

N° D'ORDRE : 518

50376  
1990  
81

70506

50376  
1990  
81

# THESE

*présentée à*

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES  
DE LILLE FLANDRES-ARTOIS

*pour obtenir le grade de*

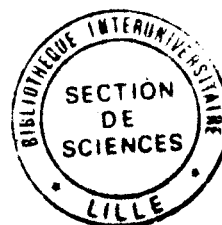
DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

*en*

SCIENCES DES MATERIAUX

*par*

**Boubacar SYLLA**



## PHONONS DANS LES SYSTEMES COMPOSITES

*soutenu le 02 Juillet 1990 devant la Commission d'Examen*

J. LEFEBVRE

M. MORE

J. MENDIALDUA,

J.L. FARVACQUE

P. DEYMIER,

B. DJAFARI-ROUHANI,

L. DOBRZYNSKI

Professeur, Université de Lille I

Professeur, Université de Lille I

Professeur, Université de Mérida, VENEZUELA

Professeur, Université de Lille I

Professeur, Université d'Arizona Tucson, USA.

Professeur, Université de Mulhouse

Directeur de Recherche au C.N.R.S.

Président

Rapporteur

Rapporteur

Examineur

Examineur

Examineur

Directeur de Thèse

*A mon père Mamadou  
A ma mère Fatoumata  
A Mariama Touré  
A mon épouse Fatoumata Diaby  
et nos filles  
Mariama Ciré Sylla  
et Fanta Sylla*

Ce document a été réalisé dans le Laboratoire de Dynamique et Structure des Matériaux Moléculaires (Unité Associée au Centre National de la Recherche Scientifique n° 801) de l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres Artois. Il s'inscrit dans le cadre de l'accord de coopération entre cette Université et l'Université de Conakry, République de Guinée.

J'exprime ici ma profonde reconnaissance à Monsieur H. FONTAINE, Professeur à l'Université de Lille 1, pour m'avoir accepté dans le laboratoire qu'il dirige.

Je dois ce travail à Monsieur L. DOBRZYNSKI, Directeur de Recherche au Centre National de la Recherche Scientifique (C.N.R.S.). Qu'il trouve ici l'expression de ma grande reconnaissance pour la patience et la disponibilité dont il a fait preuve et pour l'aide très efficace qu'il m'a apportée dans la conduite de mes travaux de Recherche.

Messieurs J. LEFEBVRE, M. MORE, J.-L. FARVAQUE, Professeurs à l'Université de Lille 1, ont accepté de faire partie du jury chargé d'examiner ce travail. Je les remercie.

Je suis très sensible à l'intérêt que Monsieur P. DEYMIER, Professeur à l'Université d'Arizona à Tucson (U.S.A.) et Monsieur J. MENDIALDUA, Professeur à l'Université de Merida (Venezuela) ont porté à ce travail en acceptant de le juger.

Je remercie également Monsieur P. ZIELINSKI, Directeur de Recherche à l'Institut de Physique Nucléaire de Krakow (Pologne), Monsieur A. AKJOUJ, Attaché Temporaire d'Enseignement et de Recherche à l'Université de Lille 1, ainsi que toute l'équipe de Dynamique des Interfaces pour leur bonne collaboration et l'aide qu'ils m'ont apportée.

Je pense aussi à Madame B. DUPONT qui a apporté le plus grand soin à la dactylographie de mon manuscrit. A travers elle, je remercie Madame C. PARSY, Mademoiselle M. BLOT et Monsieur S. FAUQUEMBERGUE pour leurs contributions à la réalisation matérielle de ce document.

Enfin, je remercie la Mission de Coopération et d'Action Culturelle de l'Ambassade de France à Conakry (Guinée) et l'Université de Conakry pour l'aide financière et le soutien moral qui m'ont permis de réaliser ce travail.

# **SOMMAIRE**

CHAPITRE 1 : Introduction.....	1
CHAPITRE 2 : Généralités sur les systèmes composites discrets .....	5
2-1. Géométrie d'un matériau composite formé par N matériaux différents .....	6
2-2. Fonction réponse d'un élément du matériau composite .....	7
2-3. Fonction réponse d'un système composite.....	11
2-4. Equation universelle de la théorie des réponses d'interface.....	13
2-5. Les vecteurs propres d'un système composite.....	15
CHAPITRE 3 : Fonctions réponses et vecteurs propres de quelques systèmes composites .....	18
3-1. Surface d'un cristal .....	20
3-1.1. Opérateur de clivage .....	20
3-1.2. Opérateur réponse de surface .....	21
3-1.3. Fonctions réponses .....	23
3-1.4. Vecteurs propres .....	24
3-2. lame mince cristalline .....	25
3-2.1. Opérateur réponse de surface .....	28
3-2.2. Fonction réponse.....	29
3-2.3. Vecteurs propres.....	31
3-3. Interface entre deux milieux semi-infinis .....	32
3-3.1. Opérateur réponse d'interface .....	32
3-3.2. Fonctions réponses .....	35
3-3.3. Vecteurs propres .....	37
3-4. Adsorption de L atomes au bout d'un cristal semi-infini .....	39
3-4.1. Opérateur réponse d'interface .....	40
3-4.2. Fonctions réponses .....	40
3-4.3. Vecteurs propres .....	44

3-5. Interface entre deux lames minces différentes .....	47
3-5.1. Opérateur réponse d'interface .....	48
3-5.2. Fonctions réponses .....	50
3-5.3. Vecteurs propres .....	53
3-6. Le système sandwich .....	56
3-6.1. Opérateur réponse d'interface .....	57
3-6.2. Fonctions réponses .....	58
3-6.3. Etats vibrationnels localisés .....	61
3-6.4. Vecteurs propres .....	68
3-7. Adsorption de deux lames minces cristallines sur un substrat..	70
3-7.1. Opérateur réponse d'interface .....	70
3-7.2. Etats vibrationnels localisés .....	73
CONCLUSION.....	78
ANNEXE .....	81
REFERENCES.....	87

# CHAPITRE 1

*introduction*

La physique des surfaces, bien que récente, a connu un développement important ces dernières années. Qu'il s'agisse en particulier de l'étude des propriétés vibrationnelles ou électroniques la littérature fournit des résultats très intéressants.

C'est dans ce cadre que plus récemment encore, une méthode très commode et générale a été mise au point par L. Dobrzynski : la théorie des réponses d'interface. Cette théorie s'applique surtout aux systèmes composites.

Un système composite est par définition formé de plusieurs parties homogènes reliées par des interfaces. Ce terme englobe tous les cas possibles, en particulier, en physique de la matière condensée : défauts, surfaces et interfaces de forme quelconque [1, 2].

L'une des propriétés les plus frappantes de tout système composite est l'absence, en son sein, de symétrie par translation. L'inexistence d'une symétrie par translation tient au fait que, contrairement au système infini, idéal, la périodicité du réseau cristallin n'existe pas suivant certaines directions. Par conséquent, l'approche classique des problèmes dynamiques à l'aide du concept d'espace réciproque échoue dans de tels systèmes.

La théorie des réponses d'interface [4, 5, 6] appliquée aux systèmes composites est basée sur la démarche suivante :

on divise le système infini en des sous systèmes que l'on définit. Ces sous-systèmes ont en général des propriétés physiques différentes.

On définit les interfaces (et les surfaces) séparant les régions des sous-systèmes.

On définit enfin la fonction de réponse  $\vec{G}_{oi}$  de chacun des sous systèmes ( $i = 1,2,3\dots$ ) et la fonction  $\vec{G}_s$  dont les éléments  $G_s(n,n')$  sont égaux à  $G_{oi}(n,n')$  si les indices  $n$  et  $n'$  correspondent à des sites atomiques tous deux situés dans la région d'espace occupée par le  $i$ ème sous système.



Les éléments  $G_s(n,n')$  correspondant à deux sites atomiques non situés dans le même sous système sont identiquement nuls par définition de la fonction réponse  $\overleftrightarrow{G}_s$  que nous appellerons fonction réponse de référence.

Cette démarche étant effectuée, on peut alors associer à un système composite donné une fonction réponse  $\overleftrightarrow{g}$  liée à la fonction de référence  $\overleftrightarrow{G}_s$  par l'équation universelle de la théorie des réponses d'interface [1, 2, 4, 5, 6].

Il est connu que les sciences utilisent tantôt un langage mathématique discret, tantôt continu, tantôt mixte. Par ces trois termes nous entendons respectivement que les variables d'espace utilisées sont discrètes, continues ou mixtes (discrètes et continues). Elles sont par exemple discrètes dans une équation matricielle et continues dans une équation différentielle ou intégrale.

Etant donné le cadre de notre étude (Phonons dans les systèmes composites) nous n'utiliserons que le langage discret. Dans le chapitre 2, nous présentons une généralité sur les systèmes composites discrets. Il contient les résultats fondamentaux dont l'application permet d'étudier n'importe quel système composite.

Le chapitre 3 peut être subdivisé en deux parties.

La première partie est un rappel de quelques résultats obtenus précédemment pour la surface paragraphe (3-1), la lame mince (3-2), l'interface (3-3) et (3-5) et l'adsorption (3-4). Notons toutefois que cette partie contient en plus, des résultats originaux représentés par les vecteurs propres qui ne figurent pas dans les précédents travaux.

La deuxième partie de ce chapitre consacrée au système sandwich paragraphes (3-6) et à l'adsorption de deux lames minces cristallines sur un substrat paragraphe (3-7) constitue donc une partie de l'originalité de notre travail. Une application physique des résultats obtenus est donnée. Il s'agit du calcul des fréquences de vibration des phonons à l'intérieur d'une lame mince en sandwich entre deux autres cristaux semi-infinis d'une part et de deux lames minces déposées sur un substrat. Nous avons appelés ces nouveaux modes de vibration

respectivement les phonons de sandwich et les phonons dans deux lames minces adsorbées.

Enfin, une conclusion nous a permis non seulement de mettre en relief les résultats nouveaux auxquels nous avons abouti, mais également les perspectives qui s'ouvrent pour la poursuite des travaux.

# **CHAPITRE 2**

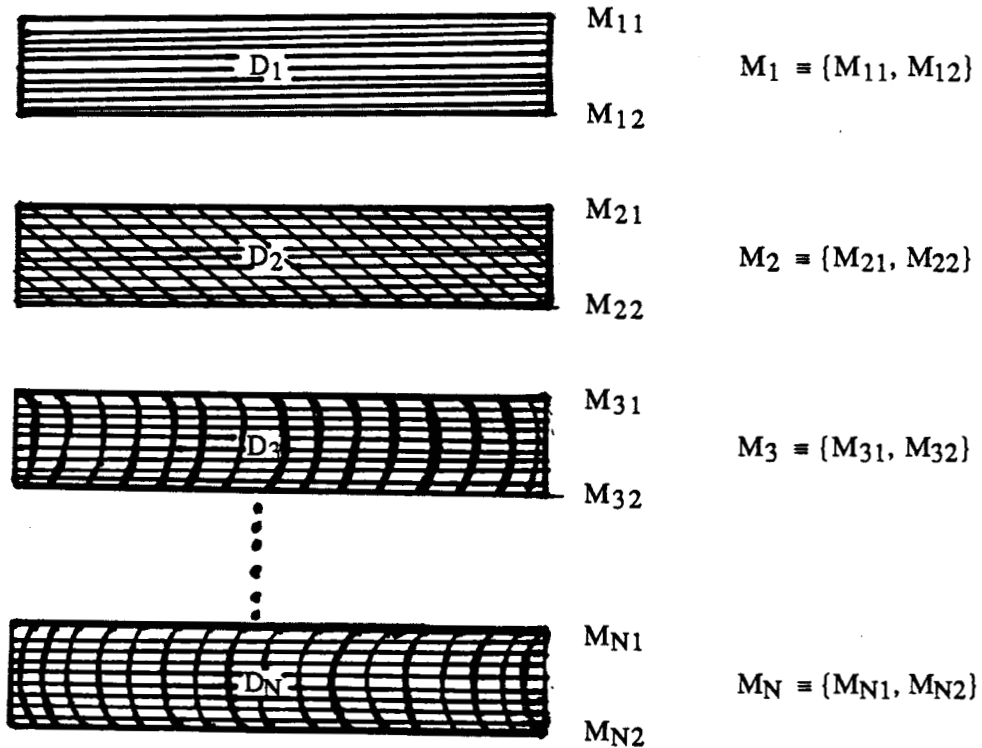
***Généralités sur les systèmes  
composites discrets***

2-1. GEOMETRIE D'UN MATERIAU COMPOSITE FORME PAR N MATE-  
RIAUX DIFFERENTS

Soit un système composite contenu dans l'espace  $D$  et formé de  $N$  sous-systèmes définis respectivement dans leurs espaces d'existence  $D_i, i \leq i \leq N$ .

Ces sous-systèmes sont assemblés par des domaines d'interface  $M_i \in D_i$ . Chaque sous-système  $i$  est en général en interaction avec  $J$  autres sous-systèmes. Ainsi, l'espace de l'interface  $M_i$  est en général composé de  $J$  sous-interfaces  $M_{ij}, 1 \leq j \leq J$ .

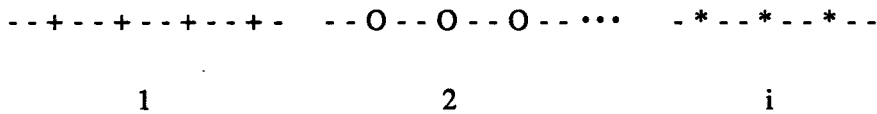
La géométrie d'un matériau composite peut par exemple être définie comme suit,



(Fig. 2-1) : Système composite formé par  $N$  sous-systèmes  
homogènes  $D_1, D_2, D_3 \dots D_N$

**2-2. FONCTION REPONSE D'UN ELEMENT DU MATERIAU COMPOSITE**

Rappelons que la première étape de la théorie des réponses d'interface consiste à trouver la fonction réponse d'un milieu infini correspondant à chaque partie du système composite. Par exemple, si l'on considère une chaîne d'atomes composée de  $i$  sous-chaînes différentes (voir fig. 2-2.a), il faudra déterminer les  $i$  fonctions réponses des chaînes infinies correspondant à chaque sous-chaîne. C'est ainsi que pour la sous-chaîne 2, il faudra déterminer la fonction réponse  $\vec{G}_{02}$  de la chaîne infinie composée des atomes de type 2 et que l'on peut représenter comme l'indique la fig. 2-2.b.



(Fig. 2-2.a) :  $i$  sous chaînes atomiques différentes.

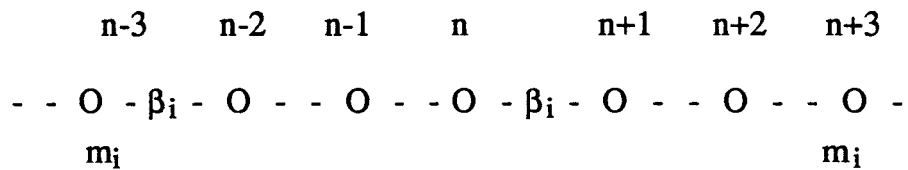


(Fig. 2-2.b) : Sous chaîne atomique composée d'atomes du type 2.

De cette façon nous aurons  $i$  fonctions réponses  $\vec{G}_{oi}$  dont le calcul passe par la détermination d'un opérateur (matriciel dans notre cas et différentiel dans le cas des systèmes continus [2]). Cet opérateur, noté  $\vec{H}_{oi}$  que l'on obtient à partir des relations d'équilibre permet de calculer la fonction réponse  $\vec{G}_{oi}$  par la relation,

$$\vec{H}_{oi} \cdot \vec{G}_{oi} = \vec{Y}, \quad \text{dans } D_{\infty} . \quad (2-2.1)$$

Par exemple, soit la chaîne infinie d'atomes de masse  $m_i$  dont les liaisons sont caractérisées par la constante de force  $\beta_i$ ,



(Fig. 2-3) : Chaîne linéaire atomique infinie

Si l'on appelle  $U_n$  le déplacement longitudinal de l'atome  $n$ , alors le déplacement de chaque atome le long de cette chaîne peut être caractérisé par un oscillateur harmonique. En ne considérant que les interactions entre les premiers voisins, l'équation régissant le déplacement de l'atome  $n$  peut s'écrire,

$$- m_i \omega^2 U_n = \beta_i (U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad (2-2.2)$$

où  $\omega$  est la fréquence de vibration des atomes le long de la chaîne.

