérimentaux obtenus et finalement ces résultats sont comparés avec les valeurs théoriques que nous avons obtenues.

IV.2.1.- PHONONS LONGITUDINAUX ET TRANSVERSAUX. RELATIONS DE DISPERSION ET LEURS CONSEQUENCES

Les relations de dispersion pour les phonons transversaux dans les superréseaux à 3 et 4-couches par cellule unitaire dans l'approximation des milieux continus ont été présentés dans le chapitre III. Par la suite nous allons transcrire l'équation correspondant au superréseau à 3-couches sur laquelle on fera une analyse d'interprétation, valable aussi pour les superréseaux à 4-couches.

La relation de dispersion pour les phonons, associée aux ondes élastiques polarisées transversalement dans la direction X_2 (Fig. IV.1), est donnée par:

$$\cos K_{\parallel} a = C_1 C_2 C_3 + \frac{1}{2} S_1 S_2 C_3 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) + \frac{1}{2} S_1 S_3 C_2 \left(\frac{F_1}{F_3} + \frac{F_3}{F_1} \right) + \frac{1}{2} S_2 S_3 C_1 \left(\frac{F_2}{F_3} + \frac{F_3}{F_2} \right)$$

(1)

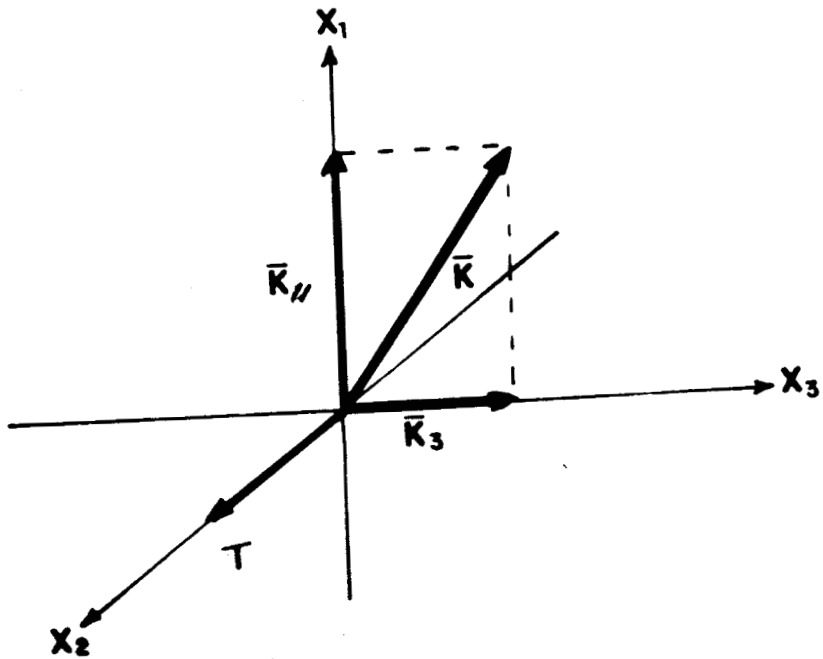
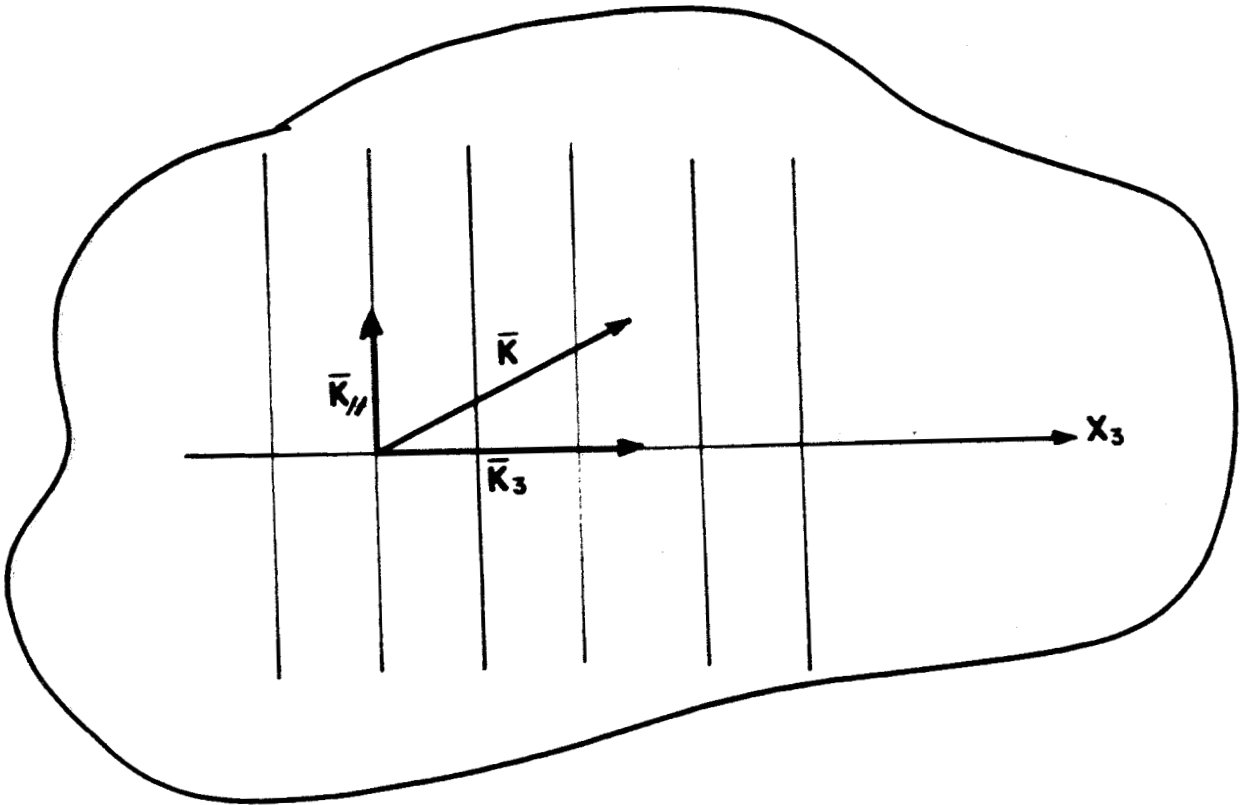


Figure IV.1. - Direction de propagation et de polarisation d'une onde élastique.

En rappelant que :

$$a_u = 2 \sum_i a_i \quad (2a)$$

$$C_i = \cosh (2a_i \alpha_i) \quad (2b)$$

$$S_i = \sinh (2a_i \alpha_i) \quad (2c)$$

$$F_i = C_{44}^{(i)} \alpha_i \quad (2d)$$

$$\alpha_i = \left[K_{//}^2 - \frac{\omega^2}{C_{ti}^2} \right]^{1/2} \quad (2e)$$

K_3 et $K_{//}$ sont les composantes du vecteur d'onde \vec{K} , la première dans la direction x_3 et la seconde parallèle au plan perpendiculaire à x_3 . a_u est la largeur de la super-cellule unitaire. $2a_i$ est la largeur de chaque couche i . $C_{44}^{(i)}$ et C_{ti} sont respectivement la constante élastique et la vitesse transversale du son dans le milieu i , ω est la fréquence.

Un cas particulier de l'équation (1) est obtenu en faisant $K_{//} = 0$. Cette condition conduit à réduire le paramètre α_i :

$$\alpha_i = \left[K_{//}^2 - \frac{\omega^2}{C_{ti}^2} \right]^{1/2} = i \left(\frac{\omega}{C_{ti}} \right) \quad (3)$$

où

$$\alpha_i = i \alpha_i^- \quad (4)$$

$$\text{avec } \alpha_i^- = \frac{\omega}{C_{ti}} \quad (5)$$

Avec α_i donné par (4) les fonctions hyperboliques deviennent des fonctions trigonométriques.

$$\text{Sinh } (2a_i \alpha_i) = i \text{ Sin } (2a_i \bar{\alpha}_i) \equiv \bar{S}_i \quad (6)$$

$$\text{Cosh } (2a_i \alpha_i) = \text{Cos } (2a_i \bar{\alpha}_i) \equiv \bar{C}_i$$

et de la même façon :

$$F_i = C_{44}^{(i)} \alpha_i = i C_{44}^{(i)} \left(\frac{\omega}{C_{ti}} \right) \quad (7)$$

$$\text{et tenant compte que } C_{ti}^2 \equiv \frac{C_{44}^{(i)}}{\rho_i} \quad (8)$$

$$F_i = \rho_i C_{ti} (i\omega) \equiv \bar{F}_i (i\omega) \quad (9)$$

$$\bar{F}_i \equiv \rho_i C_{ti}$$

et la relation (1) prend la forme :

$$\begin{aligned} \text{Cos } (K_3 a_u) = & \bar{C}_1 \bar{C}_2 \bar{C}_3 - \frac{1}{2} \bar{S}_1 \bar{S}_2 \bar{C}_3 \left[\frac{\bar{F}_1}{\bar{F}_2} + \frac{\bar{F}_2}{\bar{F}_1} \right] - \frac{1}{2} \bar{S}_1 \bar{S}_3 \bar{C}_2 \left[\frac{\bar{F}_1}{\bar{F}_3} + \frac{\bar{F}_3}{\bar{F}_1} \right] \\ & - \frac{1}{2} \bar{S}_2 \bar{S}_3 \bar{C}_1 \left[\frac{\bar{F}_2}{\bar{F}_3} + \frac{\bar{F}_3}{\bar{F}_2} \right] \quad (10) \end{aligned}$$

Remarquons que la condition $K_{//} = 0$ dans l'équation (1), déduite pour une onde élastique se propageant dans le plan $x_1 x_3$ et polarisée dans la direction x_2 , est équivalente au cas des ondes élastiques se propageant dans la direction [001] (Fig. IV2a).

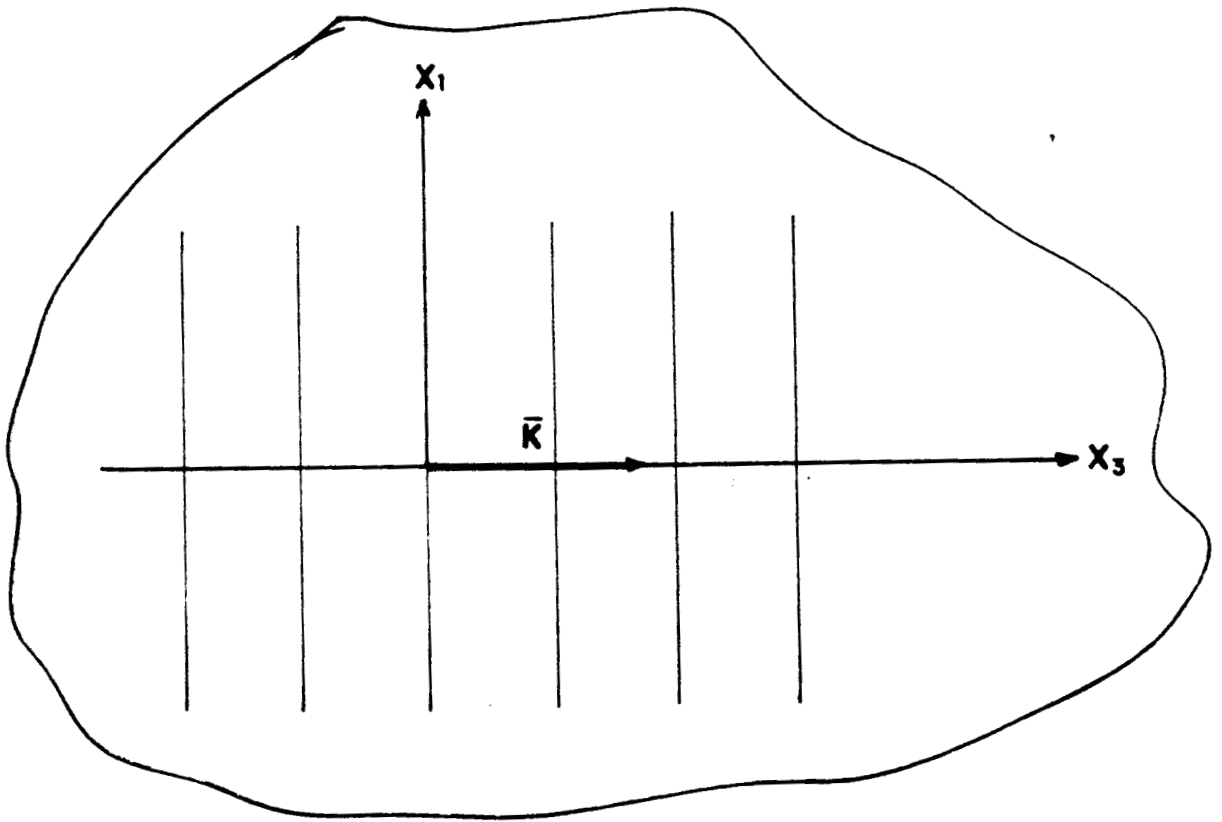


Figure IV.2a. -L'onde élastique se propageant dans la direction [001].

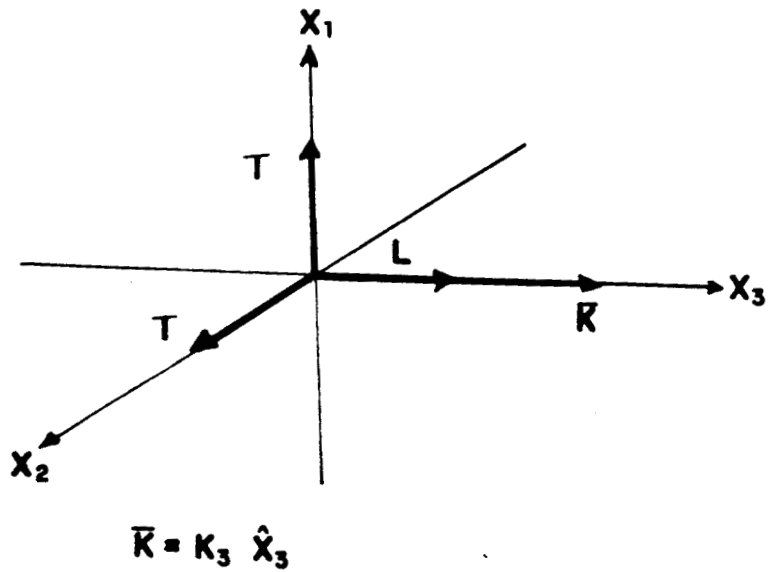


Figure IV.2b. -Les directions de polarisation des trois modes d'oscillation par l'onde élastique se propageant dans la direction [001].

Dans le chapitre I on a montré que pour le cas d'une onde se propageant selon l'un des axes, les trois modes d'oscillation sont découplés : deux modes transversaux dégénérés, perpendiculaires à \vec{K} et un troisième mode longitudinal et parallèle au vecteur d'onde, (Fig.IV 2b).