Puisque nous considérons un oscillateur harmonique, le déplacement  $U_n$  peut s'écrire,

$$U_n = U_0 \exp \{ - i (\omega t - k n a) \} ,$$

D'où, 
$$m_i \ddot{U}_n = m_i \frac{\partial^2 U_n}{\partial t^2} = - m_i \omega^2 U_n .$$

L'équation (2-2.2) peut également s'écrire :

$$\frac{1}{m_i} \cdot (\beta_i U_{n+1} - \gamma_i U_n + \beta_i U_{n-1}) = 0 \quad (2-2.3)$$

avec

$$\gamma_i = -m_i \omega^2 + 2 \beta_i \quad (2-2.4)$$

En écrivant l'équation (2-2.3) pour chaque atome, on obtient les relations d'équilibre sous la forme matricielle suivante ,

$$\frac{1}{m_i} \begin{bmatrix} \beta_i & -\gamma_i & \beta_i & & & \\ & \beta_i & -\gamma_i & \beta_i & & \\ & & \beta_i & -\gamma_i & \beta_i & \\ & & & \beta_i & -\gamma_i & \beta_i \\ & & & & \beta_i & -\gamma_i \\ & & & & & \beta_i \end{bmatrix} \begin{matrix} n-1 \\ n \\ n+1 \end{matrix} \begin{bmatrix} U_{n-1} \\ U_n \\ U_{n+1} \end{bmatrix} = \vec{0} \quad .$$

Nous avons ainsi défini l'opérateur  $\hat{H}_{oi}$  par la relation

$$\hat{H}_{oi} \cdot \vec{U} = \vec{0} \quad (2-2.5)$$

Il reste à présent à déterminer la fonction réponse  $\hat{G}_{oi}$ . Pour cela, écrivons (2-2.1) comme suit :

$$\sum_{n''} H_{oi}(n, n'') \cdot G_{oi}(n'', n') = \delta_{nn'} \quad (2-2.6)$$

où  $\delta_{nn'}$  est le symbole de Kronecker. Les interactions se limitant aux premiers voisins,  $n''$  ne prend que les valeurs  $n-1$ ,  $n$  et  $n+1$ . L'équation (2-2.6) devient alors,

$$H_{oi}(n, n-1) \cdot G_{oi}(n-1, n') + H_{oi}(n, n) \cdot G_{oi}(n, n') + H_{oi}(n, n+1) \cdot G_{oi}(n+1, n') = \delta_{nn'}$$

soit en remplaçant les termes de  $H_{oi}$  par leur valeur,

$$\frac{1}{m_i} \{ \beta_i G_{oi}(n+1, n') - \gamma_i G_{oi}(n, n') + \beta_i G_{oi}(n-1, n') \} = \delta_{nn'} \quad (2-2.7)$$

La résolution de l'équation ci-dessus donne [2],

$$G_{oi}(n,n') = \frac{m_i}{\beta_i} \cdot \frac{t_i^{|n-n'|+1}}{t_i^2 - 1} \quad (2-2.8)$$

avec :

$$t_i = \begin{cases} \xi_i - (\xi_i^2 - 1)^{1/2} & ; \quad \xi_i > 1 \\ \xi_i + (\xi_i^2 - 1)^{1/2} & ; \quad \xi_i < -1 \\ \xi_i + i(1 - \xi_i^2)^{1/2} & ; \quad -1 < \xi_i < 1 \end{cases} \quad (2-2.9)$$

où l'on a posé,  $\xi_i = \frac{\gamma_i}{2\beta_i}$  . (2-2.10)

On peut se donner une idée précise sur le sens physique de la fonction réponse  $G_{oi}(n,n')$  en considérant que si l'on applique une force unité en  $n'$ ,  $G_{oi}(n,n')$  représente le déplacement résultant en  $n$ .

Analysons maintenant la nature des ondes  $t_i$  dans les domaines  $\xi_i > 1$ ,  $\xi_i < -1$ , et  $-1 < \xi_i < 1$  .

\* Pour  $\xi_i > 1$ ,  $\xi_i = \text{ch} q_i$   
 $t_i = e^{-q_i}$

$t_i$  est donc une onde décroissante dans le domaine  $\xi_i > 1$  .

\* Pour  $\xi_i < -1$ ,  $\xi_i = -\text{ch} q_i$ ,  
 $t_i = -e^{-q_i}$

$t_i$  est une onde décroissante dans le domaine  $\xi_i < -1$  .

\* Pour  $-1 < \xi_i < 1$ ,  $\xi_i = \cos k_i$ ,  
 $t_i = e^{q_i}$ , où  $q_i = ik_i$

$t_i$  est une onde progressive dans le domaine  $-1 < \xi_i < 1$  .

En conclusion, il apparaît que  $t_i$  est une onde plane progressive à l'intérieur de la bande de volume et décroissante à l'extérieur.



**2-3 FONCTION REPONSE D'UN SYSTEME COMPOSITE**

On coupe le système infini  $i$  en un ensemble de sous-systèmes grâce à un opérateur de clivage  $\overleftrightarrow{V}_{oi}$  qui découpe dans le système homogène infini, les sous-systèmes nécessaires pour la construction du système composite. On définit alors la fonction réponse  $\overleftrightarrow{g}_{oi}$  du système  $i$  par la relation,

$$\overleftrightarrow{h}_{oi} \cdot \overleftrightarrow{g}_{oi} = \overleftrightarrow{Y}, \quad \text{dans } D_{\infty} \quad (2-3.1)$$

avec  $\overleftrightarrow{h}_{oi} = \overleftrightarrow{H}_{oi} + \overleftrightarrow{V}_{oi}$  . (2-3.2)

A l'aide des équations (2-2.1), (2-3.1) et (2-3.2) il est possible de trouver l'équation de Dyson [2, 4, 5, 6] qui permet le calcul de  $\overleftrightarrow{g}_{oi}$ . En effet :

$$\overleftrightarrow{g}_{oi} \cdot \overleftrightarrow{h}_{oi} = \overleftrightarrow{Y}$$

$$\overleftrightarrow{g}_{oi} (\overleftrightarrow{H}_{oi} + \overleftrightarrow{V}_{oi}) = \overleftrightarrow{Y}$$

$$\overleftrightarrow{g}_{oi} (\overleftrightarrow{H}_{oi} \cdot \overleftrightarrow{G}_{oi} + \overleftrightarrow{V}_{oi} \cdot \overleftrightarrow{G}_{oi}) = \overleftrightarrow{G}_{oi}$$

soit :

$$\overleftrightarrow{g}_{oi} (\overleftrightarrow{Y} + \overleftrightarrow{A}_{oi}) = \overleftrightarrow{G}_{oi}, \quad \text{dans } D_{\infty} \quad (2-3.3)$$

où :  $\overleftrightarrow{A}_{oi} = \overleftrightarrow{V}_{oi} \cdot \overleftrightarrow{G}_{oi}$ , (2-3.4)

L'équation (2-3.3) est l'équation de Dyson.

L'opérateur  $\overleftrightarrow{h}_{oi}$  défini par l'équation (2-3.2) est formé de blocs indépendants, soit par exemple,

$$\overleftrightarrow{h}_{oi} = \begin{bmatrix} & & \overleftrightarrow{0} & & \overleftrightarrow{0} \\ & \overleftrightarrow{0} & & \overleftrightarrow{h}_{si} & \\ & & \overleftrightarrow{0} & & \overleftrightarrow{0} \\ & & & \overleftrightarrow{0} & \end{bmatrix}, \quad \text{dans } D_{\infty} .$$

Son inverse  $\overleftrightarrow{g}_{oi}$  est également formé de blocs indépendants, soit :

$$\overleftrightarrow{g}_{oi} = \begin{bmatrix} & \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} \\ \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{g}_{si} & \overleftrightarrow{0} \\ \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} & \end{bmatrix}, \text{ dans } D_{\infty} .$$

Les opérateurs  $\overleftrightarrow{A}_{si}$  et  $\overleftrightarrow{G}_{si}$  peuvent être définis à partir des opérateurs  $\overleftrightarrow{A}_{oi}$  et  $\overleftrightarrow{G}_{oi}$  par :

$$\overleftrightarrow{A}_{oi} = \begin{bmatrix} & \overleftrightarrow{A}_{si} \\ \overleftrightarrow{A}_{oi} & \overleftrightarrow{G}_{si} \end{bmatrix}, \text{ dans } D_{\infty} .$$

Avec les notations précédentes, l'équation (2-3.3) peut être représenté comme suit,

$$\begin{bmatrix} & \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} \\ \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{g}_{si} & \overleftrightarrow{0} \\ \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} & \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{si} \\ \overleftrightarrow{G}_{si} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overleftrightarrow{G}_{si} \end{bmatrix} .$$

$$\overleftrightarrow{g}_{oi} \cdot (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{oi}) = \overleftrightarrow{G}_{oi} .$$

Cette représentation montre que pour le bloc matriciel  $i$ , on a la relation :

$$\overleftrightarrow{g}_{si} (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{si}) = \overleftrightarrow{G}_{si}, \text{ dans } D_i . \quad (2-3.5)$$

2 - 4. EQUATION UNIVERSELLE DE LA THEORIE DES REPONSES D'INTER-  
FACE [5. 6].

Le système composite est obtenu en assemblant les N sous-systèmes indépendants par un opérateur de couplage  $\overleftrightarrow{V}_I$  qui, ajouté à l'opérateur  $\overleftrightarrow{h}_s$  donne l'opérateur  $\overleftrightarrow{h}$  du système composite

$$\overleftrightarrow{h} = \overleftrightarrow{h}_s + \overleftrightarrow{V}_I, \text{ dans } D. \quad (2-4.1)$$

On définit la fonction réponse du système composite par la relation

$$\overleftrightarrow{g} \overleftrightarrow{h} = \overleftrightarrow{h} \overleftrightarrow{g} = \overleftrightarrow{I}, \text{ dans } D. \quad (2-4.2)$$

Comme  $\overleftrightarrow{h}_s$  est formé de N blocs disconnectés, son inverse  $\overleftrightarrow{g}_s$  est aussi formé de N blocs disconnectés et on a :

$$\overleftrightarrow{h}_s \overleftrightarrow{g}_s = \overleftrightarrow{I}, \text{ dans } D. \quad (2-4.3)$$

On obtient l'équation générale de la théorie des réponses d'interface à partir des relations (2-3.5), (2-4.1), (2-4.2) et (2-4.3). En effet,

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{h}_s \overleftrightarrow{g}_s &= \overleftrightarrow{I} \\ (\overleftrightarrow{h} - \overleftrightarrow{V}_I) \cdot \overleftrightarrow{g}_s &= \overleftrightarrow{I} \\ \overleftrightarrow{h} \overleftrightarrow{g}_s &= \overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{V}_I \overleftrightarrow{g}_s \\ \overleftrightarrow{g} \overleftrightarrow{h} \overleftrightarrow{g}_s &= \overleftrightarrow{g} (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{V}_I \overleftrightarrow{g}_s) \\ \overleftrightarrow{g} (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{V}_I \overleftrightarrow{g}_s) &= \overleftrightarrow{g}_s. \end{aligned}$$

Multipliant cette équation par  $\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_s$  à droite, il vient :

$$\overleftrightarrow{g} (\overleftrightarrow{Y} + \overleftrightarrow{V}_I \overleftrightarrow{g}_s) (\overleftrightarrow{Y} + \overleftrightarrow{A}_s) = \overleftrightarrow{g}_s (\overleftrightarrow{Y} + \overleftrightarrow{A}_s) = \overleftrightarrow{G}_s,$$

Soit en définitive :

$$\overleftrightarrow{g} (\overleftrightarrow{Y} + \overleftrightarrow{A}) = \overleftrightarrow{G}, \text{ dans } D. \quad (2-4.4)$$

$$\overleftrightarrow{G} = \overleftrightarrow{G}_s$$

où l'on a posé :

$$\overleftrightarrow{A} = \overleftrightarrow{A}_s + \overleftrightarrow{V}_I \overleftrightarrow{G}_s, \text{ dans } D. \quad (2-4.5)$$

C'est l'opérateur réponse d'interface

La relation (2-4.4) est l'équation générale de la théorie de réponse d'interface.

L'opérateur réponse d'interface  $\overleftrightarrow{A}$  possède des éléments non nuls seulement entre des points de l'espace d'interface  $M$  formé par l'ensemble des espaces d'interface  $M_i$  et les points de l'espace  $D$ . Définissons une matrice rectangulaire avec la notation suivante  $\overleftrightarrow{A}(MD)$  et des notations semblables pour tous les autres opérateurs.

L'équation (2-4.4) s'écrit alors :

$$\overleftrightarrow{g}(DD) + \overleftrightarrow{g}(DM) \overleftrightarrow{A}(MD) = \overleftrightarrow{G}(DD), \text{ dans } D. \quad (2-4.6)$$

En particulier,

$$\overleftrightarrow{g}(DM) + \overleftrightarrow{g}(DM) \overleftrightarrow{A}(MM) = \overleftrightarrow{G}(DM), \text{ dans } D, \quad (2-4.7)$$

ou 
$$\overleftrightarrow{g}(DM) = \overleftrightarrow{G}(DM) \overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(MM), \text{ dans } D, \quad (2-4.8)$$

avec, 
$$\overleftrightarrow{\Delta}(MM) = \overleftrightarrow{Y}(MM) + \overleftrightarrow{A}(MM), \text{ dans } D. \quad (2-4.9)$$

Les relations (2-4.6) et (2-4.9) nous permettent d'obtenir une autre forme de l'équation universelle de la théorie des réponses d'interface, soit,

$$\overleftrightarrow{g}(DD) + \overleftrightarrow{G}(DM) \cdot \overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(MM) \cdot \overleftrightarrow{A}(MD) = \overleftrightarrow{G}(DD), \text{ dans } D \cdot \quad (2-4.10)$$

Cette relation générale et très commode sera utilisée par la suite pour le calcul des fonctions réponses des différents systèmes composites.

## 2-5. LES VECTEURS PROPRES D'UN SYSTEME COMPOSITE [8]

La théorie des réponses d'interface qui vient d'être développée dans les paragraphes antérieurs, pour les systèmes composites discrets [4] a été également appliquée aux modèles continus [2] et mixtes [7] (partie continue et partie discrète). Cette théorie donne une relation générale entre la fonction réponse (ou fonction de Green) associée à un opérateur donné et à un système composite donné, et la fonction réponse du système de référence.

Dans ce paragraphe, nous montrerons que la même théorie peut être appliquée pour la détermination des vecteurs propres des systèmes composites, associés aux valeurs propres. Nous montrerons en particulier qu'il existe aussi une relation générale entre la déformation due à l'application sur le système composite d'une action, les vecteurs propres du système composite et les grandeurs correspondantes du système de référence. Nous nous limiterons aux modèles discrets.

Considérons un opérateur matriciel [8, 11]

$$\overleftrightarrow{h} = E \overleftrightarrow{Y} - \overleftrightarrow{h}^{\wedge}, \text{ dans } D, \quad (2-5.1)$$

défini pour un système composite, dans un espace à  $d$  dimension  $D$ . Dans l'équation (2-5.1),  $\overleftrightarrow{Y}$  est la matrice unité. Soit  $|u\rangle$  le vecteur représentant la déformation de ce système lorsqu'il est soumis à une action  $|F\rangle$  telle que,

$$\overleftrightarrow{h} |u\rangle = |F\rangle \text{ dans } D, \quad (2-5.2 \text{ a})$$

ou encore,

$$\langle u | \overset{\leftrightarrow}{h} = \langle F | , \text{ dans } D \cdot \quad (2-5.2 \text{ b})$$

(Pour les calculs ultérieurs, nous utiliserons le vecteur ligne donné par (2-5.2 b)).

Lorsque l'action sur le système est nulle, les valeurs propres  $E$  et les vecteurs propres correspondants  $| u \rangle$  sont fournis par la diagonalisation des équations (2-5.2). Par contre, la détermination de la déformation  $| u \rangle$ , due à l'action d'une certaine force  $| F \rangle$ , des valeurs propres, et des vecteurs propres, peut devenir un grand problème numérique, parce que  $\overset{\leftrightarrow}{h}$  est en général, une matrice de grande dimension. Nous proposons alors une méthode simple et générale pour résoudre ce problème en utilisant la fonction réponse  $\overset{\leftrightarrow}{g}$  définie par la relation (2-4.2). Nous avons déjà [4] que cette fonction réponse  $\overset{\leftrightarrow}{g}$  peut être obtenue à partir de la fonction réponse de référence  $\overset{\leftrightarrow}{G}$ . Ainsi, la connaissance de  $\overset{\leftrightarrow}{g}$  permet, à l'aide des équations (2-5.2), de calculer la déformation par la relation :

$$\langle u(D) | = \langle F(D) | \cdot \overset{\leftrightarrow}{g}(DD), \text{ dans } D \cdot \quad (2-5.3)$$

Utilisant ensuite l'équation universelle de la théorie des réponses d'interface (voir relation 2-4.10), il vient,

$$\langle u(D) | \sim \langle U(D) | - \langle U(M) | \cdot \overset{\leftrightarrow}{\Delta}^{-1}(MM) \cdot \overset{\leftrightarrow}{A}(MD), \quad (2-5.4)$$

$$\text{où } \langle U(D) | = \langle F(D) | \cdot \overset{\leftrightarrow}{G}(DD), \quad (2-5.5)$$

est la déformation du système de référence. Notons que l'action peut être localisée en particulier sur un sous-système et même en un seul point.

En définitive, nous constatons que la connaissance de la déformation  $| U(D) \rangle$  du système de référence et de la matrice de diffusion  $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}^{-1}(MM) \cdot \overset{\leftrightarrow}{A}(MD)$ , rend possible l'obtention de la déformation du système composite. L'équation (2-5.4) est très importante non seulement pour le calcul des déformations du système composite mais aussi pour la détermination des vecteurs propres correspondant aux

valeurs propres de l'opérateur  $\hat{h}$ . Comme dans l'équation (2-5.5), l'action engendrant les vecteurs propres peut être localisée dans un seul sous-système, il est très commode de tenir compte du vecteur  $\langle U(D) |$  et de la matrice de diffusion pour calculer le vecteur propre  $\langle u(D) |$  du système composite non fini.

Pour les systèmes composites finis, on tiendra compte du fait que toutes les valeurs propres  $\omega^2$  sont données par [6]

$$\det \hat{\Delta}(MM) = 0 \quad (2-5.6)$$

Ainsi pour éviter la divergence du facteur de normalisation du vecteur propre, on multiplie l'équation (2-5.4) par ce déterminant. Le vecteur propre du système composite fini s'obtient alors par la relation [8] :

$$\langle u(D) | \sim \langle U(M) | \cdot \det \hat{\Delta}(MM) \cdot \hat{\Delta}^{-1}(MM) \cdot \hat{A}(MD), \text{ dans } D \quad (2-5.7)$$

Pour un système composite formé de sous-systèmes semi-infinis, l'équation (2-5.7) peut être utilisée pour le calcul des valeurs propres données par l'équation (2-5.6) notamment les états localisés de surface. Cependant, en utilisant l'équation (2-5.4) complète, on peut déterminer des valeurs propres des sous-systèmes semi-infinis qui ne sont pas données par l'équation (2-5.6).

# **CHAPITRE 3**

*Fonctions réponses et  
vecteurs propres de quelques  
systèmes composites*



Ce chapitre sera consacré au calcul des fonctions réponses et des vecteurs propres de quelques types de matériaux composites. La méthode utilisée est la théorie générale des réponses d'interface développée dans le précédent chapitre. Nous utiliserons les modèles de chaîne linéaire et de Montroll-Potts [ 9 ].

Dans le modèle de chaîne linéaire, la fonction réponse de référence est donnée par la relation (2-2.8). Dans ce cas,

$$\xi_i = 1 - \frac{m_i \omega^2}{2\beta_i}$$

La relation de dispersion des phonons est donnée par l'équation,

$$\omega^2(k) = \frac{4\beta_i}{m_i} \cdot \sin^2 \left( \frac{k a_0}{2} \right) \quad (3-1)$$

où  $a_0$  est le paramètre du réseau.

Dans le modèle de Montroll-Potts, on considère un cristal infini dont la structure est un réseau cubique simple d'atomes de masse  $m_i$ .

Le déplacement des atomes du réseau dans leur site,

$$\vec{x}(n) = a_0(n_1 \vec{x}_1 + n_2 \vec{x}_2 + n_3 \vec{x}_3)$$

où  $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{x}_3$ , sont des vecteurs unitaires, est noté par  $U_n$ . Les interactions entre les six premiers voisins de chaque atome sont représentées par  $\beta_i$ . La relation de dispersion des phonons de volume est :

$$\omega^2(k) = \frac{2\beta_i}{m_i} (3 - \cos k_1 a_0 - \cos k_2 a_0 - \cos k_3 a_0) \quad (3-1')$$

où  $k$  est le vecteur d'onde. La fonction réponse de volume correspondante est conformément à l'équation (2-2.8),

$$G_{oi}(n_3, n'_3; \vec{k}_{//}, \omega^2) = \frac{m_i}{\beta_i} \cdot \frac{t_i^{|n_3 - n'_3| + 1}}{t_i^2 - 1} \quad (3-2)$$

où  $t_i$  est toujours donnée par les relations (2-2.9) dans lesquelles, [11]

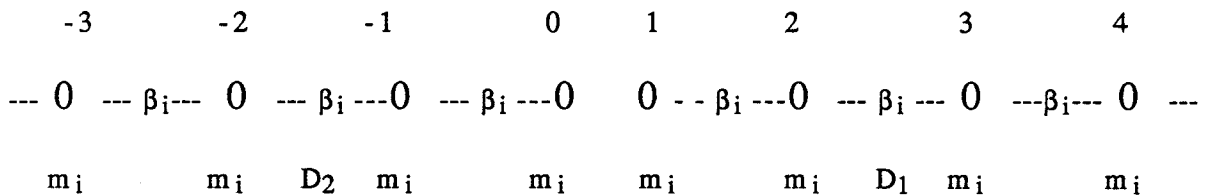
$$\xi_i = 3 - \cos k_1 a_0 - \cos k_2 a_0 - \frac{m_i}{2\beta_i} (\omega^2 + i\epsilon) \quad (3-3)$$

Ainsi, tous les résultats obtenus en utilisant les modèles à une dimension (chaîne linéaire) peuvent être facilement transposés à trois dimensions en calculant le paramètre  $\xi_i$  par la relation (3-3).  $t_i^{n_3}$  représente pour les phonons de volume, le vecteur propre correspondant à la valeur propre donnée par l'équation (3-1').

### 3-1. SURFACE D'UN CRISTAL

#### 3-1.1. Opérateur de clivage

Pour obtenir une surface libre d'un cristal ou chaîne semi-infinie, on part d'une chaîne infinie telle que celle représentée sur la figure (2-3) et on procède à un clivage. Si par exemple le clivage a lieu entre les atomes 0 et 1, il en résultera deux chaînes semi-infinies.



(Fig. 3-1.) : Deux chaînes linéaires semi-infinies présentant une surface libre (001) en  $n_z = 0$  et  $n_z = 1$

Les équations du mouvement des atomes 0 et 1 sont respectivement,

$$\frac{1}{m_i} (-\alpha_i U_0 + \beta_i U_{-1}) = 0 \quad (3-1.1)$$

$$\frac{1}{m_i} (-\alpha_i U_1 + \beta_i U_2) = 0$$

où  $\alpha_i = -m_i \omega^2 + \beta_i$ , (3-1.2)

La matrice associée à ces deux chaînes semi-infinies s'écrit :

$$\vec{h}_{oi} = \frac{1}{m_i} \left[ \begin{array}{cccc|ccc} & -2 & -1 & 0 & 0 & 1 & 2 & \\ \beta_i & -\gamma_i & \beta_i & & & & & -2 \\ & \beta_i & -\gamma_i & \beta_i & & & 0 & -1 \\ & & \beta_i & -\alpha_i & & & & 0 \\ \hline & & & & & -\alpha_i & \beta_i & 1 \\ & 0 & & & & \beta_i & -\gamma_i & \beta_i & 2 \end{array} \right]$$

Conformément à la relation (2-3.2), on peut alors définir un opérateur de clivage  $\vec{V}_{oi}$  de la façon suivante,

$$\vec{V}_{oi} = \frac{1}{m_i} \left[ \begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \beta_i & -\beta_i \\ \hline -\beta_i & \beta_i \end{array} \right] \begin{matrix} 0 \\ 1 \end{matrix} \quad (3-1.3)$$

$$V_{oi}(n_3, n'_3) = \frac{\beta_i}{m_i} (\delta_{n_3 0} \delta_{n'_3 0} + \delta_{n_3 1} \delta_{n'_3 1} - \delta_{n_3 0} \delta_{n'_3 1} - \delta_{n_3 1} \delta_{n'_3 0}) \quad (3-1.3')$$

### 3.1-2. Opérateur réponse de surface

La matrice  $\vec{h}_{oi}$  est formée de deux blocs indépendants,

$$\vec{h}_{oi} = \left[ \begin{array}{c|c} \vec{h}_{s_2} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{h}_{s_1} \end{array} \right], \quad \text{dans } D_\infty, \quad (3-1.4)$$

Etant donné que,  $\overleftrightarrow{h}_{oi} \overleftrightarrow{g}_{oi} = \overleftrightarrow{I}$ ,  $\overleftrightarrow{g}_{oi}$  sera aussi formé de deux blocs indépendants

$$\overleftrightarrow{g}_{oi} = \left[ \begin{array}{c|c} \overleftrightarrow{g}_{s2} & \overleftrightarrow{0} \\ \hline \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{g}_{s1} \end{array} \right], \text{ dans } D_{\infty}. \quad (3-1.5)$$

Cette forme des matrices  $\overleftrightarrow{h}_{oi}$  et  $\overleftrightarrow{g}_{oi}$ , nous permet de représenter la relation de Dyson (2-3.3) comme suit,

$$\left[ \begin{array}{c|c} \overleftrightarrow{g}_{s2} & \overleftrightarrow{0} \\ \hline \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{g}_{s1} \end{array} \right] \cdot \left[ \begin{array}{c|c} \overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{s2} & \\ \hline & \overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{s1} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c|c} \overleftrightarrow{G}_{s2} & \\ \hline & \overleftrightarrow{G}_{s1} \end{array} \right], \text{ dans } D_{\infty}.$$

Ainsi, pour le bloc matriciel i, on aura conformément à l'équation (2-3.5),

$$\overleftrightarrow{g}_{si} (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{si}) = \overleftrightarrow{G}_{si}, \text{ dans } D_i$$

La matrice  $\overleftrightarrow{A}_{si}$  est appelée opérateur réponse de surface. Il est obtenu par troncage de la matrice  $\overleftrightarrow{A}_{oi}$  définie par la relation (2-3.4). En effet,

$$\overleftrightarrow{A}_{oi} = \overleftrightarrow{V}_{oi} \overleftrightarrow{G}_{oi}, \quad \overleftrightarrow{A}_{oi} = \left[ \begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \overleftrightarrow{A}_{s2} & \\ \hline & \overleftrightarrow{A}_{s1} \\ 0 & 1 \end{array} \right]$$

$$A_{oi}(n_3, n'_3) = \sum_{n''_3} V_{oi}(n_3, n''_3) \cdot G_{oi}(n''_3, n'_3)$$

où l'indice  $n''_3$  prend les valeurs 0 et 1 car  $\overleftrightarrow{V}_{oi}$  n'est différent de zéro que pour les atomes situés aux sites  $n_3 = 0$  et  $n_3 = 1$ , (formule 3-1.3)

En définitive,

$$A_{oi}(n_3, n'_3) = (\delta_{n_3 0} - \delta_{n_3 1}) \cdot \frac{t_i^{|n'_3|+1} - t_i^{|1-n'_3|+1}}{t_i^2 - 1} \quad (3-1.6)$$

L'opérateur réponse de surface est obtenu à partir de la relation ci-dessus c'est-à-dire qu'on a :

$$A_{oi}(n_3, n'_3) = \begin{cases} A_{s2}(n_3, n'_3), & \text{si } n_3, n'_3 \leq 0 \\ A_{s1}(n_3, n'_3), & \text{si } n_3, n'_3 \geq 0. \end{cases} \quad (3-1.7)$$

### 3-1.3. Fonctions réponses

Le calcul de la fonction réponse correspondant à chacune des deux chaînes semi-infinies de la figure (3-1.1), se fait à partir de l'équation (2-3.5) que nous écrivons comme suit,

$$g_{si}(n_3, n'_3) + \sum_{n''_3} g_{si}(n_3, n''_3) \cdot A_{si}(n''_3, n'_3) = G_{si}(n_3, n'_3) \quad (3-1.8)$$

ou en donnant à  $n''_3$  les valeurs 0 et 1,

$$g_{si}(n_3, n'_3) + g_{si}(n_3, 0) A_{si}(0, n'_3) + g_{si}(n_3, 1) A_{si}(1, n'_3) = G_{si}(n_3, n'_3) \quad (3-1.9)$$

Ainsi, dans  $D_2$ , ( $n_3, n'_3 \leq 0$ ), on a  $g_{si}(n_3, 1) = 0$ ,

et l'équation (3-1.8) devient :

$$g_{s2}(n_3, n'_3) + g_{s2}(n_3, 0) A_{s2}(0, n'_3) = G_{s2}(n_3, n'_3), \text{ dans } D_2, \quad (3-1.10)$$

En particulier si  $n'_3 = 0$ ,

$$g_{s2}(n_3, 0) \cdot (1 + A_{s2}(00)) = G_{s2}(n_3, 0)$$

d'où :

$$g_{s2}(n_3, 0) = \frac{G_{s2}(n_3, 0)}{1 + A_{s2}(00)} = \frac{m_2 t_2^{1-n_3}}{\beta_2 (t_2 - 1)}$$

Revenant à l'équation (3-1.10), il vient :

$$g_{s2}(n_3, n'_3) = \frac{m_2}{\beta_2} \cdot \frac{t_2^{|n_3 - n'_3| + 1} + t_2^{2 - (n_3 + n'_3)}}{t_2^2 - 1}, \text{ dans } D_2. \quad (3-1.11)$$

Le même calcul pour  $D_1$  ( $n_3, n'_3 \geq 1$ ) donne :

$$g_{s1}(n_3, n'_3) = \frac{m_1}{\beta_1} \cdot \frac{t_1^{|n_3 - n'_3| + 1} + t_1^{n_3 + n'_3}}{t_1^2 - 1}, \text{ dans } D_1. \quad (3-1.12)$$

### 3-1.4. Vecteurs propres [8, 11]

Considérons à présent la chaîne semi-infinie  $i = 2$  ( $n_3 \leq 0$ ) avec une surface libre en  $n_3 = 0$ . Dans ce modèle, en dehors de la modification des constantes de force à la surface, il n'existe pas de modes localisés de surface. Cependant, l'expérience montre que les vecteurs propres changent de phase à cause de la réflexion à la surface.

Nous utilisons la relation (2-5.4) en vue d'obtenir le vecteur propre non normalisé pour ce cristal semi-infini.

Appliquée à cet exemple, cette relation s'écrit :

$$\langle u(n'_3) | = \langle U(n'_3) | - \langle U(0) | \cdot \Delta^{-1}(00) \cdot A(0, n'_3)$$

Considérons qu'à l'intérieur de ce cristal se propage une onde plane,

$$U(n_3) = t_2^{n_3}$$

qui représente également le vecteur propre non normalisé dans le volume du cristal. A la surface  $n_3 = 0$  on a,

$$U(0) = 1$$

Il reste à déterminer les éléments matriciels  $\Delta^{-1}(00)$  et  $A(0, n'_3)$ . Pour cela nous utiliserons les relations (3-1.6) et (3-1.7) qui donnent

$$A(0, n'_3) = A_{S2}(0, n'_3) = -\frac{t_2^{1-n'_3}}{t_2 + 1}, \text{ car } n_3, n'_3 \leq 0$$

et  $\Delta^{-1}(00) = [1 + A_{S2}(0, 0)]^{-1} = t_2 + 1$ , (voir formule 2-4.9).