D'autre part, on a pris, de l'opérateur H_{oi} , dans son domaine de définition D_{oo} (eq.16 chap.III), l'élément H_{22} comme point de départ pour le développement théorique des phonons transversaux. Dans cet opérateur, lorsqu'on fait $K_{//} = 0$, on obtient une matrice diagonale où les éléments ont la forme générale:

$$H_{ss} = C_{si}^2 D^2 - \omega^2 \quad (11)$$

avec

$$C_{si} \equiv C_{1i}, C_{2i}, C_{3i}$$

$$C_{2i} = C_{1i} = C_{3i} \equiv \frac{C_{44}^{(i)}}{\rho_i} \quad (12)$$

$$C_{3i} = C_{1i} \equiv \frac{C_{11}^{(i)}}{\rho_i}$$

$$D \equiv \frac{d}{dx_3} \quad (13)$$

De ces trois éléments, ayant tous la même forme fonctionnelle, deux sont associés aux modes transversaux (H_{11}, H_{22}) et l'un au mode longitudinal (H_{33}).

Nous pouvons, donc écrire une relation de dispersion pour les phonons acoustiques, transversaux ou longitudinaux, associées aux ondes élastiques se propageant avec un vecteur d'onde K dans la direction $[001]$ dans les superréseaux à 3-couches

$$\begin{aligned} \text{Cos} \left(K_3 a_u \right) &= \text{Cos} \left(\frac{d_1}{C_1} \omega \right) \text{Cos} \left(\frac{d_2}{C_2} \omega \right) \text{Cos} \left(\frac{d_3}{C_3} \omega \right) \\ &- \frac{1}{2} \text{Sin} \left(\frac{d_1}{C_1} \omega \right) \text{Sin} \left(\frac{d_2}{C_2} \omega \right) \text{Cos} \left(\frac{d_3}{C_3} \omega \right) \bar{F}_{12} \\ &- \frac{1}{2} \text{Sin} \left(\frac{d_2}{C_2} \omega \right) \text{Sin} \left(\frac{d_3}{C_3} \omega \right) \text{Cos} \left(\frac{d_1}{C_1} \omega \right) \bar{F}_{23} \\ &- \frac{1}{2} \text{Sin} \left(\frac{d_1}{C_1} \omega \right) \text{Sin} \left(\frac{d_3}{C_3} \omega \right) \text{Cos} \left(\frac{d_2}{C_2} \omega \right) \bar{F}_{13} \end{aligned} \quad (14)$$

où

$$\bar{F}_{ij} = \left(\frac{\bar{F}_i}{\bar{F}_j} + \frac{\bar{F}_j}{\bar{F}_i} \right) \quad (15a)$$

$$\bar{F}_i = \rho_i C_i \quad (15b)$$

$$C_i = \begin{cases} C_{ti} & \text{pour les phonons transversaux} \\ C_{li} & \text{pour les phonons longitudinaux} \end{cases}$$

et $d_i = 2a_i$, l'épaisseur de chaque couche.

IV.2.2- MINI-ZONE REDUITE, FOLDING, GAPS

L'équation (14) est une relation fonctionnelle implicite entre la fréquence ω et le vecteur d'onde K_3 associé au phonon dans le superréseau. Lorsqu'on résout, numériquement, cette expression en employant les données du Tableau II[19,20], on obtient le graphique de la Fig.IV3a; d'une façon analogue, en utilisant la correspondante relation de dispersion pour le cas de 4-couches on obtient le graphique de la Fig.IV3b.

TABEAU I
DONNEES POUR LE CALCUL DE LA RELATION DE DISPERSION*
DANS LES SUPERRESEAUX A 3-COUCHES (GaAl-Ga_{1-x}Al_xAs-AlAs)
ET A 4-COUCHES (Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs-GaAs)

	d_1 (Å)	d_2 (Å)	d_3 (Å)	d_4 (Å)
3-Couches	52	34	31	-
4-Couches	48	19	24	19

	C_1 (10^5 m/s)	C_2 (10^5 m/s)	C_3 (10^5 m/s)	C_4 (10^5 m/s)
3-Couches	3,329	3,455	3,958	--
4-Couches	4,708	4,803	4,708	4,803

	C_{441} (dyn/cm ²)	C_{442} (dyn/cm ²)	C_{443} (dyn/cm ²)	C_{444} (dyn/cm ²)
3-Couches	$5,94 \cdot 10^{11}$	$6,02 \cdot 10^{11}$	$5,89 \cdot 10^{11}$	--
4-Couches	$11,88 \cdot 10^{11}$	$12,00 \cdot 10^{11}$	$11,88 \cdot 10^{11}$	$12,00 \cdot 10^{11}$

*
 Mode transversal (T) pour les superréseaux à 3-couches et mode longitudinal (L) pour les superréseaux à 4-couches.

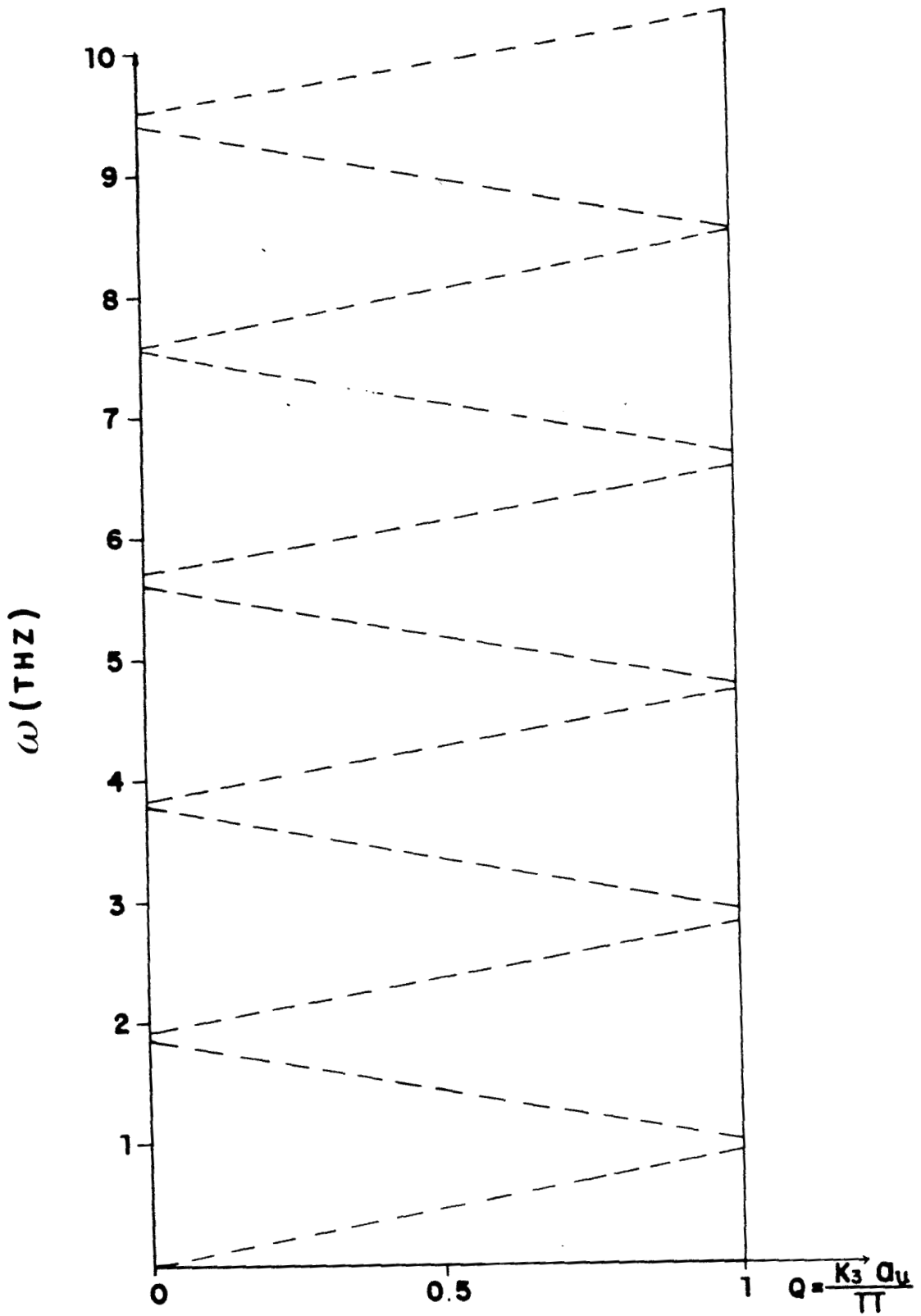


Figure IV.3a.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau à 3-couches, mode transverse.

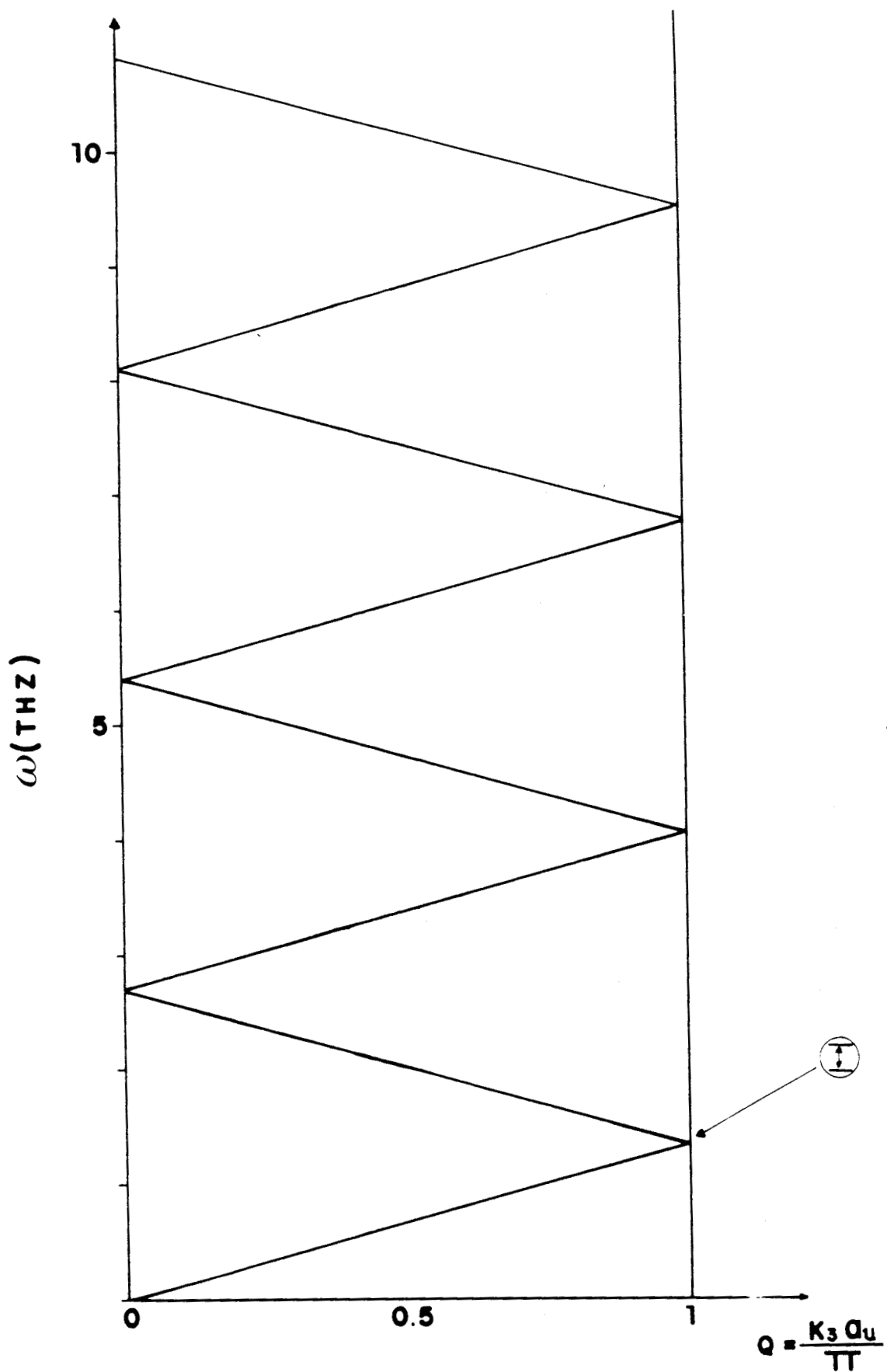


Figure IV.3b.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau à 4-couches, mode longitudinal.

Il faut d'abord remarquer l'existence d'une mini-zone analogue à celle reportée dans les publications relatives aux superréseaux à 2-couches [14,16,19], qui est appelée mini-zone réduite de Brillouin. Ce comportement est propre aux superréseaux à N-couches, conséquence de la périodicité de ces matériaux composites dans la direction de leur croissance. C'est une interprétation faite par analogie au cas de la matière étudiée du point de vue atomique et cristallin (Chap. I).

Un autre aspect important est celui du "folding" des branches de phonons. Ce comportement avait été reporté uniquement pour les matériaux à 2-couches. Nous y reviendrons par la suite d'une manière plus détaillée .

Finalement il faut noter la présence des "gaps", c'est-à-dire des intervalles de fréquences interdites (il n'y a pas de phonons acoustiques de volume dans ces intervalles).

Ces propriétés se manifestent aussi bien pour les phonons acoustiques transversaux (TA) que pour les longitudinaux (LA).

IV.2.3.- BRANCHES ACOUSTIQUES "PLIEES" TRANSVERSALES (FTA) ET LONGITUDINALES (FLA).

Une étude plus détaillée de l'équation (14) permet de donner une assignation aux branches "pliées" des phonons. En considérant la partie gauche de l'équation, nous pouvons redéfinir l'argument du cosinus suivant:

$$\cos (K_g a_u) = \cos (\pi Q) \quad (16)$$

avec

$$Q \equiv \frac{K_a a_u}{\pi}$$

et en tenant compte de la périodicité de la fonction trigonométrique nous aurons :

$$\cos(\pi Q) = \cos(\pi Q + 2\pi m) \quad (17)$$

avec $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

donc l'équation (14) devient :

$$\begin{aligned} \cos(\pi Q + 2\pi m) = & \cos(S_1 \omega) \cos(S_2 \omega) \cos(S_3 \omega) \\ & - \frac{1}{2} \sin(S_1 \omega) \sin(S_2 \omega) \cos(S_3 \omega) \bar{F}_{12} \\ & - \frac{1}{2} \sin(S_1 \omega) \sin(S_3 \omega) \cos(S_2 \omega) \bar{F}_{13} \\ & - \frac{1}{2} \sin(S_2 \omega) \sin(S_3 \omega) \cos(S_1 \omega) \bar{F}_{23} \end{aligned} \quad (18)$$

avec

$$S_i = \frac{d_i}{c_i} \quad i = 1, 2, 3 \quad (19)$$

La solution numérique de cette équation, pour les variables ω et Q , utilisant les paramètres du Tableau II sont montrés dans le graphique de la Fig. 4.

Ces résultats correspondent aux phonons transversaux; le traitement est identique pour les longitudinaux. De la même façon il faut souligner que la même procédure est applicable aux cas des superréseaux à 4-couches.

TABLEAU II

SUPERRESEAUX A 3-COUCHES
MODES TRANSVERSAUX

(GaAl - Ga_{1-x}Al_xAs - AlAs)

d_1 (Å)	d_2 (Å)	d_3 (Å)
52	34	31

ρ_1 (gr./cm ³)	ρ_2 (gr./cm ³)	ρ_3 (gr./cm ³)
5,360	5,040	3,760

C_1 (10 ⁵ cm/s)	C_2 (10 ⁵ cm/s)	C_3 (10 ⁵ cm/s)
3,329	3,455	3,958

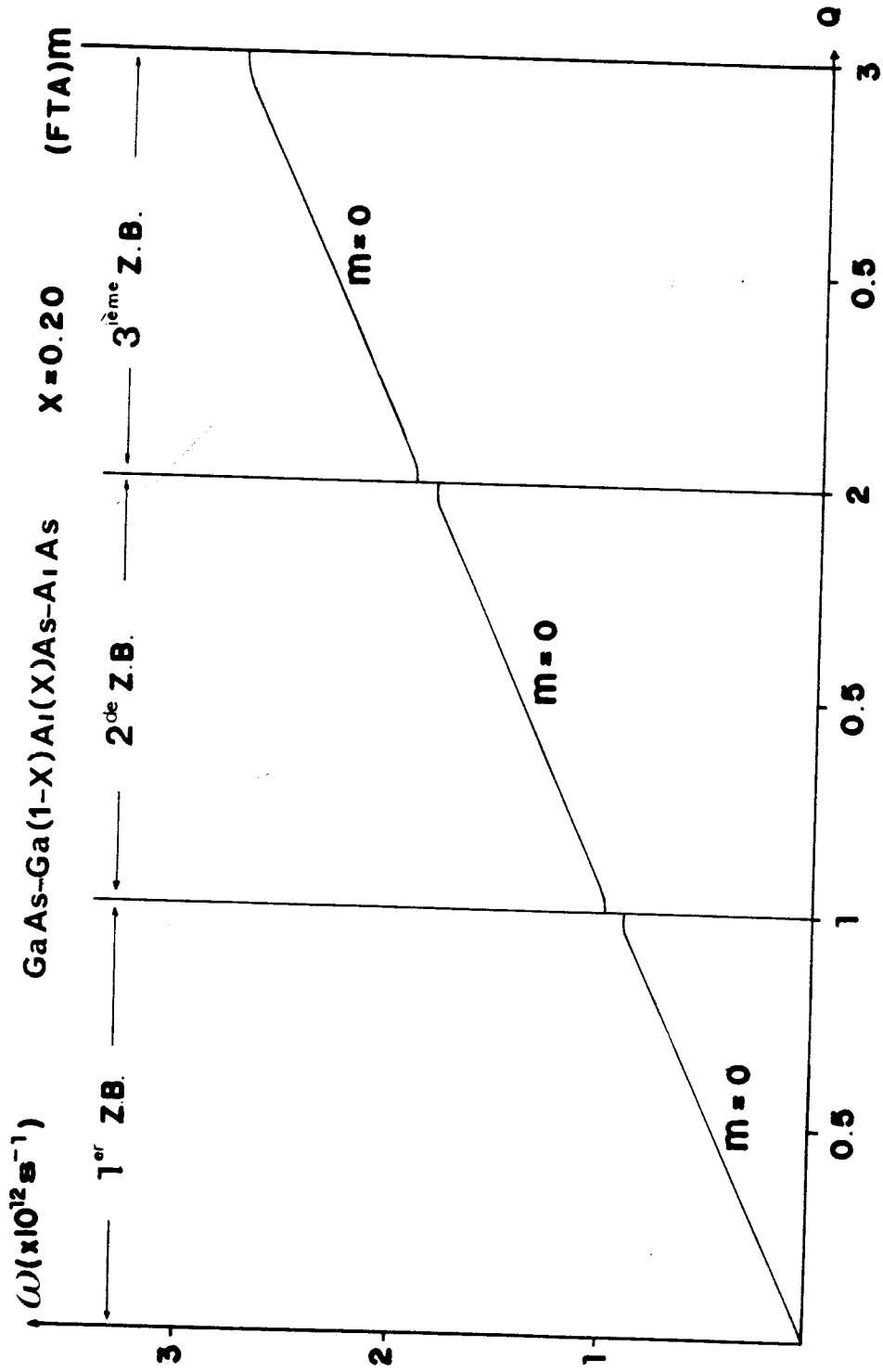


Figure IV.4a.-Le graphique de la équation (18),
cas $m = 0$.

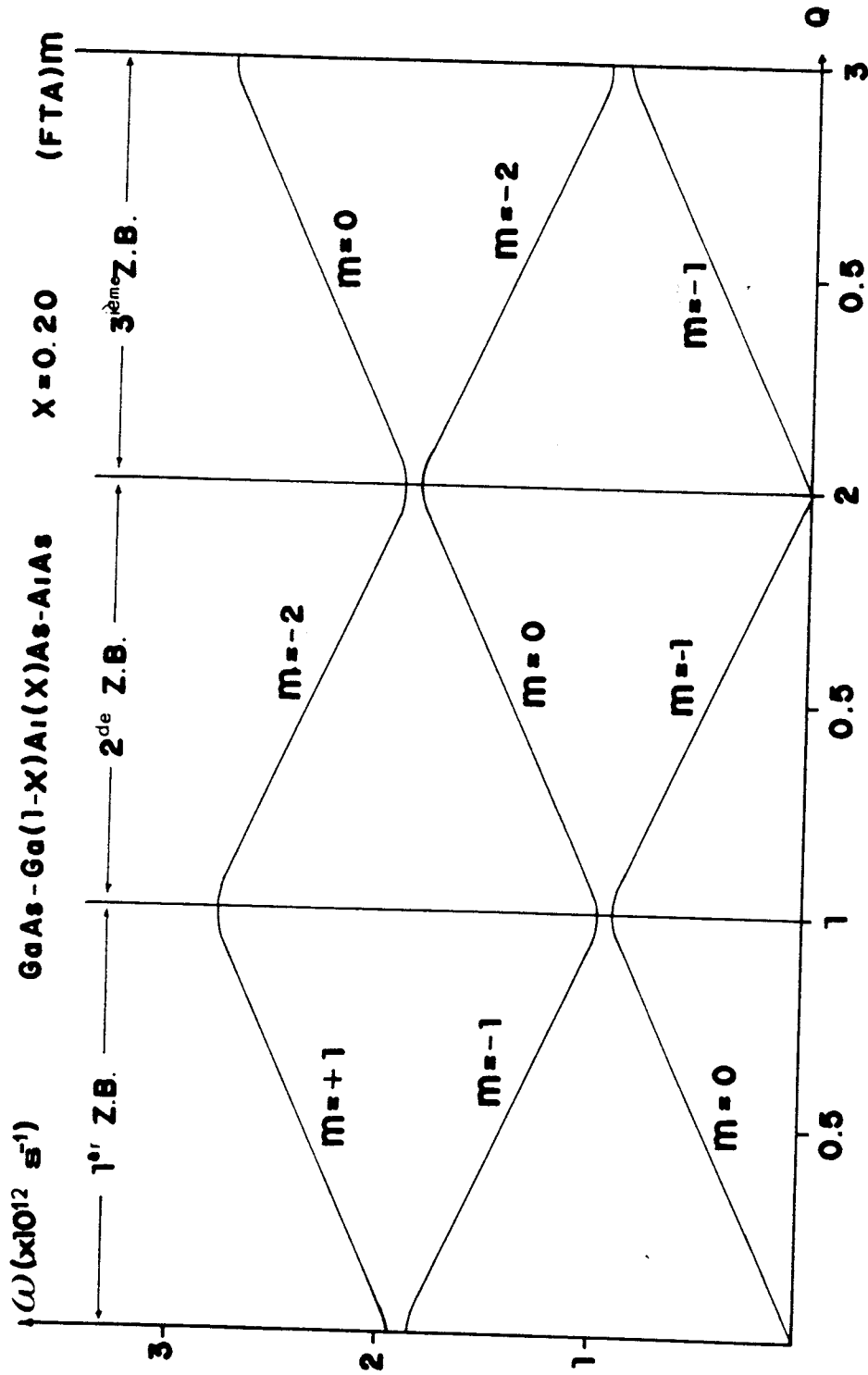


Figure IV.4b.-Le graphique de la équation (18), cas $m = \pm 1, \pm 2$.

Le graphique IV.4a correspond à $m=0$, et on a fait varier Q entre 0 et 3 ; il représente la zone étendue de la mini-zone réduite de Brillouin, on l'appelle branche phononique directe de Brillouin. (T.A) pour la partie transversale et (LA) longitudinale.

Par analogie au cas de la matière cristalline on parle de 1^{ère}, 2^{ème}, 3^{ème} minizones de Brillouin (M.Z.R.B).

Une caractéristique à relever dans ce graphique est la forme quasi linéaire, ce qui permet d'approcher par des lignes droites la solution exacte, dans chacune des minizones. Dans les publications, pour le cas des superréseaux à 2-couches, on emploie fréquemment, cette approximation, et nous l'emploierons pour les cas de nos échantillons.

En tenant compte des cas $m \neq 0$ on met en évidence la propriété de périodicité ce qui permet de faire le "pliage", c'est que nous montrons sur la Fig.IV.4b pour les cas $m = \pm 1$. En suivant la notation récente dans la publication [19] on assigne à ces branches de phonons la même nomenclature :

(FTA)_m : Branche acoustique transversale "pliée" d'ordre m

(FLA)_m : Branche acoustique longitudinale "pliée" d'ordre m

On peut observer que c'est le comportement périodique, implicite dans la relation de dispersion, qui permet de parler de minizone réduite de Brillouin.

IV.3.- DISPERSION RAMAN DANS LES SUPERRESEaux A 3 ET 4-COUCHES

La synthèse des superréseaux à 3 et 4-couches, ainsi que les expériences de diffusion Raman, effectuées récemment par D.M. Lockwood à Ottawa ont permis de vérifier les résultats théoriques obtenus, pour les phonons acoustiques dans les matériaux multilamellaires, par la théorie de Fonction Réponse des Interfaces dans l'approximation des milieux continus .

IV.3.1.- ECHANTILLONS

D'après l'information obtenue [20] les superréseaux à 3 et 4-couches ont été synthétisés par MBE à partir des matériaux semiconducteurs GaAs , $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, AlAs , avec un ordre lamellaire identique à celui de la Fig.5. Les échantillons ont été caractérisés par MBE-429,444 et 451 pour les superréseaux à 3-couches, et BMBE-180 pour celui à 4-couches.

Les paramètres associés à l'épaisseur d_i ($d_i = 2a_i$, $i=1, 2, 3, 4$) et le pourcentage de concentration d'impureté dans l'alliage x , sont présentés dans le Tableau III. Ces paramètres furent fixés à partir des enregistrements de Microscopie Electronique de transmission (TEM) et des conditions de croissance (shutter-time) de façon analogue à celle reportée par le même auteur pour les superréseaux à 2-couches ($\text{Si}/\text{Ga}_{1-x}\text{Si}_x$) [21].

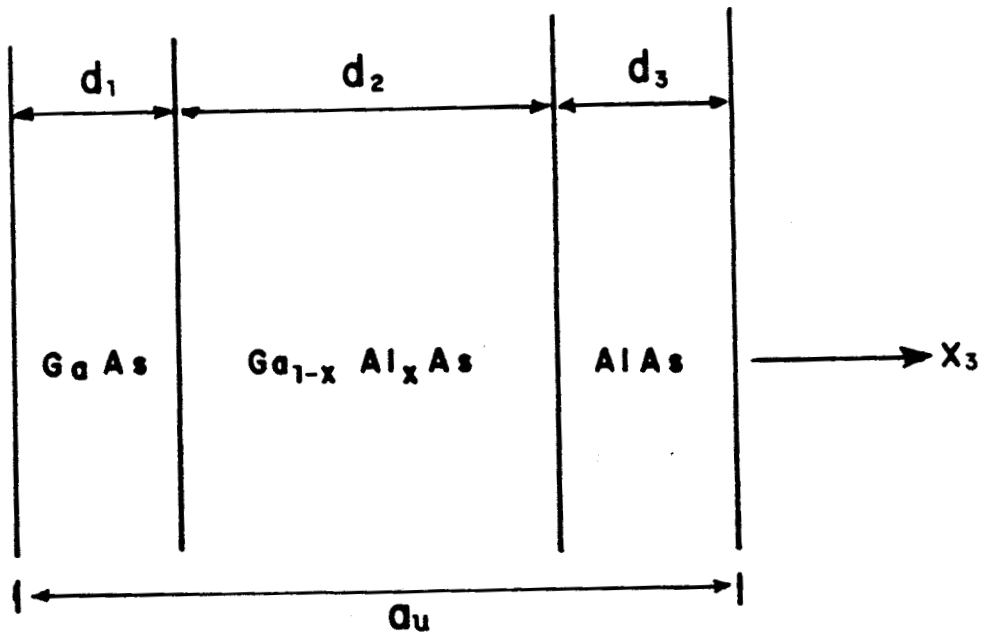


Figure IV.5. -L'ordre lamellaire des superréseaux à 3 et 4-couches.