Enfin, le vecteur propre non normalisé est,

$$u(n'_3) = t_2^{n'_3} + t_2^{1-n'_3}$$

ou en posant,

$$t_2 = e^{q_2},$$

$$u(n'_3) \sim \text{ch}q_2(n'_3 - \frac{1}{2}). \quad (3-1.13)$$

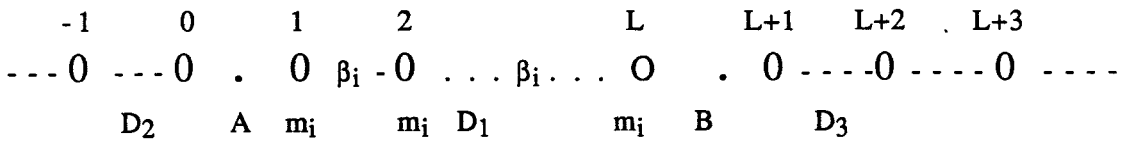
En reprenant les mêmes calculs pour la chaîne semi-infinie  $i = 1$  ( $n_3 \geq 1$ ) ayant une surface libre en  $n_3 = 1$ , on trouve :

$$u(n'_3) \sim \text{ch}q_1(n'_3 - \frac{1}{2}). \quad (3-1.14)$$

Notons qu'à l'intérieur des bandes de volume des cristaux 1 et 2  $q_1$  et  $q_2$  sont purement imaginaires.

### 3-2. LAME MINCE CRISTALLINE

La lame mince est obtenue par clivage de la chaîne infinie en deux points différents A et B par exemple.



(Fig. 3-2) : *Lame mince obtenue par clivage d'une chaîne infinie en deux points différents A et B.*

Les équations du mouvement des atomes situés aux sites  $n_3 = 1$  et  $n_3 = L$ , sont respectivement,

$$\left(\omega^2 - \frac{\beta_i}{m_i}\right) U_1 + \frac{\beta_i}{m_i} U_2 = 0$$

$$\left(\omega^2 - \frac{\beta_i}{m_i}\right) U_L + \frac{\beta_i}{m_i} U_{L-1} = 0$$

et la matrice correspondante,

	0	1	L	L+1	
$\leftrightarrow \frac{1}{m_i}$	$\beta_1 \ -\gamma_i \ \beta_i$				
	$\beta_i \ -\gamma_i \ \beta_i$				
	$\beta_i \ \ -\alpha_i$	0		0	
	0		$-\alpha_i \ \beta_i$		
		$\beta_i \ -\gamma_i \ \beta_i$			1
		.....			
			$\beta_i \ -\alpha_i$		L
	0			$-\alpha_i \ \beta_i$	L+1
		0		$\beta_i \ -\gamma_i \ \beta_i$	
				$\beta_i \ -\gamma_i \ \beta_i$	



Nous remarquons que cette matrice est formée de trois blocs diagonaux indépendants,

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cccc}
 & 0 & 1 & L & L+1 \\
 \begin{array}{c} \overleftrightarrow{h}_{oi} = \\ \\ \\ \end{array} & \left[ \begin{array}{ccc|ccc}
 \overleftrightarrow{h}_{s2} & & & \overleftrightarrow{0} & & \overleftrightarrow{0} \\
 \hline
 & & & & & \\
 \hline
 \overleftrightarrow{0} & & \overleftrightarrow{h}_{s1} & & \overleftrightarrow{0} & \\
 \hline
 & & & & & \\
 \hline
 \overleftrightarrow{0} & & \overleftrightarrow{0} & & & \overleftrightarrow{h}_{s3} \\
 \hline
 \end{array} \right] & \begin{array}{c} 0 \\ \\ 1 \\ L \\ L+1 \end{array} \\
 & \text{, dans } D_{\infty}.
 \end{array}
 \end{array}$$

La fonction réponse sera également formée de trois blocs diagonaux indépendants.

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cccc}
 & 0 & 1 & L & L+1 \\
 \begin{array}{c} \overleftrightarrow{g}_{oi} = \\ \\ \\ \end{array} & \left[ \begin{array}{ccc|ccc}
 \overleftrightarrow{g}_{s2} & & & \overleftrightarrow{0} & & \overleftrightarrow{0} \\
 \hline
 & & & & & \\
 \hline
 \overleftrightarrow{0} & & \overleftrightarrow{g}_{s1} & & \overleftrightarrow{0} & \\
 \hline
 & & & & & \\
 \hline
 \overleftrightarrow{0} & & \overleftrightarrow{0} & & & \overleftrightarrow{g}_{s3} \\
 \hline
 \end{array} \right] & \begin{array}{c} 0 \\ \\ 1 \\ L \\ L+1 \end{array} \\
 & \text{, dans } D_{\infty}.
 \end{array}
 \end{array}$$



$$\text{ou } \overleftrightarrow{A}_{oi}(n_3, n'_3) = \sum_{n''_3} V_{oi}(n_3, n''_3) \cdot G_{oi}(n''_3, n'_3),$$

$$A_{oi}(n_3, n'_3) = (\delta_{n_3 0} - \delta_{n_3 1}) \cdot \frac{t_i^{|n'_3|+1} - t_i^{|n'_3-1|+1}}{t_i^2 - 1} + (\delta_{n_3 L} - \delta_{n_3 L+1}) \frac{t_i^{|L-n'_3|+1} - t_i^{|L+1+n'_3|+1}}{t_i^2 - 1}, \quad (3-2.1)$$

Car dans ce cas-ci, l'opérateur  $\overleftrightarrow{V}_{oi}$  ne possède d'éléments non nul que pour les indices correspondants aux atomes situés sur les sites  $n''_3 = 0, 1, L$  et  $L+1$ .

On en déduit l'expression de l'opérateur réponse de surface pour la lame mince,

$$A_{s1}(n_3, n'_3) = - \left( \delta_{n_3 1} \frac{t_1^{n'_3}}{t_1 + 1} + \delta_{n_3 L} \frac{t_1^{L-n'_3+1}}{t_1 + 1} \right) \quad 1 \leq n_3, n'_3 \leq L. \quad (3-2.2)$$

### 3-2.2. Fonction réponse

Pour déterminer la fonction réponse de la lame mince, nous utiliserons de nouveau la relation (3-1.8). Toutefois, dans ce cas-ci, l'indice  $n''_3$  prend les valeurs 0, 1, L et L + 1.

Nous obtenons alors,

$$g_{si}(n_3, n'_3) + g_{si}(n_3 0) A_{si}(0, n'_3) + g_{si}(n_3, 1) A_{si}(1, n'_3) + \\ + g_{si}(n_3, L) A_{si}(L, n'_3) + g_{si}(n_3, L+1) A_{si}(L+1, n'_3) = G_{si}(n_3, n'_3).$$

Puisque par construction du  $\overleftrightarrow{g}_{oi}$ , les éléments matriciels  $g_{si}(n_3, 0)$  et  $g_{si}(n_3, L+1)$  sont nuls pour  $1 \leq n_3, n'_3 \leq L$ , la relation précédente se réduit à

$$g_{si}(n_3, n'_3) + g_{si}(n_3, 1) A_{si}(1, n'_3) + g_{si}(n_3, L) A_{si}(L, n'_3) = G_{si}(n_3, n'_3). \quad (3-2.3)$$

En particulier, si on donne à  $n'_3$  successivement les valeurs 1 et L, nous obtenons le système d'équation suivant :

$$\begin{cases} g_{si}(n_3,1) [1 + A_{si}(1,1)] + g_{si}(n_3,L) A_{si}(L,1) = G_{si}(n_3,1) \\ g_{si}(n_3,L) [1 + A_{si}(L,L)] + g_{si}(n_3,1) A_{si}(1,L) = G_{si}(n_3,L) \end{cases}$$

ou,

$$\begin{bmatrix} 1 + A_{si}(1,1) & A_{si}(L,1) \\ A_{si}(1,L) & 1 + A_{si}(L,L) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} g_{si}(n_3,1) \\ g_{si}(n_3,L) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{si}(n_3,1) \\ G_{si}(n_3,L) \end{bmatrix} .$$

Puisque nous avons défini notre système dans le domaine  $D_1$ , l'indice  $i$  figurant dans cette expression est égal à 1.

Rappelons que les éléments  $A_{si}$  et  $G_{si}$  ( $i = 1$ ) sont respectivement obtenus à partir de l'opérateur réponse de surface donné par la relation (3-2.3) et la fonction réponse de référence  $G_{oi}(n_3, n'_3)$ .

La résolution du système d'équations ci-dessus nous donne les éléments  $g_{si}(n_3,1)$  et  $g_{si}(n_3,L)$ , ( $i = 1$ ). Reportant ces valeurs dans la relation (3-2.2), on trouve finalement,

$$g_{si}(n_3, n'_3) = \frac{m_i}{\beta_i} \left\{ \frac{t_i^{|n_3 - n'_3| + 1} + t_i^{n_3 + n'_3}}{t_i^2 - 1} + \frac{t_i^{2L+1}}{(t_i^2 - 1)(1 - t_i^{2L})} (t_i^{n_3 - n'_3} + t_i^{n'_3 - n_3} + t_i^{1 - n_3 - n'_3} + t_i^{n_3 + n'_3 - 1}) \right\} \quad (i = 1) \quad (3-2.4)$$

C'est l'expression de la fonction réponse d'une couche atomique formée par L atomes de masse  $m_i$ , avec une constante d'interaction entre atomes premiers voisins égale à  $\beta_i$ .

### 3-2.3. Vecteurs propres [8, 11]

Considérons la lame mince ( $i = 1$  et  $1 \leq n_3, n'_3 \leq L$ ) avec une surface libre (001) en  $n_3 = 1$  et  $n_3 = L$ , (voir figure 3-2.).

Puisque notre milieu est fini, nous nous servons de la relation (2-5.7) dans le calcul du vecteur propre.

Utilisant l'expression de l'opérateur réponse de surface donnée par la relation (3-2.2), on a avec  $1 \leq n'_3 \leq L$ ,

$$\overleftrightarrow{\Delta}(\text{MD}) = \begin{bmatrix} A_{s1}(1, n'_3) \\ \\ \\ A_{s1}(L, n'_3) \end{bmatrix} = - \frac{1}{t_1 + 1} \cdot \begin{bmatrix} t_1^{n'_3} \\ \\ \\ t_1^{L - n'_3 + 1} \end{bmatrix} \cdot$$

On obtient  $\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(\text{MM})$  par application de la formule (2-4.9). En effet,

$$\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(\text{MM}) = \begin{bmatrix} 1 + A_{s1}(1,1) & A_{s1}(1,L) \\ \\ \\ A_{s1}(L,1) & 1 + A_{s1}(L,L) \end{bmatrix} = - \frac{t_1 + 1}{1 - t_1^{2L}} \begin{bmatrix} 1 & t_1^L \\ \\ \\ t_1^L & 1 \end{bmatrix} \cdot$$

La valeur du vecteur propre de volume à la surface est

$$U(\text{M}) = (t_1, t_1^L)$$

Le vecteur propre non normalisé est donc donné par l'expression suivante :

$$\langle u(n_3) \rangle = - \langle U(\text{M}) \rangle \cdot \overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(\text{MM}) \cdot \det \overleftrightarrow{\Delta}(\text{MM}) \cdot \overleftrightarrow{\Delta}(\text{MD}),$$

soit,

$$u(n'3) \sim \text{ch}q_1 \left( n'3 - \frac{1}{2} \right), \quad (3-2.5)$$

Ce vecteur correspond à la valeur propre que l'on trouve en posant  $\det \overleftrightarrow{\Delta} (MM) = 0$ , c'est à dire à la valeur donnée par l'équation,

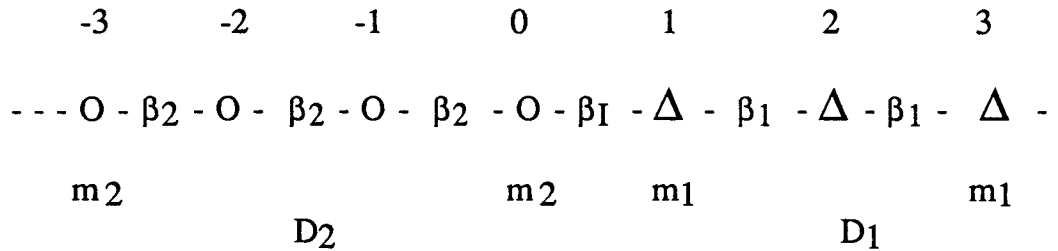
$$1 - t_1^{2L} = 0$$

$$\text{ou } \text{sh}q_1 L = 0. \quad (3-2.6)$$

Le vecteur propre ainsi déterminé par la méthode de la théorie des réponses d'interface a été déjà obtenu par une autre méthode [12].

### 3-3. INTERFACE ENTRE DEUX MILIEUX SEMI-INFINIS

Soit une chaîne composite formée de deux chaînes semi-infinies extraites de chaînes infinies de natures différentes. D'après les résultats du paragraphe 3-1, on peut connaître leurs fonctions réponses respectives. Si les deux chaînes sont reliées par la constante de force atomique  $\beta_I$ , la configuration sera la suivante :



(Fig. 3-3.) : Interface entre deux chaînes linéaires semi-infinies différentes

#### 3-3.1. Opérateur réponse d'interface.

Les équations du mouvement des atomes 0 et 1 sont respectivement :

$$\frac{1}{m_1} [ \beta_1 \cdot U_{-1} + \beta_I U_1 - (\beta_1 + \beta_I - m_1 \omega^2) U_0 ] = 0, \quad (3-3.1)$$

$$\frac{1}{m_2} [ \beta_I U_0 + \beta_2 U_2 - (\beta_I + \beta_2 - m_2 \omega^2) U_1 ] = 0$$

Soit  $\overleftrightarrow{h}$  la matrice caractérisant le mouvement de tous les atomes de la chaîne composite. On remarque alors que :

$$\overleftrightarrow{h} = \overleftrightarrow{h}_s + \overleftrightarrow{V}_I$$

où  $\overleftrightarrow{h}_s$  est la matrice composée du bloc  $\overleftrightarrow{h}_{s1}$  extrait de  $\overleftrightarrow{h}_{o1}$  et du bloc  $\overleftrightarrow{h}_{s2}$  extrait de  $\overleftrightarrow{h}_{o2}$ .

et,

$$\overleftrightarrow{V}_I = \beta_I \cdot \begin{array}{c} \begin{array}{cc} 0 & 1 \\ \hline -\frac{1}{m_2} & \frac{1}{m_2} \\ \hline \frac{1}{m_1} & -\frac{1}{m_1} \end{array} \begin{array}{l} 0 \\ 1 \end{array} \end{array}$$

$\overleftrightarrow{V}_I$  est appelé opérateur de couplage dont les éléments matriciels peuvent s'écrire :

$$V_I(n_3, n'_3) = \beta_I \left[ \frac{1}{m_1} (\delta_{n_3 1} \delta_{n'_3 0} - \delta_{n_3 1} \delta_{n'_3 1}) + \frac{1}{m_2} (\delta_{n_3 0} \delta_{n'_3 1} - \delta_{n_3 0} \delta_{n'_3 0}) \right]$$

L'opérateur réponse d'interface se calcule par la relation (2-4.5).