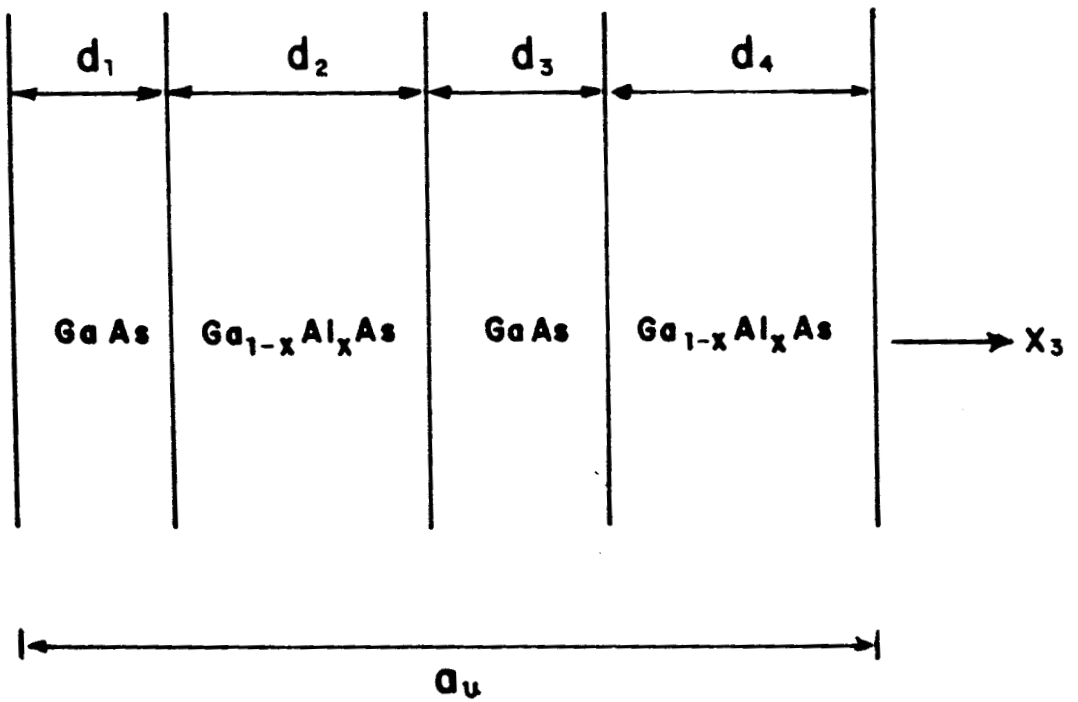


TABLEAU III
L'ÉPAISSEUR DE CHAQUE COUCHE DANS LES SUPERRESEAUX

	d_1 (Å)	d_2 (Å)	d_3 (Å)	d_4 (Å)	a_u (Å)	X %
MBE-429	52 ± 3	34 ± 3	31 ± 3	-	117 ± 3	20
MBE-444	43 ± 3	19 ± 3	10 ± 3	-	72 ± 3	19
MBE-451	74 ± 3	17 ± 3	15 ± 3	-	106 ± 3	12
MBE-180	48 ± 3	19 ± 3	24 ± 3	19 ± 3	110 ± 3	10

IV.3.2.- EXPERIENCE RAMAN. CONDITIONS ET RESULTATS

Ainsi qu'on le mentionne [21], les spectres Raman furent pris avec une géométrie de diffusion à 90° comme on le montre dans la Fig.IV.6, où l'angle $\theta = 12,3^\circ$ correspond à celui de Brewster. Avec cette géométrie on se place assez près de la condition de rétrodiffusion à l'intérieur de l'échantillon, c'est à dire dans une condition de 180° entre le vecteur d'onde de la radiation

Axes dans l'échantillon

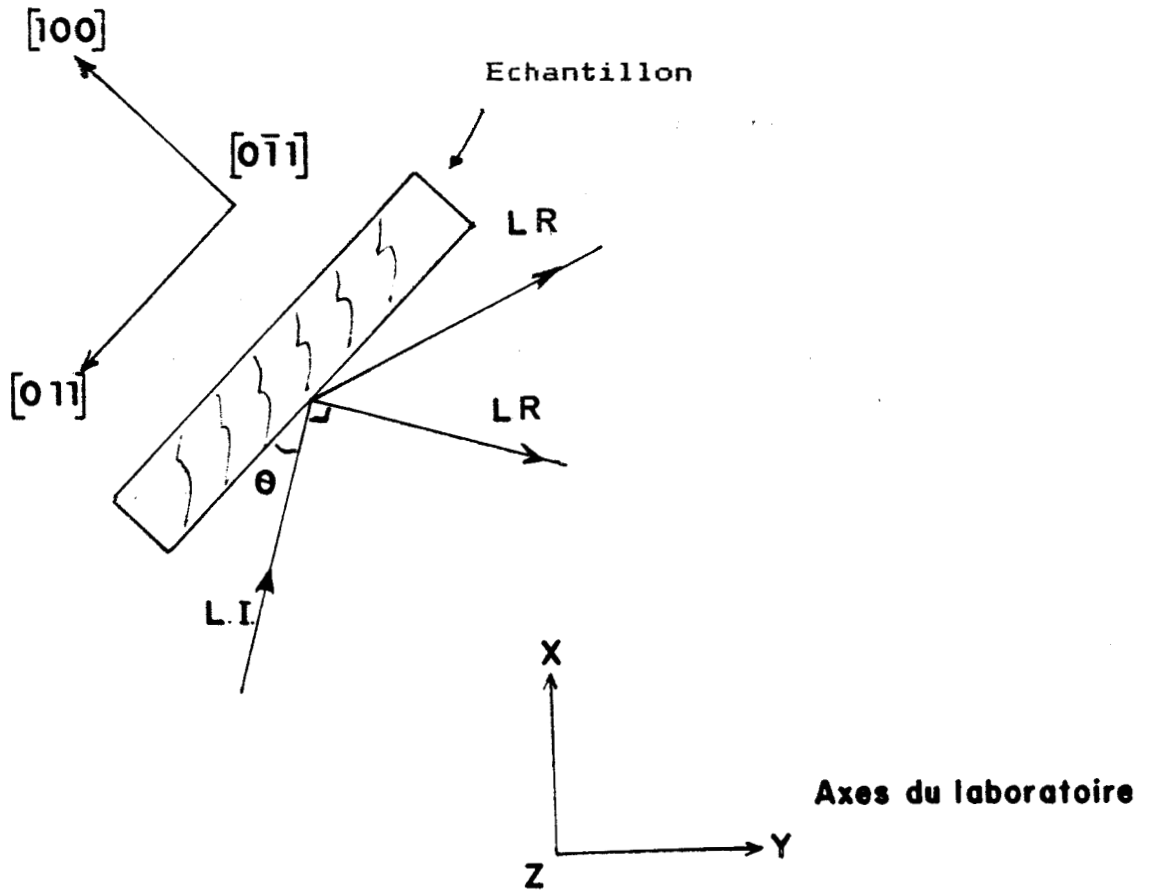


Figure IV.6. - La géométrie de diffusion à 90°.

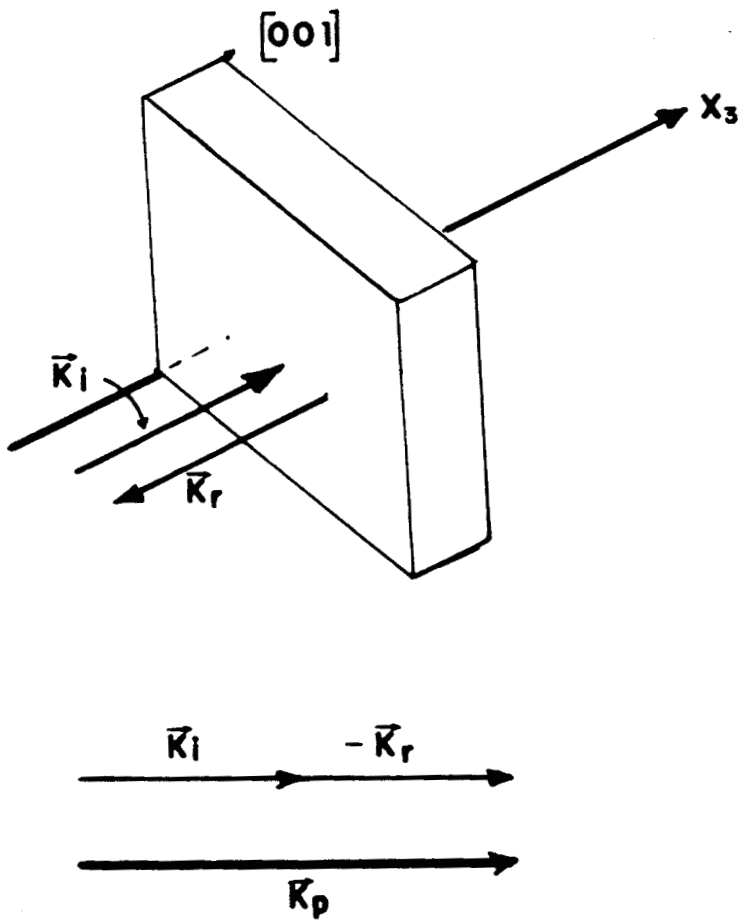


Figure IV.7.-La condition de retrodiffusion à l'intérieur de l'échantillon

incidente \vec{K}_i et de la radiation diffusée \vec{K}_r , (Fig. IV.7). Dans ces conditions, la conservation du vecteur d'onde s'écrit :

$$\vec{K}_s = \vec{K}_i - \vec{K}_r \quad (20)$$

où \vec{K}_s est le vecteur d'onde associé au phonon diffusé.

La radiation excitatrice, dans les longueurs d'onde 4579 \AA et 4765 \AA et de 300 mw de puissance, a été produite par un Laser Argon. La radiation diffusée a été analysée avec un monochromateur à double réseau, Spex-14018 et détectée par un photomultiplicateur refroidi, RCA-31034A. Les enregistrements ont été contrôlés par ordinateur [21].

Les résultats, qui nous ont été envoyés, apparaissent dans les tableaux IV, V, VI et VII, où on a résumé les décalages Raman et l'intensité, mesurée en nombres de coups/sec. dans des conditions standard d'excitation avec une résolution de $1,6 \text{ cm}^{-1}$ (100μ de largeur de fente).

TABLEAU IV
 MODES ACOUSTIQUES - ECHANTILLON
 MBE - 429

No Pics	RESULTATS EXPERIMENTAUX ($\lambda=4579 \text{ \AA}$)	
	ω (cm^{-1})	INTENSITE (coups/s.)
1	5,4 \pm 0,5	100
2	6,1 "	330
3	8,8 "	85
4	10,6 "	1370
5	14,3 "	130
6	16,8 "	690
7	20,7 "	15
8	24,8 "	47
9	30,9 "	37
10	36,2 "	6
11	39,0 "	6
12	45,0 "	16
13	52,9 "	21
14	59,0 "	5
15	66,0 "	9
16	73,0 "	7

TABLEAU V
 MODES ACOUSTIQUES - ECHANTILLON
 MBE - 444

No Pics	RESULTATS EXPERIMENTAUX ($\lambda=4579 \text{ \AA}$)	
	ω (cm^{-1})	INTENSITE (coups /s.)
1	10,7	58
2	12,3	100
3	18,5	580
4	24,6	480
5	39,9	70
6	45,7	17
7	61,2	30
8	67,3	16
9	71,5	5
10	83,0	3

TABLEAU VI
 MODES ACOUSTIQUES - ECHANTILLON
 MBE - 451

No Pics	RESULTATS EXPERIMENTAUX ($\lambda=4705 \text{ \AA}$)	
	ω (cm^{-1})	INTENSITE (coups/s.)
1	11,7 \pm 0,5	1200
2	13,4 "	--
3	17,1 "	450
4	--	--
5	22,0 "	54
6	26,6 "	39
7	32,0 "	37
8	40,5 "	16
9	46,6 "	13
10	--	--

TABLEAU VII
 MODES ACOUSTIQUES - ECHANTILLON
 BMBE - 180

No Pics	RESULTATS EXPERIMENTAUX ($\lambda=4579 \text{ \AA}$)	
	ω (cm^{-1})	INTENSITE (coups /s.)
1	10,9 \pm 0,5	100
2	16,8 "	60
3	25,3 "	73
4	31,6 "	61
5	39,9 "	10
6	45,8 "	11

IV.4. - INTERPRETATION DES RESULTATS

Pour vérifier que la théorie et l'expérience concordent, nous avons résolu numériquement les relations de dispersion pour chacun des échantillons (MBE-429, 444, 451 et BMBE-180) dans la condition $K_{//}=0$, qui correspond à la diffusion de 180° . Comme nous l'avons déjà vu, les relations de dispersion, dans cette condition, pour les phonons longitudinaux et transversaux se différencient uniquement par la valeur de leurs paramètres respectifs ($C_{44}(i)$, C_{ii} pour les transversaux et $C_{11}(i)$, C_{ii} pour les longitudinaux).

Les valeurs numériques des paramètres, ρ_i , $C_{44}(i)$, $C_{11}(i)$, C_{ii} , C_{ii} , et n_i caractérisant les matériaux GaAl et AlAs ont été directement tirées des publications [18,22,23]. Pour le $Ga_{1-x}Al_xAs$, selon les différentes valeurs de x , (10%, 12%, 19% et 20%), ces paramètres ont été estimés par interpolation linéaire entre GaAl et AlAs dans l'intervalle $x = 0$ et $x = 1$.

L'indice de réfraction n_i a été calculé, à son tour, pour chaque longueur d'onde (4579 \AA et 4765 \AA).

Un résumé des valeurs des paramètres est présenté dans le Tableau VIII. A l'aide de ces valeurs et celles du Tableau III nous avons résolu les équations de dispersion et les résultats sont présentés, pour chaque échantillon, dans les graphiques IV.8, IV.9, IV.10 et IV.11, où l'axe vertical correspond à ω en s^{-1} et l'axe horizontal au vecteur d'onde réduit et sans dimensions $Q = \frac{Ks \text{ au}}{\pi}$.

Pour vérifier la corrélation entre résultats théoriques et expérimentaux on détermine le vecteur d'onde réduit associé à la diffusion pour chaque longueur d'onde de la radiation excitatrice.

TABLEAU VIII
 DONNEES POUR LE CALCUL DE LA RELATION DE DISPERSION
 DES SUPERRESEaux À 3 ET 4-COUCHES

MATERIAU	n_i (4765 Å)	n_i (4579 Å)	ρ_i gr./cm ³	$C_{11}(i)$ 10^{11} dyn/cm ²	$C_{44}(i)$ 10^{11} dyn/cm ²	C_{li} 10^5 cm/s.	C_{ti} 10^5 cm/s.
GaAs	4,500	4,721	5,360	11,888	5,940	4,780	3.329
$Ga_{1-x}Al_xAs$ $x = 0,20$	4,315	4,477	5,040	12,090	6,020	4,897	3,455
$Ga_{1-x}Al_xAs$ $x = 0,19$	4,325	4,490	5,056	12,080	6,010	4,888	3,449
$Ga_{1-x}Al_xAs$ $x = 0,12$	4,389	4,575	5,168	12,016	5,990	4,822	3,405
$Ga_{1-x}Al_xAs$ $x = 0,10$	---	4,579	5,200	12,000	5,980	4,803	3,390
AlAs	3,577	3,503	3,760	12,020	5,890	5,654	3,958

Figure IV.8.-Le graphique de la relation de dispersion pour le super-réseau MBM-429, modes transverse et longitudinal

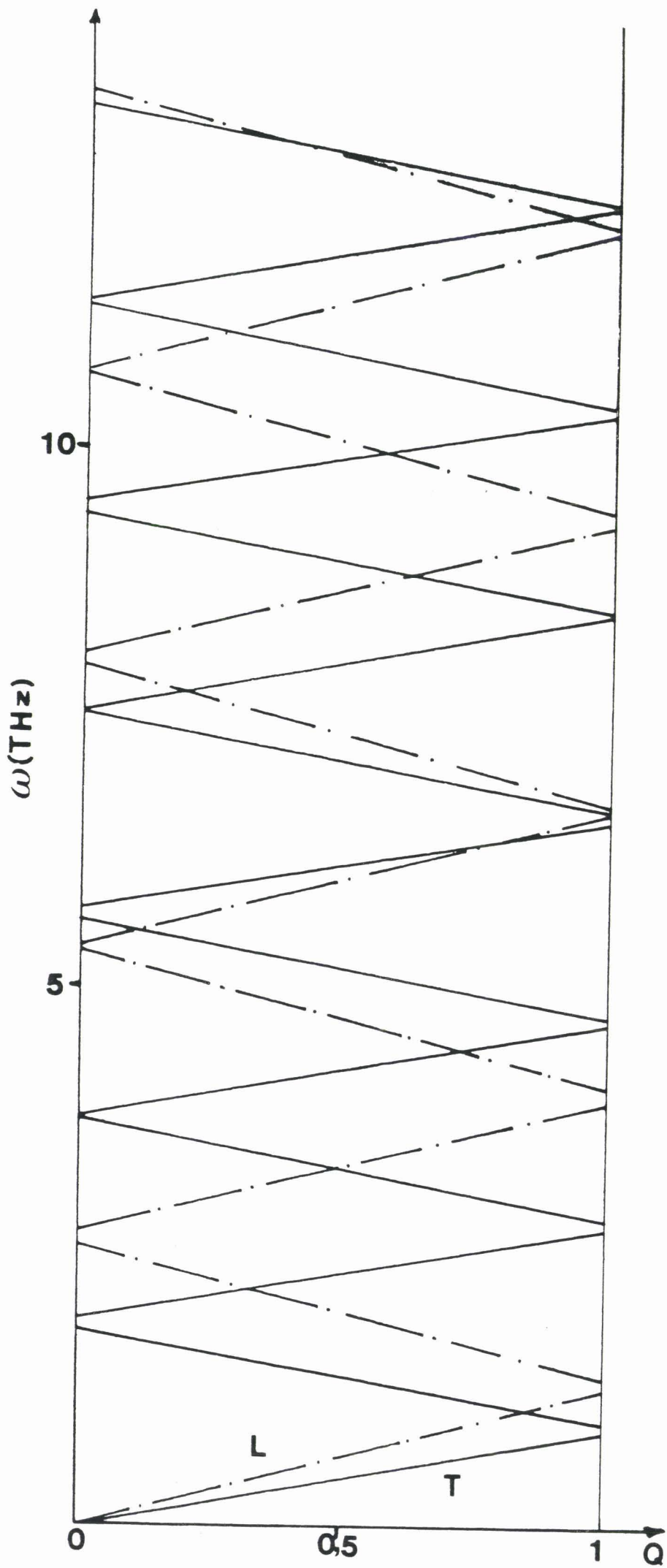


Figure IV.9.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau MBM-444, modes transverse et longitudinal

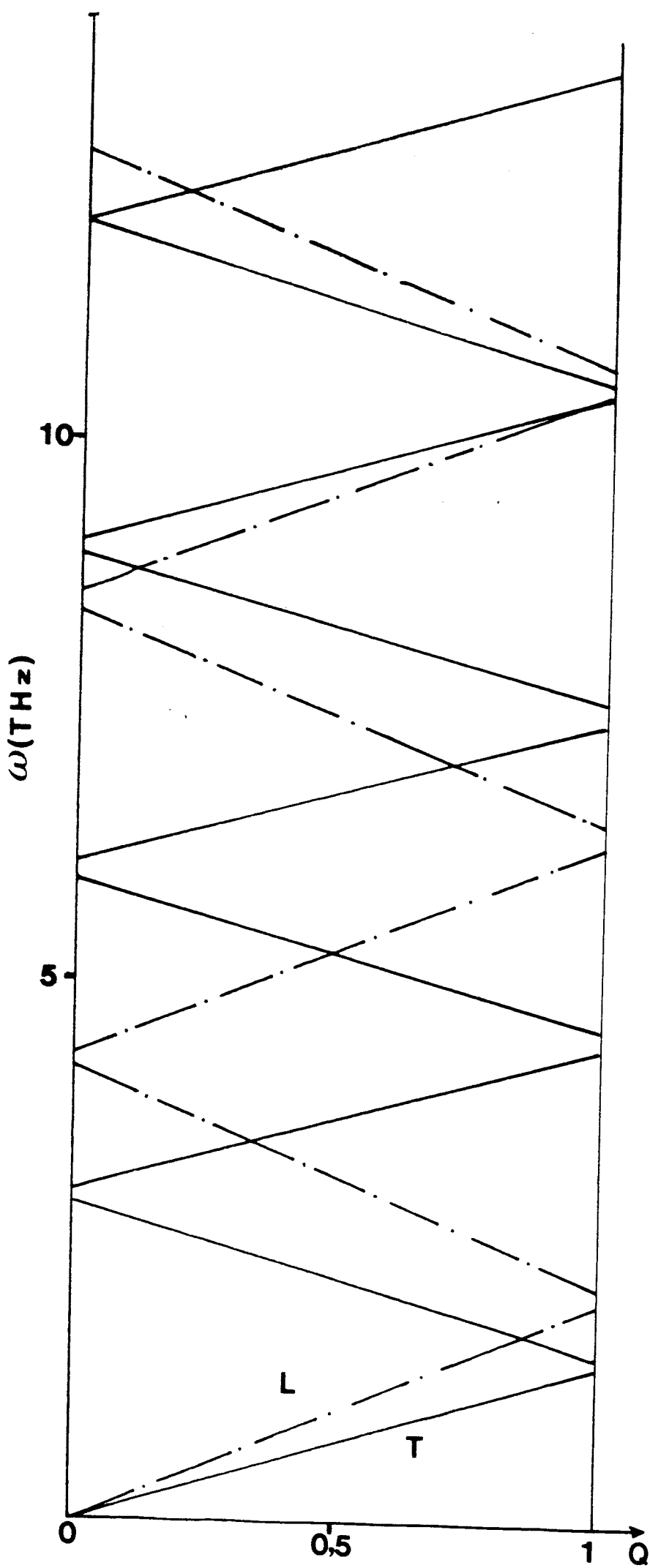


Figure IV.10.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau MBM-451, modes transverse et longitudinal

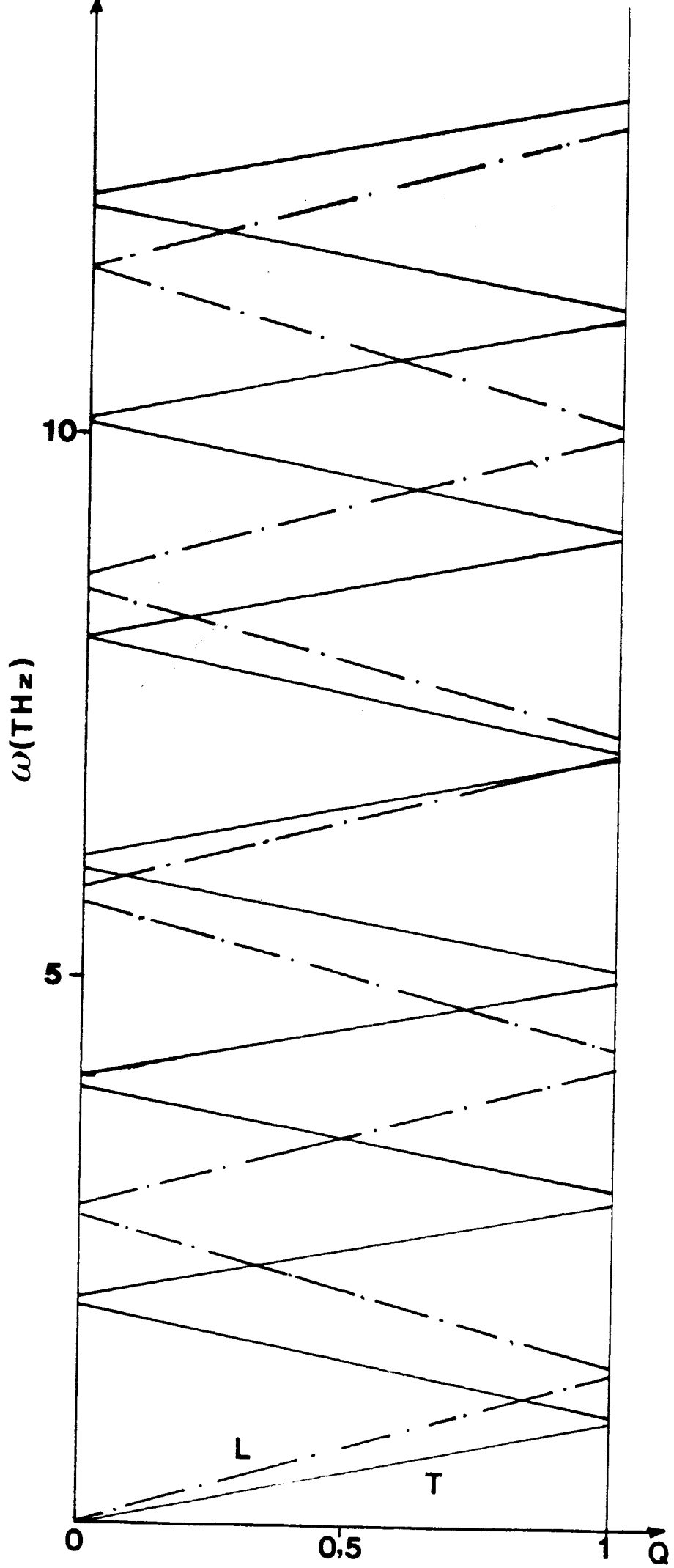
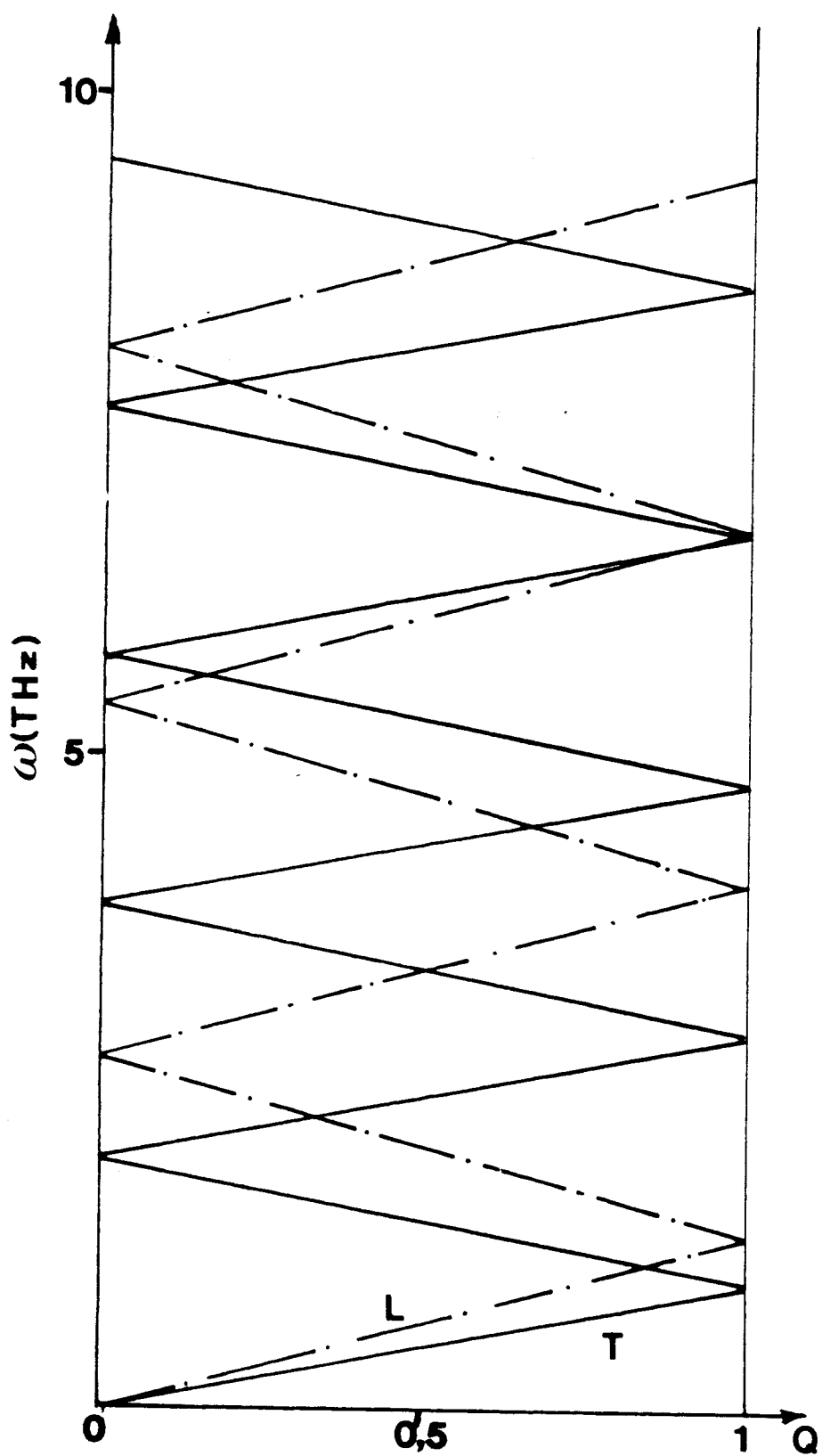


Figure IV.11.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau MBMB-180, modes transverses et longitudinal



L'équation (20) donne :

$$K_g = K_i + K_r \quad (21)$$

Généralement la fréquence du phonon ω_p est beaucoup plus faible que les fréquences de la radiation incidente ω_i et diffusée ω_r , ce qui permet de faire l'approximation $K_i \approx K_r$. Donc

$$K_g = 2 K_i \quad (22)$$

Et K_i est donné par :

$$K_i = \frac{2 \pi N(\lambda)}{\lambda} \quad (23)$$

donc

$$K_g \approx 4\pi \frac{N(\lambda)}{\lambda} \quad (24)$$

où $N(\lambda)$ est l'indice de réfraction effectif du superréseau.

Dans les publications [23, 24], et pour le cas des superréseaux à 2-couches, $N(\lambda)$ est calculé par:

$$N^2 = \frac{1}{a_u} \left[d_1 n_1^2 + d_2 n_2^2 \right] \quad (25)$$

La justification de cette relation est faite dans l'hypothèse d'une longueur d'onde $\lambda \gg a_u$, pour laquelle le milieu peut se

considérer homogène. Comme nous avons travaillé dans cette hypothèse, nous avons étendu l'équation (25) pour généraliser

$$N^2 = \frac{1}{a_u} \sum_i d_i n_i^2(\lambda) \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (26)$$

Ce qui permet d'écrire :

$$K_g = \frac{4\pi}{\lambda} \left[\frac{1}{a_u} \sum_i d_i n_i^2(\lambda) \right]^{1/2} \quad (27)$$

et

$$Q = 4 \left[a_u \sum_i d_i \frac{n_i^2(\lambda)}{\lambda^2} \right]^{1/2} \quad (28)$$

tous les paramètres y étant connus, il est possible de trouver la valeur Q pour chaque λ et chaque échantillon.