On a :

$$\begin{aligned} A(n_3, n'_3) &= A_s(n_3, n'_3) + \sum_{n''_3} V_I(n_3, n''_3) G(n''_3, n'_3), \quad n''_3 = 0, 1 \\ &= A_s(n_3, n'_3) + \beta_I \left( \frac{\delta_{n_3 0}}{m_2} - \frac{\delta_{n_3 1}}{m_1} \right) [G(1, n'_3) - G(0, n'_3)]. \end{aligned}$$

Dans notre cas,

$$\vec{A}_s = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} 0 & 1 \end{array} \\ \left[ \begin{array}{c|c} \vec{A}_{s2} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{A}_{s1} \end{array} \right] \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \end{array} ,$$

$$\vec{G}_s = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} 0 & 1 \end{array} \\ \left[ \begin{array}{c|c} \vec{G}_{s2} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{G}_{s1} \end{array} \right] \begin{array}{c} 0 \\ 1 \end{array} \end{array} ,$$

où les éléments de  $\vec{A}_s$  et  $\vec{G}_s$  sont extraits de  $\vec{A}_{oi}$  et de  $\vec{G}_{oi}$  respectivement, voir relations (3-1.6) et (2.2-8). En effet :

pour  $n_3, n'_3 \leq 0$

$$A_{s2}(n_3, n'_3) = -(\delta_{n_3 0} - \delta_{n_3 1}) \cdot \frac{t_2^{1-n'_3}}{t_2+1}$$

$$G_{s2}(n_3, n'_3) = \frac{m_2}{\beta_2} \cdot \frac{t_2^{|n_3-n'_3|+1}}{t_2^2-1}$$

pour  $n_3, n'_3 \geq 1$ ,

$$A_{s1}(n_3, n'_3) = -(\delta_{n_3 0} - \delta_{n_3 1}) \cdot \frac{t_1^{n'_3}}{t_1+1}$$

$$G_{s1}(n_3, n'_3) = \frac{m_1}{\beta_1} \cdot \frac{t_1^{|n_3-n'_3|+1}}{t_1^2-1}$$

pour  $n_3 \leq 0$  et  $n'_3 \geq 1$  ou  $n_3 \geq 1$  et  $n'_3 \leq 0$ ,

$$A_s(n_3, n'_3) = 0$$

$$G_s(n_3, n'_3) = 0 .$$



### 3-3.2. Fonctions réponses

Nous déterminerons les fonctions réponses associées à ce système en utilisant l'équation universelle de la théorie des réponses d'interface. Rappelons que cette dernière est donnée par la relation 2-4.10 dont l'application passe, entre autre, par la connaissance de la matrice  $\overleftrightarrow{\Delta}$  (MM) correspondant à notre problème. Cette matrice est donnée par la relation 2-4.9 où l'opérateur réponse d'interface  $\overleftrightarrow{A}$  (MM) est celui défini dans le précédent paragraphe. Le calcul donne :

$$\overleftrightarrow{\Delta}(\text{MM}) = \begin{array}{c|c} \begin{array}{c} 0 \\ \hline 1 \end{array} & \begin{array}{c} 1 \\ \hline 1 \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} 1+A(0,0) \\ \hline A(1,0) \end{array} & \begin{array}{c} A(0,1) \\ \hline 1+A(1,1) \end{array} \\ \begin{array}{c} 0 \\ \hline 1 \end{array} & \end{array} = \begin{array}{c|c} \begin{array}{c} 1 - \beta_I \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \\ \hline \frac{m_1 \beta_I t_1}{m_2 \beta_1(t_1^2-1)} \end{array} & \begin{array}{c} \frac{m_1 \beta_I t_1}{m_2 \beta_1(t_1^2-1)} \\ \hline 1 - \beta_I \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \frac{m_2 \beta_I t_2}{m_1 \beta_2(t_2^2-1)} \\ \hline \frac{m_2 \beta_I t_2}{m_1 \beta_2(t_2^2-1)} \end{array} & \begin{array}{c} \frac{m_1 \beta_I t_1}{m_2 \beta_1(t_1^2-1)} \\ \hline \frac{1 - \beta_I \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)}}{t_1+1} \end{array} \\ \begin{array}{c} 0 \\ \hline 1 \end{array} & \end{array} .$$

Par conséquent,

$$\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(\text{MM}) = W \cdot \begin{array}{c|c} \begin{array}{c} 0 \\ \hline 1 \end{array} & \begin{array}{c} 1 \\ \hline 1 \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \frac{1 - \beta_I \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)}}{t_1+1} \\ \hline \frac{m_2 \beta_I t_2}{m_1 \beta_2(t_2^2-1)} \end{array} & \begin{array}{c} \frac{m_1 \beta_I t_1}{m_2 \beta_1(t_1^2-1)} \\ \hline \frac{1 - \beta_I \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)}}{t_2+1} \end{array} \\ \begin{array}{c} 0 \\ \hline 1 \end{array} & \end{array} .$$

avec

$$W = \frac{1}{\det \overleftrightarrow{\Delta} (MM)} = \left[ \frac{1 - \beta_I \left[ \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} + \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} \right]}{(t_1+1)(t_2+1)} \right]^{-1} \quad (3-3.3)$$

L'équation universelle de la théorie des réponses d'interface appliquée à ce problème donne alors :

$$g(n_3, n'_3) = G(n_3, n'_3) - \sum_{\substack{n''_3 \\ n'''_3}} G(n_3, n''_3) \cdot \Delta^{-1}(n_3'', n'''_3) \cdot A(n'''_3, n'_3)$$

où les indices  $n''_3$  et  $n'''_3$  prennent chacun les valeurs 0 et 1 (domaine d'interface).

$$g(n_3, n'_3) = G(n_3, n'_3) - G(n_3, 0) [ \Delta^{-1}(0, 0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(0, 1) A(1, n'_3) ] \\ - G(n_3, 1) [ \Delta^{-1}(1, 0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(1, 1) A(1, n'_3) ] , \quad (3-3.4)$$

Les fonctions réponses sont finalement obtenues comme suit :

*a) Dans le cristal semi-infini 1.*

$$g(n_3, n'_3) = G_{s1}(n_3, n'_3) - G_{s1}(n_3, 1) [ \Delta^{-1}(1, 0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(1, 1) A(1, n'_3) ] \\ n_3, n'_3 \geq 1$$

$$g(n_3, n'_3) = \frac{m_1}{\beta_1} \left[ \frac{t_1^{|n_3 - n'_3| + 1} + t_1^{n_3 + n'_3}}{t_1^2 - 1} + \frac{\beta_2 \beta_I (t_2 - 1)}{W_1 (t_1 - 1)} \cdot t_1^{n_3 + n'_3} \right] n_3, n'_3 \geq 1 \quad (3-3.5)$$

où,

$$W_1 = \beta_1 \beta_2 (t_1 - 1) (t_2 - 1) \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_2}{\beta_2 (t_2 - 1)} + \frac{t_1}{\beta_1 (t_1 - 1)} \right] \right\} \quad (3-3.6)$$

b) Dans le cristal semi-infini 2.

$$g(n_3, n'_3) = G_{s2}(n_3, n'_3) - G_{s2}(n_3, 1) [ \Delta^{-1}(0,0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(0,1) A(1, n'_3) ]$$

$n_3, n'_3 \leq 0$

$$g(n_3, n'_3) = \frac{m_2}{\beta_2} \left[ \frac{t_2^{|n_3 - n'_3| + 1} + t_2^{2 - (n_3 + n'_3)}}{t_2^2 - 1} + \frac{\beta_1 \beta_I (t_1 - 1)}{W_1 (t_2 - 1)} \cdot t_2^{2 - (n_3 + n'_3)} \right]$$

$n_3, n'_3 \leq 0 \quad (3-3.7)$

c) Entre les deux cristaux semi-infinis .

$$g(n_3, n'_3) = - G_{s2}(n_3, 0) [ \Delta^{-1}(0,0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(0,1) A(1, n'_3) ] , n_3 \leq 0$$

et  $n'_3 \geq 1$

$$g(n_3, n'_3) = - \frac{m_1 \beta_I}{W_1} \cdot t_1^{n'_3} \cdot t_2^{1 - n_3} , n_3 \leq 0 \text{ et } n'_3 \geq 1 , \quad (3-3.8)$$

Pour  $n'_3 \leq 0$  et  $n_3 \geq 1$ ,  $g(n_3, n'_3)$  s'obtient en interchangeant simplement  $n_3$  et  $n'_3$  d'une part,  $m_1$  et  $m_2$  d'autre part.

### 3-3.3. Vecteurs propres [8, 11]

Considérons le système composite défini par la figure 3-3.1. Pour ce problème, l'espace des interfaces M est formé par les sites  $n_3 = 0$  et 1.

L'opérateur réponse d'interface calculé dans le paragraphe 3-3.1. s'exprime par :

$$A(n_3, n'_3) = A_s(n_3, n'_3) + \beta_I \left( \frac{\delta_{n_3 0}}{m_2} - \frac{\delta_{n_3 1}}{m_1} \right) \{ (G_{oi}(1, n'_3) - G_{oi}(0, n'_3)) \} .$$

Lorsque l'on considère la chaîne semi-infinie 2, l'indice  $i$  figurant dans l'expression ci-dessus est égal à 2, tandis que pour la détermination de la matrice  $\overleftrightarrow{A}$  (MD), les indices  $n_3$  et  $n'_3$  sont tels que  $n_3 \in M$  et  $n'_3 \in D_2$ .

Donc,

$$\vec{A}(\text{MD}) = \begin{bmatrix} A(0, n'_3) \\ A(1, n'_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{\beta_I}{\beta_2(t_2-1)} \\ \frac{m_2 \beta_I}{m_1 \beta_2 (t_2^2-1)} \end{bmatrix} \cdot t_2^{1-n'_3},$$

Soit  $t_2^{n'_3}$  une onde plane que nous envoyons dans le volume du milieu semi-infini. Si nous considérons que cette onde est nulle dans le milieu 1, dans l'espace des interfaces M, on aura :

$$\langle U(\text{M}) \mid = (1, 0)$$

Utilisant à présent la relation (2-5.4), on obtient le vecteur propre,

$$u(n'_3) = \frac{2t_2^{\frac{1}{2}} \left\{ \text{ch}q_2(n'_3 - \frac{1}{2}) - \beta_I \left( \frac{t_1^{\frac{1}{2}} \text{ch}q_2(n'_3 - \frac{1}{2})}{2 \beta_1 \text{sh} \frac{1}{2} q_1} + \frac{\text{sh}q_2 n'_3}{2 \beta_2 \text{sh} \frac{1}{2} q_2} \right) \right\}}{1 - \frac{\beta_I}{2} \left( \frac{t_1^{\frac{1}{2}}}{\beta_1 \text{sh} \frac{1}{2} q_1} + \frac{t_2^{\frac{1}{2}}}{\beta_2 \text{sh} \frac{1}{2} q_2} \right)} \quad n'_3 \leq 0 \quad (3-3.9)$$

Si par contre l'onde plane est lancée dans le milieu semi-infini 1 et considérée comme nulle dans le milieu 2, on obtient :

$$u(n'_3) = \frac{2t_1^{-\frac{1}{2}} \left\{ \text{ch}q_1(n'_3 - \frac{1}{2}) - \beta_I \left( \frac{t_2^{\frac{1}{2}} \text{ch}q_1(n'_3 - \frac{1}{2})}{2 \beta_2 \text{sh} \frac{1}{2} q_2} - \frac{\text{sh}q_1(n'_3 - 1)}{2 \beta_1 \text{sh} \frac{1}{2} q_1} \right) \right\}}{1 - \frac{\beta_I}{2} \left( \frac{t_2^{\frac{1}{2}}}{\beta_2 \text{sh} \frac{1}{2} q_2} + \frac{t_1^{\frac{1}{2}}}{\beta_1 \text{sh} \frac{1}{2} q_1} \right)} \quad ; \quad n'_3 \geq 1 \quad (3-3.10)$$

Déterminons à présent les vecteurs propres correspondant aux modes localisés donnés par l'équation,

$$\det \overleftrightarrow{\Delta}(MM) = 0$$

ou d'après la relation 3-3.3,

$$\frac{t_1^{\frac{1}{2}}}{\beta_1 \operatorname{sh} \frac{1}{2} q_1} + \frac{t_2^{\frac{1}{2}}}{\beta_2 \operatorname{sh} \frac{1}{2} q_2} = \frac{2}{\beta_I} \quad (3.3-11)$$

En utilisant cette condition, nous pouvons alors déterminer le vecteur propre correspondant aux modes localisés,

$$\mu(n'_3) = \begin{cases} t_2^{-n'_3} & n'_3 \leq 0 \\ \frac{m_1}{m_2} \cdot \frac{\beta_2}{\beta_1} \cdot \frac{t_2-1}{t_1-1} \frac{1}{t_1 t_2} \cdot t_1^{-n'_3}, & n'_3 \geq 1 \end{cases} \quad (3-3.12)$$

En effectuant les mêmes calculs pour une onde incidente dans le milieu 1, on aboutit au même résultat pour le vecteur propre correspondant aux modes localisés.

### 3-4. ADSORPTION DE L ATOMES AU BOUT D'UN CRISTAL SEMI-INFINI.

Supposons maintenant que le cristal semi-infini défini dans D<sub>1</sub> (figure 3-3), est remplacé par un cristal fini composé de L atomes. La nouvelle configuration du système est donc,

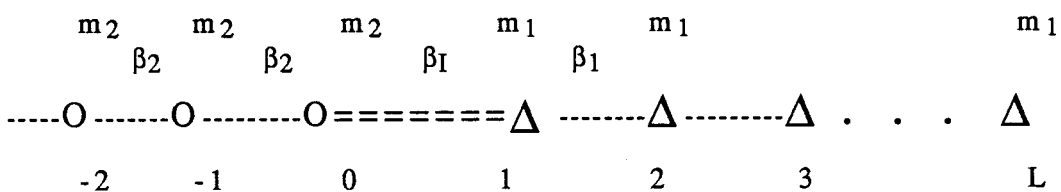


Fig. 3-4 : Adsorption de L plans atomiques au bout d'une chaîne linéaire semi-infinie.

### 3-4.1. Opérateur réponse d'interface.

La matrice de couplage est la même que celle définie par la relation 3-3.2. Aussi, l'opérateur réponse d'interface s'écrit :

$$A(n_3, n'_3) = A_s(n_3, n'_3) + \beta_I \left[ \left( \frac{\delta_{n_3 0}}{m_2} - \frac{\delta_{n_3 1}}{m_1} \right) (G(1, n'_3) - G(0, n'_3)) \right]$$

Toutefois, la configuration des matrices  $\overleftrightarrow{A}_s$  et  $\overleftrightarrow{G}$  est la suivante,

$$\overleftrightarrow{A}_s = \begin{bmatrix} \overleftrightarrow{A}_{s2} & \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} \\ \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{A}_{s1} & \overleftrightarrow{0} \\ \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} \end{bmatrix}$$

$$\overleftrightarrow{G}_s = \begin{bmatrix} \overleftrightarrow{G}_{s2} & \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} \\ \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{G}_{s1} & \overleftrightarrow{0} \\ \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} & \overleftrightarrow{0} \end{bmatrix}$$

Les blocs  $\overleftrightarrow{A}_{s2}$  et  $\overleftrightarrow{A}_{s1}$  sont extraits des relations (3-1.6) et (3-2.2) respectivement. Les blocs  $\overleftrightarrow{G}_{s2}$  et  $\overleftrightarrow{G}_{s1}$  quant à eux sont extraits de la fonction réponse de référence  $\overleftrightarrow{G}_{oi}$ .