Ces valeurs sont montrées dans le Tableau IX

TABLEAU IX
VECTEUR D'ONDE REDUIT
Q

ECHANTILLON	Q ($\lambda = 4579 \text{ \AA}$)	Q ($\lambda = 4765 \text{ \AA}$)
MBE-429	0,445	--
MBE-444	0,284	--
MBE-451	--	0,388
BMBE-180	0,450	--

Une fois connu Q , on tire sur les graphiques théoriques (Fig. IV.8, IV.9, IV.10, IV.11) une ligne verticale pour chaque valeur de Q correspondante; l'intersection de cette ligne et des courbes théoriques donne les valeurs théoriques à comparer avec les valeurs expérimentales, ce que nous montrons sur les Fig. 12a,b; 13a,b; 14a,b; 15a,b.

L'assignation des pics Raman aux modes de vibration, montrés dans les Tableaux X, XI, XII, et XIII, a été faite en tenant compte des intensités relatives (Tableaux IV,V,VI,VII) et de la géométrie expérimentale utilisée, permettant, en principe, seulement l'excitation des modes longitudinaux.

Figure IV.12a.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau MBM-429, mode LONGITUDINAL. Les points représentent les résultats expérimentaux

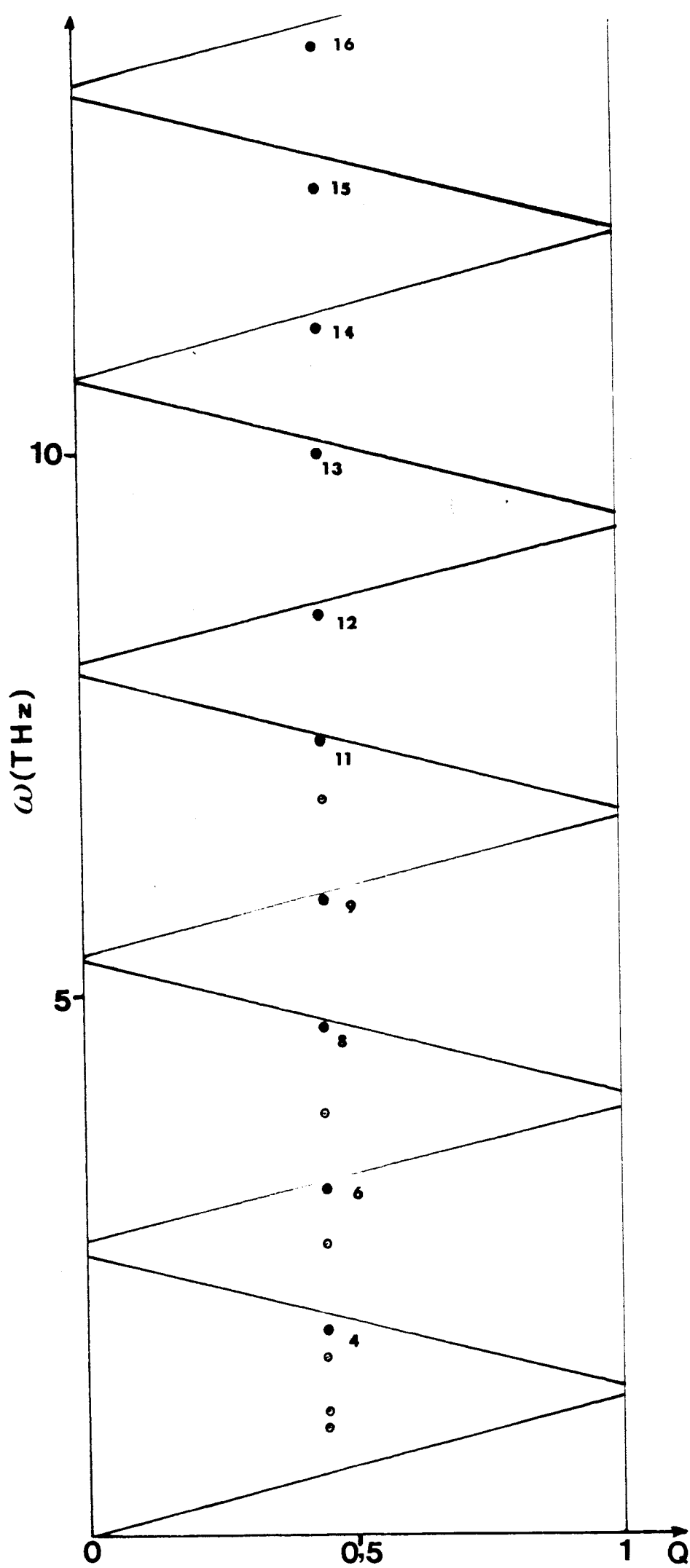


Figure IV.12b. - Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau MBM-429, mode TRANSVERSE. Les points représentent les résultats expérimentaux

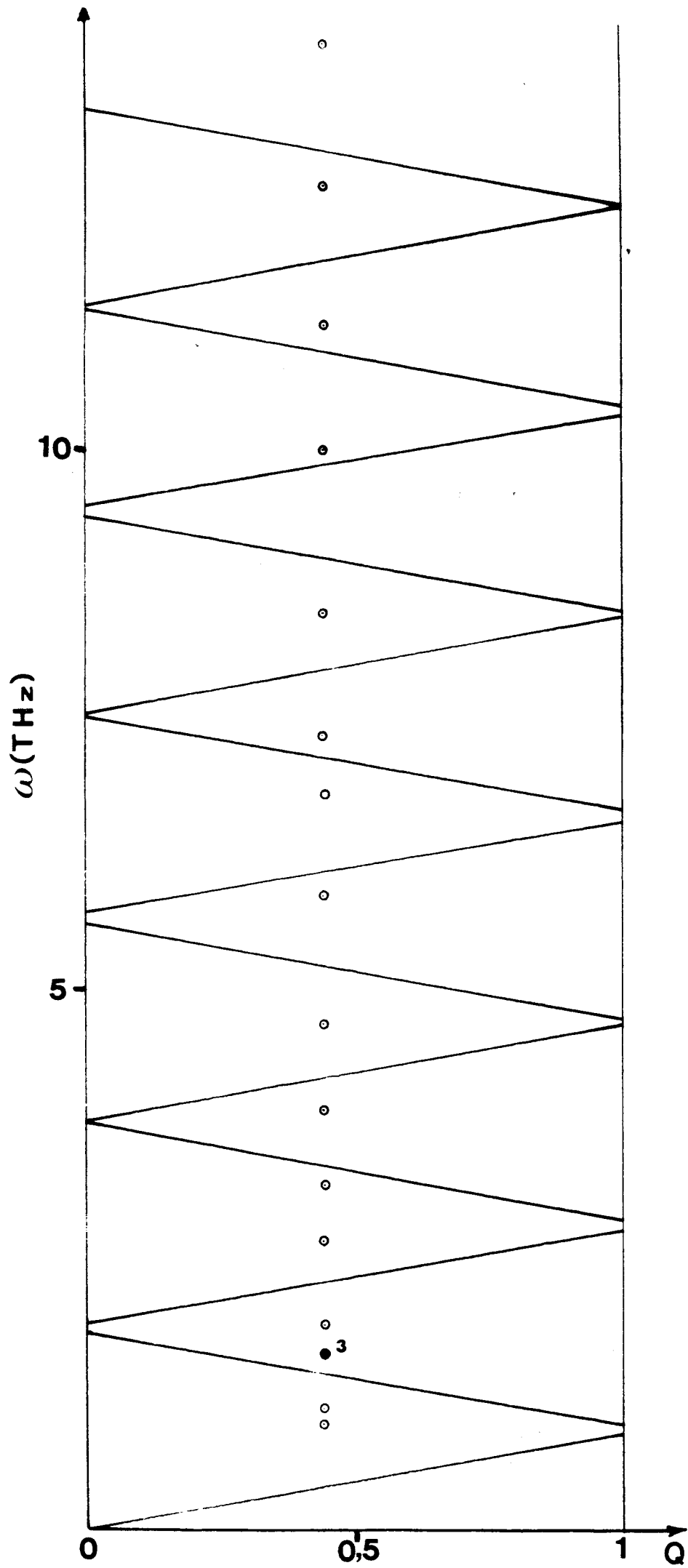


Figure IV.13a.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau MBM-444, mode LONGITUDINAL. Les points représentent les résultats expérimentaux

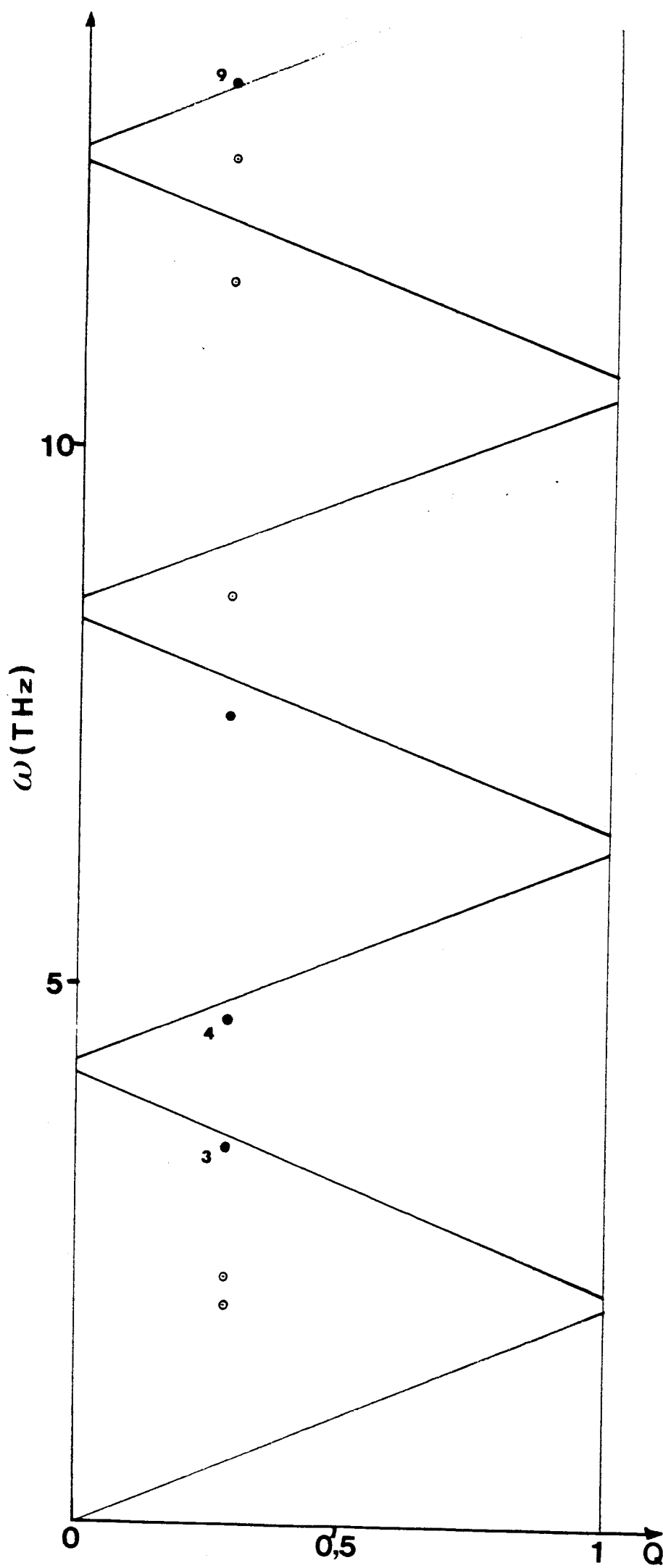


Figure IV.13b.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau MBM-444, mode TRANSVERSE. Les points représentent les résultats expérimentaux

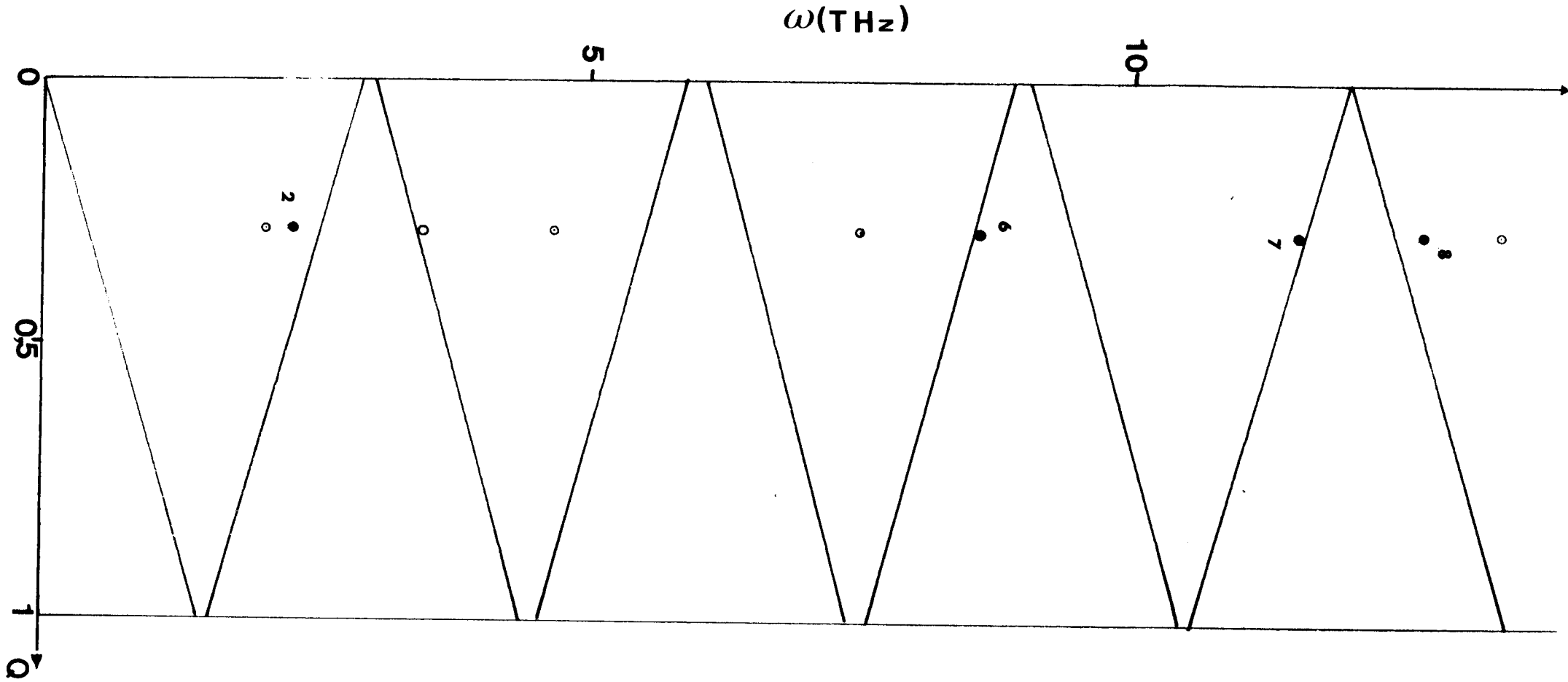


Figure IV.14a.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau MBM-451, mode LONGITUDINAL. Les points représentent les résultats expérimentaux