### 3-4.2. Fonctions réponses

Dans cet exemple, l'espace des interfaces  $M$  est formé par les sites  $n_3 = 0, 1$  et  $L$ , d'où :

$$\overleftrightarrow{\Delta}(\text{MM}) = \overleftrightarrow{\text{I}}(\text{MM}) + \overleftrightarrow{\text{A}}(\text{MM}) =$$

	0	1	L	
	1+A(0,0)	A(0,1)	A(0,L)	0
	A(1,0)	1+A(1,1)	A(1,L)	1
	A(L,0)	A(L,1)	A+A(L,L)	L

$$\overleftrightarrow{\Delta}(\text{MM}) =$$

	0	1	L	
	$1 - \frac{\beta_I t_2}{\beta_2(t_2-1)}$ $\frac{1}{t_2+1}$	$\frac{m_1 \beta_I t_1}{m_2 \beta_1(t_1^2-1)}$	$\frac{m_1 \beta_I t_1^L}{m_2 \beta_1(t_1^2-1)}$	0
	$\frac{m_2 \beta_I t_2}{m_1 \beta_2(t_2^2-1)}$	$1 - \frac{\beta_I t_1}{\beta_2(t_1-1)}$ $\frac{1}{t_1+1}$	$1 + \frac{\beta_I}{\beta_1(t_1-1)}$ $\frac{1}{t_1+1} \cdot t_1^L$	1
	0	$-\frac{t_1^L}{t_1+1}$	$\frac{1}{t_1+1}$	L

et

$$\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(\text{MM}) = \text{R}$$

$\frac{\beta_1(t_1-1)(1-t_1^{2L}) - \beta_I(t_1+1)^{2L}}{\beta_1(t_1-1)(t_1+1)^2}$	$-\frac{m_1 \beta_I (t_1+t_1^{2L})}{m_2 \beta_1(t_1-1)(t_1+1)^2}$	$-\frac{m_1 \beta_I t_1^L}{m_2 \beta_1(t_1^2-1)}$
$-\frac{m_2 \beta_I t_2}{m_1 \beta_2(t_2^2-1)(t_1+1)}$	$\frac{1 - \frac{\beta_I t_2}{\beta_2(t_2-1)}}{(t_2+1)(t_1+1)}$	$\frac{W'_1 \cdot t_1^L}{\beta_1 \beta_2 (t_1^2-1)(t_2^2-1)}$
$-\frac{m_2 \beta_I t_2 t_1^L}{m_1 \beta_2(t_2^2-1)(t_1+1)}$	$\frac{1 - \frac{\beta_I t_2}{\beta_2(t_2-1)}}{(t_2+1)(t_1+1)} \cdot t_1^L$	$\frac{W_1}{\beta_1 \beta_2 (t_1^2-1)(t_2^2-1)}$

(3-4.1)

avec,

$$R = \frac{1}{\det \overset{\leftrightarrow}{\Delta}(MM)} = \frac{\beta_1 \beta_2 (t_1 + 1)(t_1^2 - 1)(t_2^2 - 1)}{W_2}$$

où

$$W_2 = \beta_1 \beta_2 (t_1 - 1)(t_2 - 1)(1 - t_1^{2L}) \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_2}{\beta_2 (t_2 - 1)} + \frac{t_1 + t_1^{2L}}{\beta_1 (t_1 - 1)(1 - t_1^{2L})} \right] \right\}. \quad (3-4.2)$$

$$W_{1'} = \beta_1 \beta_2 (t_1 - 1)(t_2 - 1) \left\{ 1 + \beta_I \left[ \frac{t_1}{\beta_1 (t_1 - 1)} - \frac{t_2}{\beta_2 (t_2 - 1)} \right] \right\}. \quad (3-4.3)$$

Les fonctions réponses sont obtenues à l'aide de l'équation générale de la théorie des réponses d'interface. Comme l'espace des interfaces  $M$  est formé par les sites  $n_3 = 0, 1$  et  $L$ , les éléments matriciels de ces fonctions réponses sont ainsi déterminés par la relation,

$$g(n_3, n'_3) = G(n_3, n'_3) - \sum_{\substack{n_3'' \\ n_3'''}} G(n_3, n_3'') \Delta^{-1}(n_3'', n_3''') A(n_3''', n'_3)$$

où les indices  $n_3'', n_3'''$  prennent chacun les valeurs 0, 1 et  $L$ . En effectuant les sommations, la relation ci-dessus donne :

$$\begin{aligned} g(n_3, n'_3) = & G(n_3, n'_3) - G(n_3 0) [\Delta^{-1}(00) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(01) A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(0L) A(L, n'_3)] - \\ & - G(n_3 1) [\Delta^{-1}(1, 0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(11) A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(1L) A(L, n'_3)] - \\ & - G(n_3 L) [\Delta^{-1}(L, 0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(L, 1) A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(LL) A(L, n'_3)]. \end{aligned}$$

Finalement nous obtenons les quatre fonctions réponses suivantes :



a) dans le cristal semi-infini,  $n_3, n'_3 \leq 0$

$$g(n_3, n'_3) = G_{s2}(n_3, n'_3) - G_{s2}(n_3, 0) [\Delta^{-1}(0,0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(0,1) A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(0,L) A(L, n'_3)]$$

$$g(n_3, n'_3) = \frac{m_2}{\beta_2(t_2^2-1)} \left[ t_2^{|n_3-n'_3|+1} + \frac{t_2^{2-(n_3+n'_3)} \{ \beta_1 \beta_2 (t_1-1)(1-t_1^{2L})(t_2-1) + \beta_1 [ \beta_1 (t_1-1)(1-t_1^{2L}) - \beta_2 (t_2-1)(t_1-t_1^{2L}) ] \}}{W_2} \right]$$

$$n_3, n'_3 \leq 0 \quad (3-4.4)$$

b) dans le cristal fini,  $1 \leq n_3, n'_3 \leq L$ ,

$$g(n_3, n'_3) = G_{s1}(n_3, n'_3) - G_{s1}(n_3, 1) [\Delta^{-1}(1,0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(1,1) A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(1,L) A(L, n'_3)] - G_{s1}(n_3, L) [\Delta^{-1}(L,0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(L,1) A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(L,L) A(L, n'_3)]$$

$$g(n_3, n'_3) = \frac{m_1}{\beta_1(t_1^2-1)} \left[ t_1^{|n_3-n'_3|+1} - \frac{\beta_2 \beta_1 t_1 (t_1+1)(t_2-1) t_1^{2L+1-n_3-n'_3} \beta_1 \beta_2 (t_2-1)(t_1-1) (1-\beta_1 \left[ \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} - \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} \right]) \cdot X}{W_2} \right]$$

$$1 \leq n_3, n'_3 \leq L \quad (3-4.5)$$

avec,  $X = t_1^{n_3+n'_3} + t_1^{2L+1} (t_1^{n_3-n'_3} + t_1^{n'_3-n_3} + t_1^{1-n_3-n'_3})$ .

c) Entre le cristal semi-infini et le cristal fini.

$$g(n_3, n'_3) = -G_{s2}(n_3, 0) [\Delta^{-1}(0,0) A(0, n'_3) + \Delta^{-1}(0,1) A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(0,L) A(L, n'_3)]$$

$$n_3 \leq 0 \text{ et } 1 \leq n'_3 \leq L$$

$$g(n_3, n'_3) = - \frac{m_1 \beta_I}{w_2} \cdot t_2^{1-n_3} (t_1^{n'_3} + t_1^{2L+1-n'_3}), \quad n_3 \leq 0, 1 \leq n'_3 \leq L. \quad (3-4.6)$$

Pour  $n'_3 \leq 0, 1 \leq n_3 \leq L$ ,  $g(n_3, n'_3)$  s'obtient en interchangeant tout simplement les indices  $n_3$  et  $n'_3$  ainsi que  $m_1$  et  $m_2$  dans l'équation précédente.

### 3-4.3. Vecteurs propres [8, 11]

La détermination des vecteurs correspondant à cet autre exemple se fait en appliquant de nouveau l'équation (2-5.4). Pour avoir la matrice  $\overleftrightarrow{A}(MD)$ , on utilise les éléments matriciels de l'opérateur réponse de surface donné dans le paragraphe 3-4.1. Dans le cas où on considère une onde plane se propageant dans le volume du cristal 2, les indices  $n_3$  et  $n'_3$  seront tels que  $n_3 \in M$  et  $n'_3 \in D_2$ . L'espace des interfaces étant formé par les sites  $n_3 = 0, 1$  et  $L$ , nous avons alors :

$$\overleftrightarrow{A}(MD) = \begin{bmatrix} A(0, n'_3) \\ A(1, n'_3) \\ A(L, n'_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \frac{\beta_I}{\beta_2(t_2-1)} \\ - \frac{m_2 \beta_I}{m_1 \beta_2(t_2^2-1)} \\ 0 \end{bmatrix} \cdot t_2^{1-n'_3}$$

et

$$\Delta^{-1}(MM)(A(MD)) = \begin{bmatrix} -\beta_1 \beta_2 (t_1-1)(t_2-1)(1-t_1^{2L}) \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_1+t_1^{2L}}{\beta_1(t_1-1)(1-t_1^{2L})} - \frac{1}{\beta_2(t_2-1)} \right] \right\} \\ \frac{m_2 \beta_1 \beta_I (t_1^2-1)}{m_1} \\ \frac{m_2 \beta_1 \beta_I t_1^L (t_1^2-1)}{m_1} \end{bmatrix} \cdot \frac{t_2^{1-n'_3}}{w_2} .$$

Une onde plane,

$$U(n'_3) = t_2^{n'_3} \quad , \quad n'_3 \leq 0$$

se propageant dans le volume du cristal 2, prend la valeur

$\langle U(M) | = (1, 0, 0)$ , dans l'espace des interfaces. (on suppose que cette onde est nulle dans le volume du cristal 1).

L'équation 2-5.4, permet alors de trouver le vecteur propre,

$$u(n'_3) = \frac{2t_2^{1/2} \left\{ \operatorname{ch} q_2 \left( n'_3 - \frac{1}{2} \right) - \beta_I \left[ \frac{(t_1 + t_1^{2L}) \operatorname{ch} q_2 \left( n'_3 - \frac{1}{2} \right)}{\beta_1 (t_1 - 1)(1 - t_1^{2L})} + \frac{\operatorname{sh} q_2 n'_3}{2 \beta_2 \operatorname{sh} \frac{1}{2} q_2} \right] \right\}}{1 - \beta_I \left[ \frac{t_1 + t_1^{2L}}{\beta_1 (t_1 - 1)(1 - t_1^{2L})} + \frac{t_2^{1/2}}{2 \beta_2 \operatorname{sh} \frac{1}{2} q_2} \right]}$$

(3-4.8a)

Si maintenant l'onde plane

$$U(n'_3) = t_1^{n'_3}$$

ou  $U(n'_3) = t_1^{-n'_3}$

est envoyée dans le cristal 1, on aura :

$$\langle U(M) | = (0, t_1, t_1^L)$$

ou  $\langle U(M) | = (0, t_1^{-1}, t_1^{-L})$

Le vecteur propre s'écrit dans ce cas,

$$u(n'_3) = \frac{2(t_1 + 1) t_1^{L + \frac{1}{2}} \left[ 1 - \frac{\beta_I t_2}{\beta_2 (t_2 - 1)} \right]}{(1 - t_1^{2L}) \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_2}{\beta_2 (t_2 - 1)} + \frac{t_1 + t_1^{2L}}{\beta_1 (t_1 - 1)(1 - t_1^{2L})} \right] \right\}} \cdot \operatorname{ch} q_1 \left( n'_3 - L - \frac{1}{2} \right);$$

(3-4.8b)

Les états vibrationnels localisés sont obtenus en faisant  $W_2 = 0$

ou,

$$\beta_I \left[ \frac{t_1 + t_1^{2L}}{\beta_1(t_1 - 1)(1 - t_1^{2L})} + \frac{t_2}{\beta_2(t_2 - 1)} \right] = 1 \quad (3-4.9)$$

En tenant compte des états localisés donnés par l'équation précédente nous allons à présent déterminer les vecteurs propres correspondants.

Pour une onde incidente  $t_2^{n'_3}$ , ( $n'_3 \leq 0$ ) dans le milieu semi-infini dont la valeur dans l'espace d'interface est :

$$\langle U(M) | = (1, 0, 0),$$

la partie réfléchie est donnée par :

$$u_1(n'_3) = \beta_1 \beta_I (t_1 - 1)(t_2 + 1) (1 - t_1^{2L}) \cdot t_2^{1 - n'_3}, \quad n'_3 \leq 0$$

et la partie transmise,

$$u_2(n'_3) = \frac{2 m_1 \beta_I \beta_2 (t_2^2 - 1) t_1^{L + \frac{1}{2}}}{m_2} \cdot \text{ch} q_1 \left( n'_3 - L - \frac{1}{2} \right), \quad 1 \leq n'_3 \leq L$$

Etant donné que dans les deux expressions précédentes les facteurs indépendants de  $n'_3$  interviendront dans le coefficient de normalisation du vecteur propre, on peut écrire :

$$u_1(n'_3) \sim t_2^{-n'_3}$$

Divisant ensuite  $u_2(n'_3)$  par le facteur,

$$\beta_1 \beta_I (t_1 - 1) (t_2 + 1) (1 - t_1^{2L}),$$

le vecteur propre non normalisé correspondant aux modes localisés s'écrit :

$$u(n'_3) = \begin{cases} t_2^{1-n'_3} & , n'_3 \leq 0 \\ \frac{2 m_1}{m_2} \frac{\beta_2}{\beta_1} \cdot \frac{t_2-1}{t_1-1} \cdot \frac{t_1^{L+\frac{1}{2}}}{1-t_1^{2L}} \cdot \text{ch}q_1(n'_3 - L - \frac{1}{2}), & 1 \leq n'_3 \leq L \end{cases} \quad (3-4.10)$$

En effectuant les mêmes calculs pour une onde se propageant dans le milieu fini on trouve le même résultat pour le vecteur propre correspondant aux modes localisés.

### 3-4. INTERFACE ENTRE DEUX LAMES MINCES DIFFERENTES.

Tous les cristaux rencontrés dans la pratique présentent des surfaces libres en certains points ; ils sont donc finis. Il est par conséquent très pratique de s'intéresser aux systèmes composites formés de tels milieux finis. D'où l'importance du présent paragraphe.

Considérons le cas particulier où la chaîne semi-infinie de la figure 3-4. est remplacée par une chaîne finie de  $L$  atomes définie dans  $D_1$ . Dans le domaine  $D_2$ , nous définissons maintenant une autre chaîne finie de  $M$  atomes avec :

$$M = N - L \quad (3-5.1)$$

$N$  désignant le nombre total d'atomes de notre système.

Nous avons ainsi la configuration suivante :

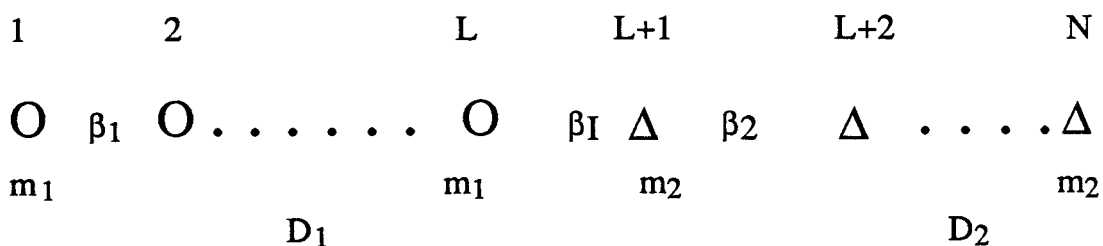


Fig. 3-5.1 : Couplage de deux couches lamellaires différentes

### 3-5.1. Opérateur réponse d'interface

Dans ce problème l'espace d'interface est formé par les atomes situés sur les sites  $n_3 = L$  et  $n_3 = L + 1$ . Par conséquent la matrice de couplage se présente comme suit :

$$\vec{V}_I = \beta_I \begin{array}{c} \begin{array}{cc} L & L+1 \\ \left[ \begin{array}{cc} -\frac{1}{m_1} & \frac{1}{m_1} \\ \frac{1}{m_2} & -\frac{1}{m_2} \end{array} \right] \\ L & L+1 \end{array} \end{array}$$

$$V_I(n_3, n'_3) = \beta_I \left\{ \frac{\delta_{n_3 L} \delta_{n'_3 L+1} - \delta_{n_3 L} \delta_{n'_3 L}}{m_1} + \frac{\delta_{n_3 L+1} \delta_{n'_3 L} - \delta_{n_3 L+1} \delta_{n'_3 L+1}}{m_2} \right\}$$

L'opérateur réponse d'interface s'écrit alors :

$$A(n_3, n'_3) = A_s(n_3, n'_3) + \sum_{n''_3} V_I(n_3, n''_3) G_{\zeta}(n''_3, n'_3), \quad n''_3 = L, L+1$$

$$A(n_3, n'_3) = A_s(n_3, n'_3) + \beta_I \left\{ \frac{\delta_{n_3 L+1}}{m_2} - \frac{\delta_{n_3 L}}{m_1} \right\} \left\{ G_s(L, n'_3) - G_s(L+1, n'_3) \right\}$$

Pour ce problème, les matrices  $\overleftrightarrow{A}_s$  et  $\overleftrightarrow{G}_s$  sont respectivement construites de la façon suivante :

$$\overleftrightarrow{A}_s = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} & 1 & L & L+1 & N \end{array} \\ \left[ \begin{array}{cc|cc} \overleftrightarrow{A}_{s1} & & \overleftrightarrow{0} & \\ \hline & & & \overleftrightarrow{A}_{s2} \\ \overleftrightarrow{0} & & & \end{array} \right] \begin{array}{l} 1 \\ L \\ L+1 \\ N \end{array} \end{array}$$

$$\overleftrightarrow{G}_s = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} & 1 & L & L+1 & N \end{array} \\ \left[ \begin{array}{cc|cc} \overleftrightarrow{G}_{s1} & & \overleftrightarrow{0} & \\ \hline & & & \overleftrightarrow{G}_{s2} \\ \overleftrightarrow{0} & & & \end{array} \right] \begin{array}{l} 1 \\ L \\ L+1 \\ N \end{array} \end{array}$$

Les blocs  $\overleftrightarrow{A}_{s2}$  et  $\overleftrightarrow{A}_{s1}$  sont extraits de la matrice  $\overleftrightarrow{A}_{oi}$  (voir relation 3-2.1). On a :

$$A_{s2}(n_3, n'_3) = - \left\{ \frac{t_2^{n'_3-L}}{t_2+1} \delta_{n_3, L+1} + \frac{t_2^{N-n'_3+1}}{t_2+1} \cdot \delta_{n_3 N} \right\}$$

$$A_{s1}(n_3, n'_3) = - \left\{ \frac{t_1^{n'_3}}{t_1+1} \delta_{n_3 1} + \frac{t_2^{L-n'_3+1}}{t_1+1} \cdot \delta_{n_3 L} \right\}$$

### 3-5.2. Fonctions réponses

Comme dans ce problème les espaces d'interface et de surface sont formés par les sites  $n_3 = 1, L, L+1, \text{ et } N$ , les éléments matriciels des fonctions réponses, obtenus par l'équation générale de la théorie des réponses d'interface, sont donnés par :

$$g(n_3, n'_3) = G(n_3, n'_3) - \sum_{n''_3, n'''_3} G(n_3, n''_3) \cdot \Delta^{-1}(n''_3, n'''_3) A(n'''_3, n'_3),$$

où les indices  $n''_3$  et  $n'''_3$  prennent chacun des valeurs  $1, L, L+1$  et  $N$ .