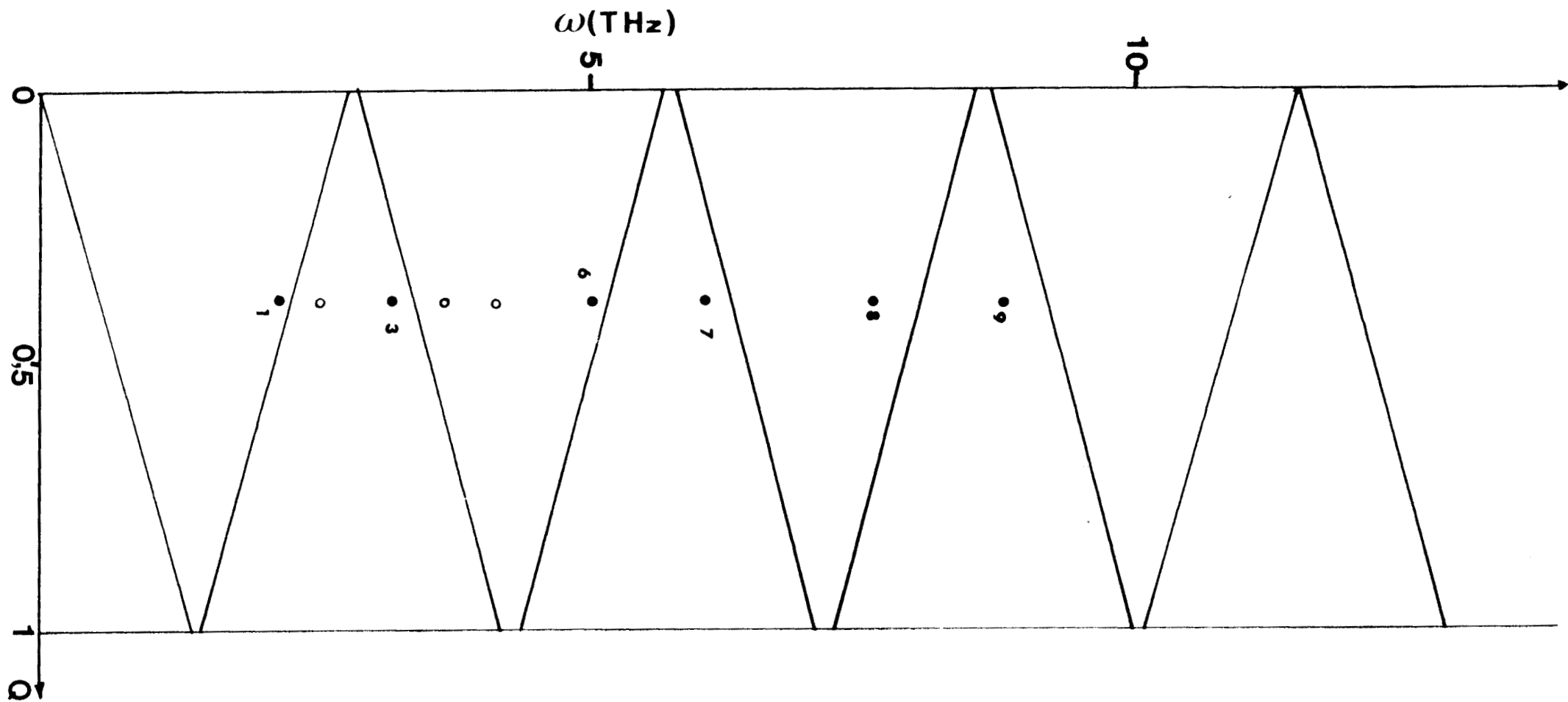


Figure IV.14b.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau MBM-451, mode TRANSVERSE. Les points représentent les résultats expérimentaux

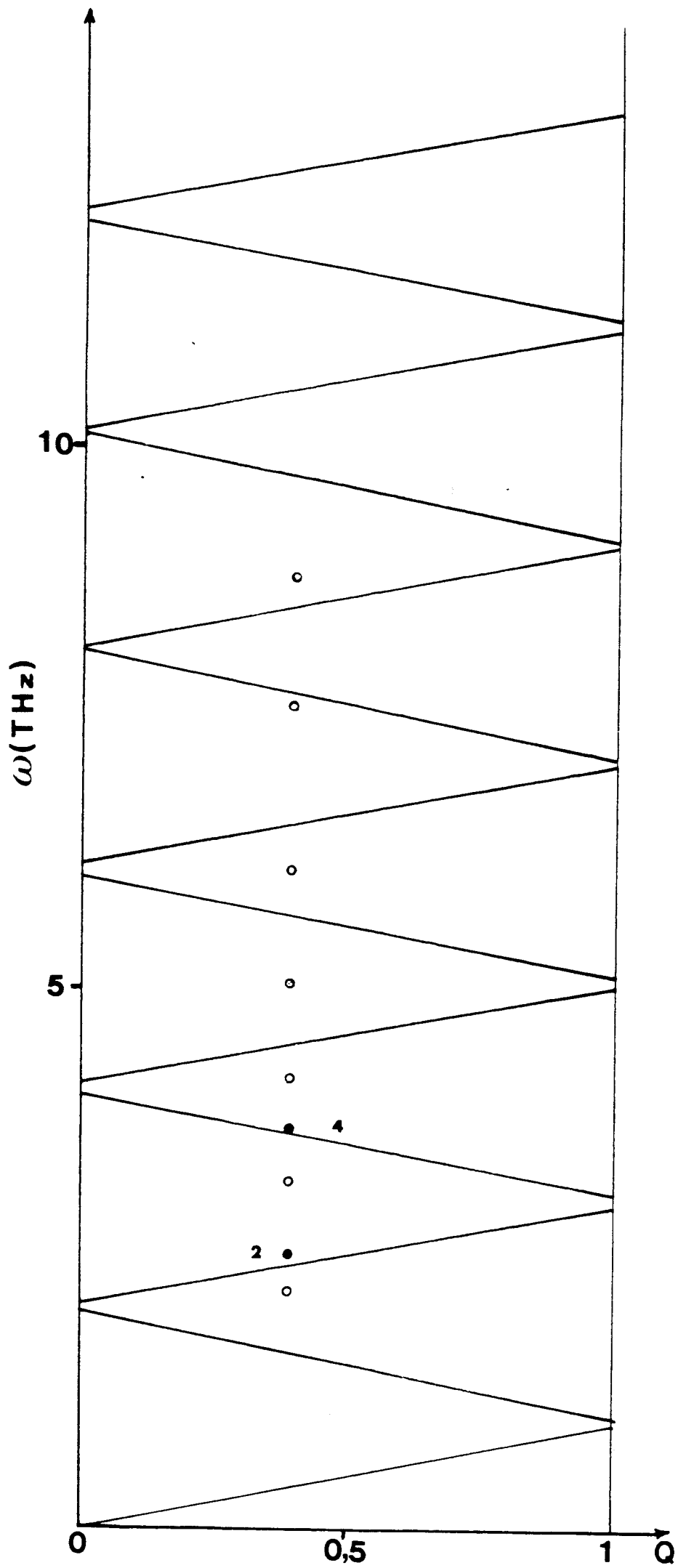


Figure IV.15a.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau BMBM-180, mode LONGITUDINAL. Les points représentent les résultats expérimentaux

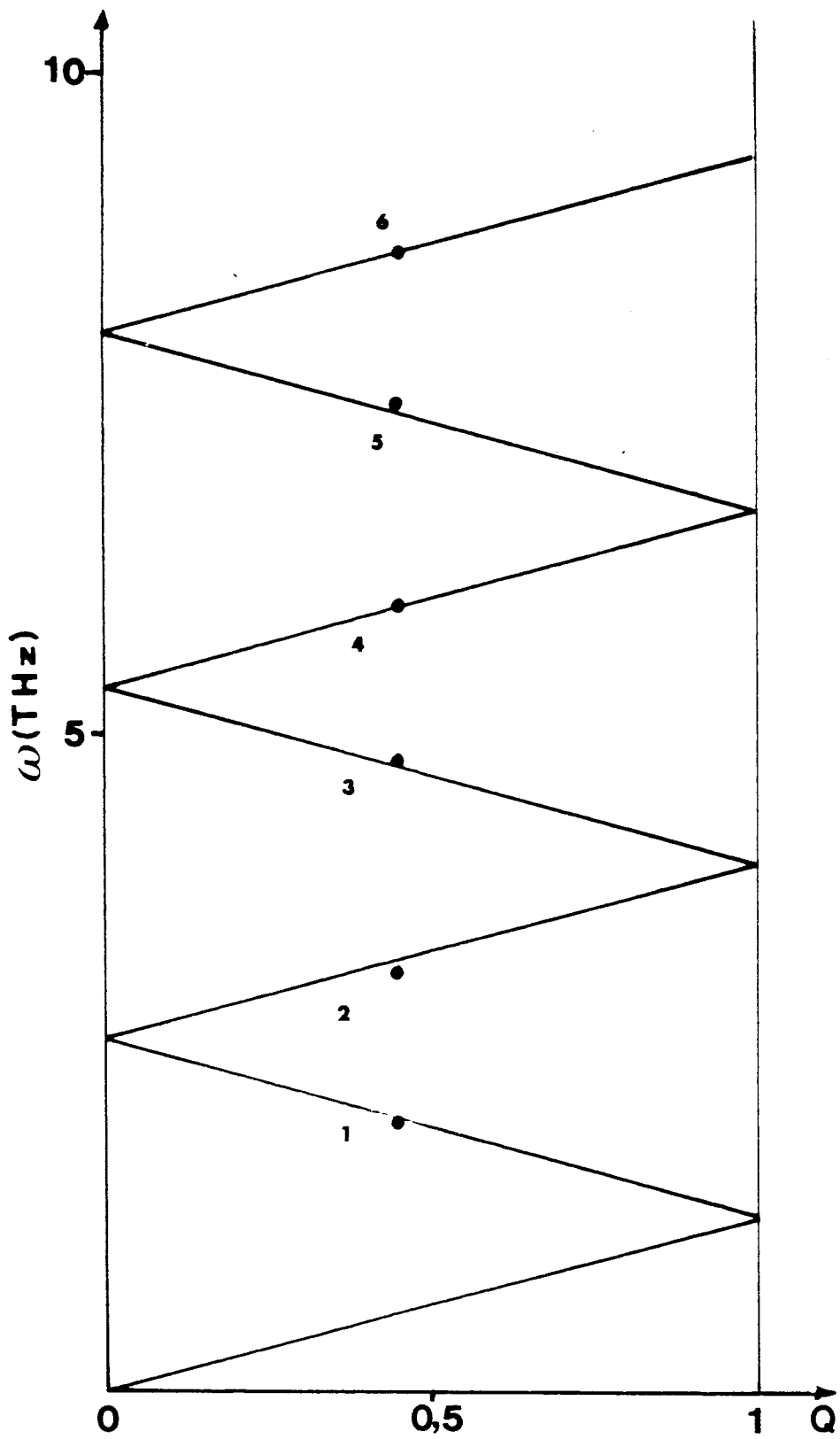


Figure IV.15b.-Le graphique de la relation de dispersion pour le superréseau BMBM-180, mode TRANSVERSE. Les points représentent les résultats expérimentaux