Après sommation, nous obtenons :

$$g(n_3, n'_3) = G(n_3, n'_3)$$

$$\begin{aligned} & -G(n_3 1) [\Delta^{-1}(11)A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(1L)A(L, n'_3) + \Delta^{-1}(1, L+1)A(L+1, n'_3) + \Delta^{-1}(1, N)A(N, n'_3)] \\ & -G(n_3 L) [\Delta^{-1}(L, 1)A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(LL)A(L, L) + \Delta^{-1}(L, L+1)A(L+1, n'_3) + \Delta^{-1}(L, N)A(N, n'_3)] \\ & -G(n_3, L+1) [\Delta^{-1}(L+1, 1)A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(L+1, L)A(L, n'_3) + \Delta^{-1}(L+1, L+1)A(L+1, n'_3) \\ & \hspace{20em} + \Delta^{-1}(L+1, N)A(N, n'_3)] \\ & -G(n_3, N) [\Delta^{-1}(N, 1)A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(N, L)A(L, n'_3) + \Delta^{-1}(N, L+1)A(L+1, n'_3) \\ & \hspace{20em} + \Delta^{-1}(NN)A(N, n'_3)] \end{aligned} \tag{3-5.2}$$

La matrice  $\overleftrightarrow{\Delta}$  (MM) est obtenue en utilisant de nouveau la relation 2-4.9. C'est une matrice  $4 \times 4$  dont les éléments  $\Delta(1, L+1)$ ,  $\Delta(1, N)$ ,  $\Delta(N, 1)$  et  $\Delta(N, L)$  sont nuls. Les calculs donnent,



$$\overleftrightarrow{\Delta}(MM) = \begin{bmatrix} & 1 & & L & & L+1 & & N & & \\ & \frac{1}{t_{1+1}} ; & & -\frac{t_1^L}{t_{1+1}} ; & & O ; & & O & & 1 \\ & \frac{1 + \frac{\beta_I}{\beta_1(t_1-1)}}{t_{1+1}} \cdot t_1^L ; & & \frac{1 - \frac{\beta_I t_1}{\beta_1(t_1-1)}}{t_{1+1}} ; & & \frac{m_2 \beta_I t_2}{m_1 \beta_2(t_2-1)^2} ; & & \frac{m_2 \beta_I t_2^M}{m_1 \beta_2(t_2-1)^2} & & L \\ & \frac{m_1 \beta_I t_1^L}{m_2 \beta_1(t_1-1)^2} ; & & \frac{m_1 \beta_I t_1}{m_2 \beta_1(t_1-1)^2} & & \frac{1 - \frac{\beta_I t_2}{\beta_2(t_2-1)}}{t_{2+1}} ; & & -\frac{[1 + \frac{\beta_I}{\beta_2(t_2-1)}] t_2^M}{t_{2+1}} & & L+1 \\ & O ; & & O ; & & -\frac{t_2^M}{t_{2+1}} ; & & \frac{1}{t_{2+1}} & & N \end{bmatrix}$$

Les éléments matriciels de  $\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(MM)$  sont donnés en annexe.

Nous pouvons à présent déterminer les quatre fonctions réponses associées aux différentes parties de ce système à savoir,

a) dans la lame mince définie dans  $D_1$  ;  $1 \leq n_3, n'_3 \leq L$ .

Par définition des opérateurs  $\overleftrightarrow{A}$  et  $\overleftrightarrow{G}$ , l'équation 3-5.2 se réduit dans ce domaine à la relation.

$$\begin{aligned} g(n_3, n'_3) &= G_{s1}(n_3, n'_3) - G_{s1}(n_3, 1) [\Delta^{-1}(11) A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(1, L) \\ &\quad A(L, n'_3) + \Delta^{-1}(1, L+1) A(L+1, n'_3)] \\ &\quad - G_{s1}(n_3, L) [\Delta^{-1}(L, 1) A(1, n'_3) + \Delta^{-1}(LL) A(L, n'_3) + \Delta^{-1}(L, L+1) A(L+1, n'_3)] \\ g(n, n'_3) &= \frac{m_1}{\beta_1(t_1^2-1)} \left\{ t_2^{|n_3-n'_3|+1} + \frac{1-t_2^{2M}}{W(t_1+1)^2(t_2+1)^2} \left[ \left\{ 1-\beta_I \left[ \frac{t_2+t_2^{2M}}{\beta_2(t_2-1)(1-t_2^{2M})} \right. \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. - \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} \right] \right\} t_1^{2L+1} (t_1^{n'_3-n_3} + t_1^{n_3-n'_3} + t_1^{1-n_3-n'_3}) \right. \\ &\quad \left. + \left\{ 1-\beta_I \left[ \frac{t_2+t_2^{2M}}{\beta_2(t_2-1)(1-t_2^{2M})} + \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} \right] \right\} t_1^{n_3+n'_3} \right\} \quad 1 \leq n_3, n'_3 \leq N \end{aligned}$$

(3-5.3a)

$$\text{où } W = \frac{(1-t_1^{2L})(1-t_2^{2M}) \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_1+t_1^{2L}}{\beta_1(t_1-1)(1-t_1^{2L})} + \frac{t_2+t_2^{2M}}{\beta_2(t_2-1)(1-t_2^{2M})} \right] \right\}}{(t_1+1)^2 (t_2+1)^2} \quad (3-5.3b)$$

b) Dans la lame mince définie dans  $D_2$ ,  $(L+1) \leq n_3, n'_3 \leq N$ .

Puisqu'on se situe dans le cas où les sites  $n_3$  et  $n'_3$  se trouvent dans le second milieu,

$$\begin{aligned} g(n_3, n'_3) &= G_{s2}(n_3, n'_3) - G_{s2}(n_3, L+1) [\Delta^{-1}(L+1)A(L, n'_3) + \Delta^{-1}(L+1, L+1)A(L+1, n'_3) \\ &\quad + \Delta^{-1}(L+1, N)A(N, n'_3)] \\ &\quad - G_{s2}(n_3, N) [\Delta^{-1}(N, L)A(L, n'_3) + \Delta^{-1}(N, L+1, L)A(L+1, n'_3) + \Delta^{-1}(N, N)A(N, n'_3)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g(n_3, n'_3) &= \frac{m_2}{\beta_2(t_2^2-1)} \left\{ t_2^{|n_3-n'_3|+1} + \frac{1-t_1^{2L}}{W(t_1+1)^2(t_2+1)^2} \left[ \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_1+t_1^{2L}}{\beta_1(t_1-1)(1-t_1^{2L})} \right. \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. - \frac{1}{\beta_2(t_2-1)} \right] \right\} t_2^{2M+1} (t_2^{n'_3-n_3} + t_2^{n_3-n'_3} + t_2^{n_3+n'_3-2L}) \right. \\ &\quad \left. + \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_1+t_1^{2L}}{\beta_1(t_1-1)(1-t_1^{2L})} + \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right] \right\} \cdot t_2^{2N-n_3-n'_3+2} \right\} (L+1) \leq n_3, n'_3 \leq N \end{aligned} \quad (3-5.4)$$

c) Lorsque les indices  $n_3$  et  $n'_3$  se trouvent dans le premier milieu et l'autre dans le second (ou inversement), nous obtenons respectivement :

$$\begin{aligned} g(n_3, n'_3) &= - \frac{m_1 \beta_I}{\beta_1 \beta_2 W(t_1+1)(t_2+1)(t_1^2-1)(t_2^2-1)} \\ &\quad (t_1^{L+n'_3} + t_1^{L-n'_3+1}) \cdot (t_2^{n_3-L} + t_2^{2N-L-n_3+1}). \end{aligned} \quad (3-5.5)$$

$$1 \leq n_3 \leq L \text{ et } (L+1) \leq n'_3 \leq N$$

et

$$g(n_3, n'_3) = - \frac{m_2 \beta_I}{\beta_1 \beta_2 W(t_1+1)(t_2+1)(t_1^2-1)(t_2^2-1)} \times$$

$$(t_1^{L+n_3} + t_1^{L-n'_3+1}) \cdot (t_2^{n'_3-L} + t_2^{2N-L-n'_3+1}). \quad (3-5.6)$$

$$1 \leq n'_3 \leq L \text{ et } (L+1) \leq n_3 \leq N$$

### 3-5.3. Vecteurs propres [8, 11]

Le modèle de systèmes composites à plusieurs couches lamellaires ou super-réseau a déjà été étudié [13]. Dans ce travail, l'auteur qui a utilisé une méthode différente de la notre n'a donné que les valeurs propres, c'est-à-dire les fréquences de vibrations des atomes du réseau. Tout récemment, les systèmes à deux et trois couches ont été également étudiés [12] et les résultats fournissent à la fois toutes les valeurs propres et les vecteurs propres correspondants.

Ainsi, le but du présent paragraphe est de montrer que notre théorie permet d'obtenir les mêmes résultats avec des calculs relativement simples.

Nous savons déjà que pour n'importe quel type de système composite, les fréquences de vibration des atomes sont obtenues par la relation 2-5.6. Appliquant cette équation à notre système, on montre que les valeurs propres sont données par :

$$\frac{\text{ch}(M + \frac{1}{2})q_2}{\text{ch}(M - \frac{1}{2})q_2} + \frac{\beta_I}{\beta_2} - 1 = \frac{\beta_I^2}{\beta_1 \beta_2} \left[ \frac{\text{ch}(L + \frac{1}{2})q_1}{\text{ch}(L - \frac{1}{2})q_2} + \frac{\beta_I}{\beta_1} - 1 \right]^{-1}, \quad (3-5.7)$$

Comme nous avons à faire à un système composé de deux couches finies, les vecteurs propres correspondants aux valeurs propres données par l'équation ci-dessus se calculent en utilisant l'équation 2-5.7.

La matrice  $\overleftrightarrow{A}$  (MD) est obtenue à partir de l'opérateur réponse d'interface défini dans le paragraphe 3-5.1.

Si nous considérons une onde plane,

$$U(n_3) = t_1^{n_3}, \quad 1 \leq n_3 \leq L$$

se propageant dans le volume du cristal 1, les éléments  $A(n_3, n'_3)$  seront tels que  $n_3 \in M$  et  $n'_3 \in D_1$  dans l'expression de la matrice  $\overleftrightarrow{A}(MD)$ . Nous avons ainsi,

$$\overleftrightarrow{A}(MD) = \begin{bmatrix} A(1, n'_3) \\ A(L, n'_3) \\ A(L+1, n'_3) \\ A(N, n'_3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{t_1^{n'_3}}{t_1+1} \\ -\frac{1 + \frac{\beta_I}{\beta_1(t_1-1)}}{t_1+1} \cdot t_1^{L-n'_3+1} \\ \frac{m_1 \beta_I}{m_2 \beta_1 (t_1^2-1)} \cdot t_1^{L-n_3+1} \\ 0 \end{bmatrix}$$

et,

$$\Delta^{-1}(MM) A(MD) = \frac{2\beta_I t_1^{L+1/2}}{\beta_I W(t_1^2-1)} \cdot \begin{bmatrix} -\frac{t_1^L(1-t_2^{2M})}{(t_2+1)^2(1-t_1^{2L})} \\ -\frac{1-t_2^{2M}}{(t_2+1)^2(1-t_1^{2L})} \\ \frac{m_1}{m_2(t_1+1)(t_2+1)} \\ \frac{t_2^M m_1}{m_2(t_1+1)(t_2+1)} \end{bmatrix} \cdot \text{ch} \left( n'_3 - \frac{1}{2} \right) q_1$$

Dans l'espace des interfaces, l'onde plane introduite ci-haut devient :

$$\langle U(M) | = (t_1, t_1^L, 0, 0)$$

Enfin, l'application de la relation 2-5.7 permet d'obtenir le vecteur propre non normalisé,

$$u_1(n'_3) = - \langle U(M) | \Delta^{-1}(MM). W . A(MD) ,$$

$$u_1(n'_3) = \frac{\beta_I t_1^L . t_2^{M-1}}{4 \operatorname{ch}^2 \frac{q_2}{2}} \cdot \frac{\operatorname{sh} M q_2}{\beta_1 \operatorname{sh} L q_1 \operatorname{sh} \frac{1}{2} q_1} \cdot \operatorname{ch}(n'_3 - \frac{1}{2}) q_1 , 1 \leq n'_3 \leq L,$$

(3-5.8)

Les termes indépendants de l'indice  $n'_3$  étant des facteurs qui interviennent dans le coefficient de normalisation du vecteur propre, nous pouvons diviser la relation précédente par une quantité égale à :

$$\frac{\beta_I . t_1^L . t_2^{M-1} . \operatorname{sh} M q_2}{4 m_1 \operatorname{ch}^2 \frac{1}{2} q_2}$$

L'équation (3-5.8) devient alors :

$$u_1(n'_3) = - \frac{m_1}{\beta_1} \frac{1}{\operatorname{sh} L q_1 . \operatorname{sh} \frac{1}{2} q_1} \cdot \operatorname{ch} (n'_3 - \frac{1}{2}) q_1, 1 \leq n'_3 \leq L,$$

(3-5.9)

De la même manière, si l'on considère une onde plane incidente dans le milieu 2, c'est-à-dire si

$$U(n_3) = t_2^{n_3} \quad \text{et ,}$$

$$\langle U(M) | = (0, 0, t_2^{L+1} , t_2^N ),$$

On obtient :

$$u_2(n'_3) = \frac{m_2}{\beta_2} \cdot \frac{1}{\operatorname{sh} M q_2 \operatorname{sh} \frac{1}{2} q_2} \cdot \operatorname{ch} q_2 (n'_3 - N - \frac{1}{2}), (L+1) \leq n'_3 \leq N,$$

(3-5.10)

Le vecteur propre non normalisé pour les deux couches finies s'écrit donc,

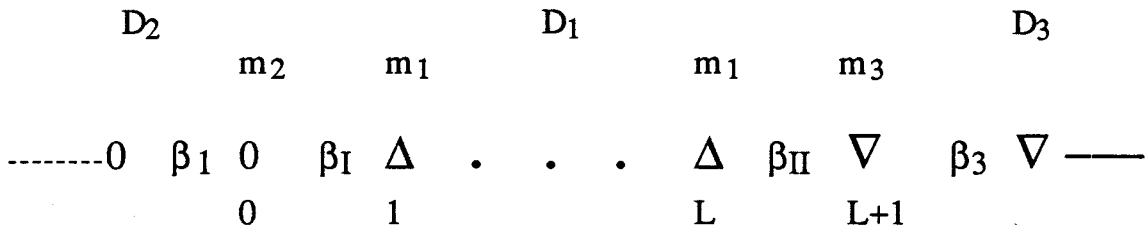
$$u(n'_3) = \begin{cases} \frac{m_1}{\beta_1} \cdot \frac{1}{\text{sh } L q_1} \cdot \frac{1}{\text{sh } \frac{1}{2} q_1} \cdot \text{ch } q_1 (n'_3 - \frac{1}{2}), & 1 \leq n'_3 \leq L \\ \frac{m_2}{\beta_2} \frac{1}{\text{sh } M q_2} \cdot \frac{1}{\text{sh } \frac{1}{2} q_2} \cdot \text{ch } q_2 (n'_3 - N - \frac{1}{2}), & (L+1) \leq n'_3 \leq N \end{cases} \quad (5-3.11)$$

### 3-6. LE SYSTEME SANDWICH [15]

Le système sandwich est constitué de trois sous-systèmes différents : une lame mince et deux matériaux semi-infinis. La lame mince est placée entre les deux milieux semi-infinis (figure 3-6.1).