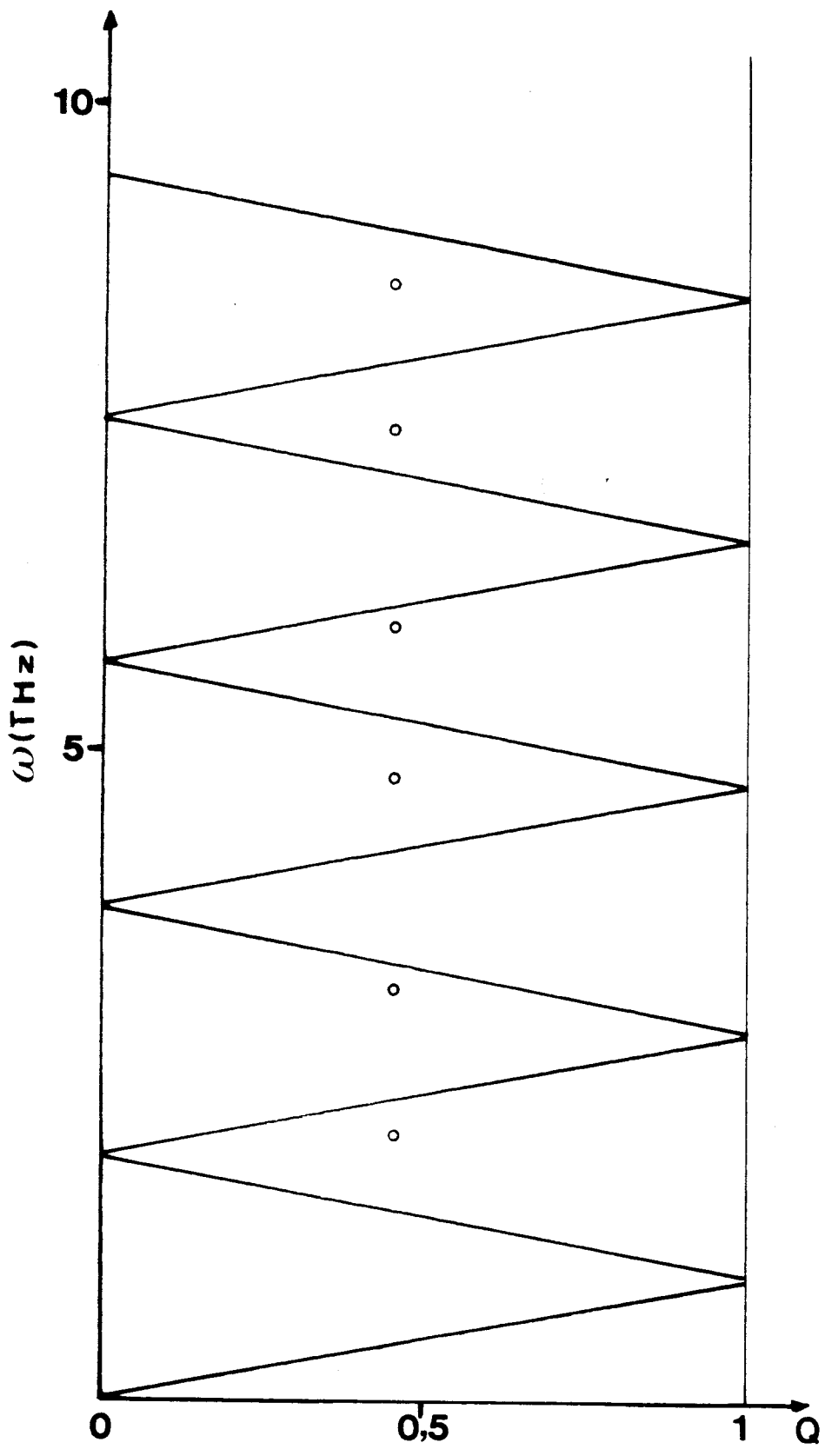


TABLEAU X
 MODES ACOUSTIQUES -ECHANTILLON
 MBE - 429

No Pics	THEORIE		EXPERIENCE		ASSIGNATION
	ω (cm ⁻¹)	ω (s ⁻¹)	ω (cm ⁻¹)	ω (s ⁻¹)	(FLA) _m /(FTA) _m
1	-	-	5,4 ± 0,5	1,02 x 10 ¹²	DAFLA
2	-	-	6,1 ± 0,5	1,15 x 10 ¹²	"
3	7,69	1,45 x 10 ¹²	8,8 ± 0,5	1,66 x 10 ¹²	FTA -1
4	10,88	2,05 x 10 ¹²	10,6 ± 0,5	1,89 x 10 ¹²	FLA -1
5	-	-	14,3 ± 0,5	2,70 x 10 ¹²	DAFLA
6	17,24	3,25 x 10 ¹²	16,8 ± 0,5	3,17 x 10 ¹²	FLA +1
7	-	-	20,7 ± 0,5	3,90 x 10 ¹²	DAFLA
8	25,20	4,75 x 10 ¹²	24,8 ± 0,5	4,66 x 10 ¹²	FLA -2
9	31,57	5,95 x 10 ¹²	30,9 ± 0,5	5,83 x 10 ¹²	FLA +2
10	-	-	36,2 ± 0,5	6,82 x 10 ¹²	DAFLA
11	39,26	7,40 x 10 ¹²	39,0 ± 0,5	7,35 x 10 ¹²	FLA -3
12	45,62	8,60 x 10 ¹²	45,0 ± 0,5	8,48 x 10 ¹²	FLA +3
13	53,60	10,10 x 10 ¹²	52,9 ± 0,5	9,47 x 10 ¹²	FLA -4
14	59,95	11,30 x 10 ¹²	59,0 ± 0,5	11,12 x 10 ¹²	FLA +4
15	67,64	12,75 x 10 ¹²	66,0 ± 0,5	12,44 x 10 ¹²	FLA -5
16	74,00	13,95 x 10 ¹²	73,0 ± 0,5	13,76 x 10 ¹²	FLA +5

$$0,5 \text{ cm}^{-1} \cong 0,1 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

TABLEAU XI
 MODES ACOUSTIQUES -ECHANTILLON
 MBE - 444

No Pics	THEORIE		EXPERIENCE		ASIGNATION
	ω (cm ⁻¹)	ω (s ⁻¹)	ω (cm ⁻¹)	ω (s ⁻¹)	(FLA) _m /(FTA) _m
1	-	-	10,7± 0,5	2,02 x10 ¹²	DAFLA
2	13,53	2,55 x10 ¹²	12,3± 0,5	2,32 x10 ¹²	FTA -1
3	19,10	3,60 x10 ¹²	18,5± 0,5	3,45 x10 ¹²	FLA -1
4	25,73	4,85 x10 ¹²	24,6± 0,5	4,64 x10 ¹²	FLA +1
5	41,34	7,85 x10 ¹²	39,9± 0,5	7,52 x10 ¹²	FLA -2
6	45,36	8,55 x10 ¹²	45,7± 0,5	8,61 x10 ¹²	FTA -3
7	61,53	11,60x10 ¹²	61,2± 0,5	11,54x10 ¹²	FTA -4
8	66,05	12,45x10 ¹²	67,3± 0,5	12,67x10 ¹²	FTA +4
9	70,82	13,35x10 ¹²	71,5± 0,5	13,38x10 ¹²	FLA +3
10	81,70	15,40x10 ¹²	83,0± 0,5	15,65x10 ¹²	FTA +5

TABLEAU XII
 MODES ACOUSTIQUES -ECHANTILLON
 MBE - 451

No Pics	THEORIE		EXPERIENCE		ASSIGNATION
	ω (cm ⁻¹)	ω (s ⁻¹)	ω (cm ⁻¹)	ω (s ⁻¹)	(FLA) _m /(FTA) _m
1	11,67	2,20 x10 ¹²	11,7± 0,5	2,21 x10 ¹²	FLA -1
2	12,99	2,45 x10 ¹²	13,4± 0,5	2,54 x10 ¹²	FTA +1
3	18,04	3,40 x10 ¹²	17,1± 0,5	3,22 x10 ¹²	FLA +1
4	19,36	3,65 x10 ¹²	-	-	FTA -2
5	23,61	4,45 x10 ¹²	22,0± 0,5	4,15 x10 ¹²	FTA +2
6	27,58	5,20 x10 ¹²	26,6± 0,5	5,02 x10 ¹²	FLA -2
7	33,42	6,30 x10 ¹²	32,0± 0,5	6,03 x10 ¹²	FLA +2
8	42,71	8,05 x10 ¹²	40,5± 0,5	7,63 x10 ¹²	FLA -3
9	48,81	9,20 x10 ¹²	46,6± 0,5	8,78 x10 ¹²	FLA +3
10					

TABLEAU XIII
MODES ACOUSTIQUES -ECHANTILLON
BMBE - 180

No Pics	THEORIE		EXPERIENCE		ASSIGNATION
	ω (cm ⁻¹)	ω (s ⁻¹)	ω (cm ⁻¹)	ω (s ⁻¹)	(FLA) _m /(FTA) _m
1	10,87	2,05 x10 ¹²	10,9± 0,5	2,06 x10 ¹²	FLA -1
2	17,50	3,30 x10 ¹²	18,8± 0,5	3,17 x10 ¹²	FLA +1
3	25,20	4,75 x10 ¹²	25,3± 0,5	4,77 x10 ¹²	FLA -2
4	31,57	5,95 x10 ¹²	31,6± 0,5	5,96 x10 ¹²	FLA +2
5	39,52	7,45 x10 ¹²	39,9± 0,5	7,53 x10 ¹²	FLA -3
6	45,88	8,65 x10 ¹²	45,8± 0,5	8,64 x10 ¹²	FLA +3

IV.5. - DISCUSSION

L'analyse des graphiques et des tableaux montre que pour le cas du superréseau à 4-couches (Tableaux XIII) la concordance de la théorie et des résultats expérimentaux est excellente. Tous les pics Raman ont une assignation $(FLA)_m$, avec $m = \pm 1 \pm 2 \pm 3$ en parfait accord avec la géométrie employée et les valeurs théoriques et expérimentales coïncident plutôt bien.

Le tableau X, correspondant aux résultats de l'échantillon MBE-429 (superréseau à 3-couches) montre une assignation plus complexe. Les pics identifiés par les numéros 4, 6, 8, 9, 11, 12, 13, 14, 15 et 16 ont été assignés à $(FLA)_m$ puisque ces valeurs théoriques coïncident le mieux avec les valeurs expérimentales et parmi elles se trouvent les plus intenses, comme on peut s'y attendre, compte tenu de la géométrie expérimentale. Le pic 3, de très faible intensité, a été assigné à $(FTA)_m$ vu que cette valeur coïncide le mieux avec la valeur expérimentale.

Les pics numérotés 1, 2, 5, 7 et 10 ne sont pas expliqués par la théorie. Dans les publications [17] on parle des modes associés au désordre dans le superréseau (DAFLA, DAFTA); ces pics se caractérisent par leur largeur et leur faible intensité. Ces considérations nous ont conduit à l'assignation donnée.

Les mêmes types de considérations nous ont permis d'effectuer les assignations des tableaux XI et XII. Cependant, pour ces échantillons les assignations effectuées conduisent à des résultats, normalement, non attendus. Ainsi, par exemple, dans l'échantillon MBE-451, les fréquences des pics 8 et 9, s'écartent des valeurs théoriques, manifestant un comportement non observé dans les échantillons antérieurs (BME-429 et MBME-180). De la même façon, dans l'échantillon MBE-444, nous avons assigné à certains pics, un modes transverse, qui, en principe, ne devraient pas apparaître dans une géométrie de rétrodiffusion.

Ces comportements peuvent être dûs à une qualité moins bonne de ces échantillons, ce qui aurait des conséquences sur les paramètres les caractérisant (constantes élastiques, vitesse du son, périodicité, etc.) , et / ou à une géométrie expérimentale de rétrodiffusion pas très bien réussite.

Dans l'ensemble ,la théorie et l'expérience nous conduisent à des résultats raisonnablements satisfaisantes.

CONCLUSION

CONCLUSION

Le travail effectué nous permet d'arriver aux conclusions suivantes:

PRIMO.- La méthode proposée par la Théorie Générale de Réponse des Interfaces ,appliquée à des modèles simples de superréseaux, met en évidence sa versatilité pour l'étude de matériaux composites. Le développement actuel de l'analyse numérique et la capacité de travail des ordinateurs modernes permettront d'étudier des modèles plus complexes.

SECUNDO.- Les expressions analytiques des relations de dispersion pour les phonons ,dans les cas discret et continu, dans les superréseaux à 3 et 4-couches , ont été obtenues pour la première fois en appliquant cette méthode. La structure de bandes montrée par les relations de dispersion, est la conséquence directe de la périodicité de ce type particulier de matériau composite.

TERTIO.- La comparaison des résultats théoriques obtenus,pour les relations de dispersion pour les phonons,dans le cas continu, et les résultats expérimentaux de phonons acoustiques obtenus par spectroscopie Raman ,et particulièrement celles du superréseau à 4-couches, montre que ,quoique le modèle proposé est simple,on trouve une corrélation raisonnablement satisfaisante entre la théorie et l'expérience.

QUATRIEME.- L'accord entre la théorie et l'expérience permet aussi de voir que l'hypothèse du milieu effectif, employée pour déduire l'équation 25 (chapitre IV),et la généralisation pour le calcul de l'indice de réfraction du superréseau à 3 et 4-couches (eq. 26),est raisonnablement adéquate.

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

[01].Principles of Optics.

Max Born & Emil Wolf.

Pergamon Press.

1975

[02].Quantum Electronics

Annon Yariv

Pergamon Press.

1978.

L. Hayashi, M. B. Panish, F. K. Rinehart

J. Appl. Phys. 42, (1929), 1971

[03].Théorie de L'Elasticité

Landau et Lifchitz

Edition de Moscou

Tome VII

1967

[04].Vectores y Tensores

Luis A. Santalo

Editorial EUDEBA

1977

[05].Mecanica II

Medios Continuos

Maurice Roy

Editorial Macombo

1970

[06].Introducción a la Física del Estado Sólido.

Charles Kittel

Editorial Reverte.

1976.

[07].Solid States Physics

Ashcroft & Mermin

Saunders College

1976.

[08].Teoría de Sólidos

A.S.Davidov

Editorial MIR

1981

[09].Ondas.

Frank S. Crawford, Jr.

Editorial Reverte.

1968.

[10].Quantum Electrodynamics

Dietrich Marcuse

Harcourt, Brace & World Inc.

1970.

[11].L. Dobrzynski.

Surface Sci. Rep. 6, 119, (1986).

[12].L. Dobrzynski.

Surface Sci. 180, 486, (1987).

L. Dobrzynski.

Surface Sci. 175, 1, (1986).

[13].L.Dobrzynski, J.Mendialdua, A.Rodríguez , S.Bolibo & M.More.

Journal de Physique. 50, 2563, (1989)

[14]. Voir pour exemple:

A.S. Barker Jr., J.L. Merz & A.C. Cossard.

Physical Rev. B 17, 3181, (1978).

J. Sapriel, J.C. Michel, R. Vacher & J. Tolédano.

Physical Rev. B 28, 2007, (1983).

H. Brugger, G. Abstreiter, H. Jorke, H. J. Herzog & E. Kasper.

Physical Rev. B 33, 5928, (1986).

[15]. S.M. Ritov

Sov. Phy. Acoustics. 2, 68, (1956).

[16]. Sung-Kit Yip & Yian-Chang.

Physical Rev. B 30, 7037, (1984).

[17]. C. Colvard et al.

Physical Rev. B 31, 2080, (1985).

J. Sapriel, J. Chavignon, F. Alexandre and R. Azoulay.

Physical Rev. B, 34, 7118, (1986).

[18]. S. Tamura & J.P. Wolfe.

Physical Rev. B 38, 5610, (1988-I).

[19]. Jianjun He, Bahram Djafari-Rouhani & Jacques Sapriel.

Physical Rev. B 37, 4086, (1988-I).

[20]. J.A. Lockwood.

Private communication.

[21]. J. A. Lockwood, M. W. C. Dharma-Wardana, J. M. Baribeau &
D. C. Houghton.

Physical Rev. B 35, 2243, (1987).

[22]. D. E. Aspnes & A. A. Studna.

Physical Rev. B 27, 985, (1983).

[23]. J. Sapriel, J. He, B. Djafari-Rouhani, R. Azoulay & F. Mollot.

Physical Rev. B 37, 4099, (1988-I).

J. Sapriel & B. Djafari-Rouhani.

Surface Sci. Rep. 10, 180, (1989).

[24]. B. Djafari-Rouhani & J. Sapriel.

Physical Rev. B, 34, 7114, (1986).



RESUME

L'objectif fondamental de ce travail est l'étude théorique des propriétés vibrationnelles dans les matériaux composites du type superréseau à N-couches, en utilisant la Théorie Générale de Réponse des Interfaces.

La théorie est appliquée à deux modèles de superréseaux à N-couches: un pour les milieux discrets et un autre pour les milieux continus, c'est à dire, pour les milieux dans lesquels la longueur d'onde λ de la perturbation est de l'ordre ou plus grande que la distance interatomique. On obtient des résultats analytiques pour les relations de dispersion des phonons dans les superréseaux et l'on met en évidence la structure de bandes caractéristique de leur périodicité.

Pour le cas continu, on définit une Zone Réduite de Brillouin (ZRB), et l'on compare les résultats théoriques avec les résultats expérimentaux des phonons acoustiques dans les superréseaux à 3 et 4-couches, obtenus par spectroscopie Raman. Une correspondance satisfaisante est trouvée entre la théorie et l'expérience.

MOTS - CLES.

Superréseaux.

Composite.

Interface.

Ga, Al, As.

Phonons.

Ondes Elastique.

Function Réponse.

Spectroscopie Raman.