Les phonons de surface d'interface et les phonons adsorbés ont fait l'objet de nombreuses études théoriques et expérimentales. Par contre les phonons localisés dûs à une lame mince déposée entre deux autres substrats (phonons de sandwich) sont étudiés pour la première fois. Il est vrai que de telles expériences ne sont pas faciles à réaliser. Le but du présent paragraphe est d'utiliser le modèle de cristaux cubiques simples pour essayer d'étudier les phonons de sandwich. Nous essayerons également d'étudier quelques limites de notre système comme par exemple, l'obtention des phonons localisés dans une lame mince adsorbée sur un substrat. La limite élastique d'un matériaux composite avec deux interfaces planes a également été étudiée auparavant. C'est un autre cas particulier de notre système.

En plus de l'étude des phonons localisés dans le sandwich atomique, nous déterminerons également les fonctions réponses qui lui sont associées et grâce auxquelles on peut étudier n'importe quelles propriétés de tels systèmes.



**Fig. 3-6.1. Géométrie du sandwich**

0 atomes de la chaîne semi-infinie du milieu 2.

Δ atomes de la lame mince.

▽ atomes de la chaîne semi-infinie du milieu 3.

$\beta_1$ ,  $\beta_2$  et  $\beta_3$  sont les interactions entre atomes premiers voisins dans le volume des cristaux 1, 2 et 3 respectivement.  $\beta_I$  et  $\beta_{II}$  sont les interactions entre les atomes situés aux interfaces.

3-6.1. Opérateur réponse d'interface

Dans ce modèle nous avons deux opérateurs de couplage,

$$\hat{V}_I = \beta_I \begin{bmatrix} -\frac{1}{m_2} & \frac{1}{m_2} \\ \frac{1}{m_1} & -\frac{1}{m_1} \end{bmatrix}$$

et

$$\hat{V}_{II} = \beta_{II} \begin{bmatrix} -\frac{1}{m_1} & \frac{1}{m_1} \\ \frac{1}{m_3} & -\frac{1}{m_3} \end{bmatrix}$$

D'où les éléments matriciels de l'opérateur réponse d'interface

$$A(n_3, n'_3) = A_s(n_3, n'_3) + \beta_I \left[ \left( \frac{\delta n_{30}}{m_2} - \frac{\delta n_{31}}{m_1} \right) (G_s(1, n'_3) - G_s(0, n'_3)) \right] + \beta_{II} \left[ \left( \frac{\delta n_{3L}}{m_1} - \frac{\delta n_{3L+1}}{m_3} \right) (G_s(L+1, n'_3) - G_s(L, n'_3)) \right]$$

Les matrices  $\vec{A}_s$  et  $\vec{G}_s$  sont construites, comme suit,

$$\vec{A}_s = \begin{matrix} & \begin{matrix} 0 & 1 & L & L+1 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ L \\ L+1 \end{matrix} & \left[ \begin{array}{c|c|c} \vec{A}_{s2} & \vec{0} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{A}_{s1} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{0} & \vec{A}_{s3} \end{array} \right] \end{matrix} ; \vec{G}_s = \begin{matrix} & \begin{matrix} 0 & 1 & L & L+1 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ L \\ L+1 \end{matrix} & \left[ \begin{array}{c|c|c} \vec{G}_{s2} & \vec{0} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{G}_{s1} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{0} & \vec{G}_{s3} \end{array} \right] \end{matrix} .$$

A l'intérieur de la lame mince,

$$A_{s1}(n_3, n'_3) = - \frac{1}{t_{1+1}} \cdot (\delta_{n_3 1} t_1^{n'_3} + \delta_{n_3 L} t_1^{L-n'_3+1}) , 1 \leq n_3, n'_3 \leq L$$

Dans les deux cristaux semi-infinis, nous avons,

$$A_{s2}(n_3, n'_3) = - \delta_{n_3 0} \frac{t_2^{1-n'_3}}{t_{2+1}} , n_3, n'_3 \leq 0$$

$$A_{s3}(n_3, n'_3) = - \delta_{n_3, L+1} \cdot \frac{t_3^{n'_3-L}}{t_{3+1}} , n_3, n'_3 \geq L+1$$

### 3-6.2. Fonctions réponses

Les éléments matriciels de la fonction réponse sont obtenus en appliquant l'équation générale (2-4.10). On a :



$$g(n_3, n'_3) = G_s(n_3, n'_3) - \sum_{m, m' \in M} G_s(n_3, m) \Delta^{-1}(m, m') A(m, n'_3)$$

Ici l'espace d'interface M est formé par les sites  $n_3 = 0, 1, L$  et  $L + 1$ . Les éléments matriciels  $\overleftrightarrow{\Delta}(m, m')$ ,  $m, m' \in M$ , sont obtenus en appliquant les relations 2-4.9. Ceux de  $\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(m, m')$  sont donnés en annexe.

Si nous désignons le déterminant de  $\overleftrightarrow{\Delta}(mm')$ ,  $m, m' \in M$

par

$$W_3 = \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} + \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} \right] \right\} \left\{ 1 - \beta_{II} \left[ \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} + \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} \right] \right\} \\ - t_1^{2L} \left\{ 1 + \beta_I \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right] \right\} \left\{ 1 + \beta_{II} \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right] \right\}, \quad (3-6.1)$$

les éléments matriciels de la fonction réponse du système sandwich sont les suivants :

a) dans le cristal semi-infini défini dans  $D_2$

$$g(n_3, n'_3) = \frac{m_2}{\beta_2(t_2^2-1)} \left\{ t_2^{|n_3-n'_3|+1} + \frac{t_2^{2-n_3-n'_3} \cdot B}{W_3} \right\}, \quad n_3, n'_3 \leq 0 \quad (3-6.2)$$

avec

$$B = \left\{ 1 - \beta_{II} \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right] \right\} \left\{ 1 + \beta_I \left[ \frac{1}{\beta_2(t_2-1)} - \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} \right] \right\} \\ - t_1^{2L} \left\{ 1 + \beta_{II} \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right] \right\} \left\{ 1 + \beta_I \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{1}{\beta_2(t_2-1)} \right] \right\}$$

b) Entre le cristal semi infini 2 et la lame mince 1,

$$g(n_3, n'_3) = - \frac{m_1}{\beta_1(t_1-1)} \cdot \frac{\beta_I t_2^{1-n_3}}{W_3 \beta_2(t_2-1)} \left\{ \left[ 1 - \beta_{II} \left( \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right) \right] t_1^{n'_3} \right. \\ \left. + \left[ 1 + \beta_{II} \left( \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right) \right] t_1^{2L+1-n'_3} \right\} \\ n_3 \leq 0 \text{ et } 1 \leq n'_3 \leq L. \quad (3-6.3)$$

c) Pour  $1 \leq n_3 \leq L$  et  $n'_3 \leq 0$ ,  $g(n_3, n'_3)$  est obtenu en interchangeant simplement les indices  $n_3$  et  $n'_3$  dans l'équation 3-6.3 précédente.

d) Entre les deux cristaux semi-infinis 2 et 3,

$$g(n_3, n'_3) = \frac{\beta_I \beta_{II} m_3(t_1+1) t_1^L}{\beta_1 \beta_2 \beta_3(t_1-1)(t_2-1)(t_3-1)W_3} \cdot t_2^{1-n_3} t_3^{n'_3-L}, \quad n_3 \leq 0 \text{ et } n'_3 \geq L + 1. \\ (3-6.4)$$

e) Pour  $n'_3 \leq 0$  et  $n_3 \geq L + 1$ ,  $g(n_3, n'_3)$  s'obtient en interchangeant simplement les indices  $n_3$  et  $n'_3$  dans l'expression (3-6.4).

f) Dans la lame mince 1,

$$g(n_3, n'_3) = \frac{m_1}{\beta_1(t_2-1)^2} \left\{ t_1^{|n_3-n'_3|+1} + \frac{1}{W_3} [C + D] \right\}, \quad 1 \leq n_3, n'_3 \leq L, \quad (3-6.5)$$

avec

$$C = \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right] \right\} \left\{ 1 - \beta_{II} \left[ \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} + \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right] \right\} t_1^{n_3+n'_3} + \\ \left[ 1 + \beta_{II} \left\{ \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right\} \right] t_1^{2L+1-n_3+n'_3} \left. \right\}$$

et

$$D = \left\{ 1 + \beta_{II} \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right] \right\} \left\{ 1 + \beta_I \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right] \right\} t_1^{2L+1-n'_3+n_3} \\ + \left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} + \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right] \right\} t_1^{2L+2-n_3-n'_3}$$

g) Entre la lame mince 1 et le cristal semi-infini 3,

$$g(n_3, n'_3) = \frac{-m_3 \beta_{II} t_3^{n'_3-L} \cdot t_1^L}{W_3 \beta_1 \beta_3 (t_1-1)(t_3-1)} \left\{ t_1^{n_3} \left[ 1 + \beta_I \left( \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right) \right] + \right. \\ \left. + t_1^{1-n_3} \left[ 1 - \beta_I \left( \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} + \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right) \right] \right\}, \\ 1 \leq n_3 \leq L \text{ et } n'_3 \geq L + 1 \quad (3-6.6)$$

h) Pour  $n_3 \geq L + 1$  et  $1 \leq n'_3 \leq L$ ,  $g(n_3, n'_3)$  est obtenu en interchangeant les indices  $n_3$  et  $n'_3$  dans la relation 3-6.6.

i) Dans le cristal semi-infini 3,

$$g(n_3, n'_3) = \frac{m_3}{\beta_3(t_3^2-1)} \left\{ t_3^{|n_3-n'_3|+1} + \frac{t_3^{n_3+n'_3-2L} \cdot B'}{W_3} \right\}, \quad n_3, n'_3 \geq L + 1, \\ (3-6.7)$$

où  $B'$  est obtenu à partir de  $B$  en interchangeant simplement les indices 2 et 3 d'une part,  $\beta_I$  et  $\beta_{II}$  d'autre part.

### 3-6.3. Etats vibrationnels localisés

La connaissance des fonctions réponses pour les systèmes décrits antérieurement permet d'analyser toutes les propriétés vibrationnelles qui peuvent être étudiées à l'aide du modèle de Montroll-Potts [9]. Nous illustrons ici l'utilité des résultats acquis dans ce chapitre. Ils montrent l'apparition des états vibrationnels localisés dans le sandwich cristallin. Ces nouveaux états localisés sont donnés par les nouveaux pôles des fonctions réponses qui sont les valeurs de  $\omega$  pour lesquelles  $W_3$  est nul en dehors des bandes de volume des cristaux 2 et 3. On devra

également exclure les extrêmités de la bande de volume du cristal 1, données par  $t_1 = \pm 1$ , car ils ne sont pas de nouveaux pôles.

Les états vibrationnels localisés dans le sandwich cristallin sont donnés par

$$W_3 = 0, \quad t_1 \neq \pm 1, \quad (3-6.8)$$

où  $W_3$  est donné par la relation 3-6.1.

Une autre méthode conduisant à ce résultat consiste à définir une nouvelle variable  $q_1$  telle que,

$$t_1 = e^{q_1}$$

La condition (3-6.8) donne alors :

$$\begin{aligned} \frac{W_3}{t_1^L} = & -2 \left(1 - \frac{\beta_{I} t_2}{\beta_2(t_2-1)}\right) \left(1 - \frac{\beta_{II} t_3}{\beta_3(t_3-1)}\right) \cdot \text{sh } q_1 L - \frac{\beta_I \beta_{II}}{2 \beta_1^2 \text{sh}^2 \frac{1}{2} q_1} \cdot \text{sh } q_1(L-1) \\ & + \frac{\beta_I \beta_{II}}{\beta_1} \left\{ -\left(\frac{1}{\beta_I} + \frac{1}{\beta_{II}}\right) + \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} + \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right\} \frac{\text{ch } q_1(L - \frac{1}{2})}{\text{sh } \frac{1}{2} q_1} \end{aligned} \quad (3-6.8')$$

avec

$$q_1 \neq 0 \text{ et } q_1 \neq i\pi$$

Si les cristaux 2 et 3 sont identiques, les états vibrationnels localisés sont donnés par

$$\text{th } \frac{q_1 L}{2} \cdot \text{Coth } \frac{q_1}{2} = 1 + 2\beta_I \left( \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} - \frac{1}{\beta_I} \right), \quad q_1 \neq i\pi. \quad (3-6.9)$$

$$\text{Coth } \frac{q_1 L}{2} \cdot \text{Coth } \frac{q_1}{2} = 1 + 2\beta_I \left( \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} - \frac{1}{\beta_I} \right)$$

La simplicité de ces résultats nous permet d'obtenir facilement à l'aide d'un calcul numérique simple une appréciation qualitative pour l'existence des états vibrationnels localisés pour n'importe quelle combinaison de cristaux.

Comme nous l'avons déjà indiqué dans le chapitre 1, cette étude à une dimension, a été transposée facilement à 3 dimension [15]. Nous illustrons ici par quelques courbes le résultat (3-6.1) pour les phonons de sandwich en tenant compte de la relation (3-6.8). Dans le cadre de la zone de Brillouin à deux dimensions, (figure 3-6.2), les figures (3-6.3), (3-6.4) et (3-6.5) donnent les relations de dispersion des phonons de sandwich pour une tranche de trois plans atomiques intercallés entre deux autres cristaux.  $\Omega$  est une fréquence réduite égale à  $\frac{\omega}{\omega_{2\max}}$  où  $\omega_{2\max}$  est la fréquence maximale du cristal 2 égale à  $2 \left( \frac{\beta_2}{m_2} \right)^{1/2}$ .

Sur la figure 3-6.3. on voit trois branches de phonons localisés en dessous des bandes de volume des cristaux semi-infinis, tandis que sur la figures 3-6.5, elles apparaissent au-dessus de ces bandes de volume. Un cas intermédiaire est donné par la figure 3-6.4. où nous avons deux branches de phonons localisés entre les des deux bandes de volume, la troisième branche se trouvant à l'intérieur de l'une de ces bandes. Notons que cette disposition des modes localisés par rapport aux bandes de volume ne dépend que des masses des atomes et des interactions entre eux. Le nombre de banches que l'on obtient dans chaque cas dépend du nombre de plans atomiques du cristal fini.

Des résultats généraux obtenus pour le système sandwich, il est possible de retrouver ceux relatifs aux systèmes suivants : cristal avec une surface libre, interface entre deux cristaux semi-infinis, adsorption d'une lame mince sur un substrat. Par exemple, les états vibrationnels localisés dûs à l'adsorption d'une lame mince au bout d'un substrat sont obtenus à partir de la relation (3-6.8') en posant  $\beta_{II} = 0$  ; on obtient,

$$-2 \left( 1 - \frac{\beta_{II} t_2}{\beta_2 (t_2 - 1)} \right) \cdot \text{sh } q_1 L - \frac{\beta_I}{\beta_1} \cdot \frac{\text{ch } q_1 \left( L - \frac{1}{2} \right)}{\text{sh } q \frac{1}{2}} = 0, \quad q_1 \neq i\pi, \quad (3-6.10)$$

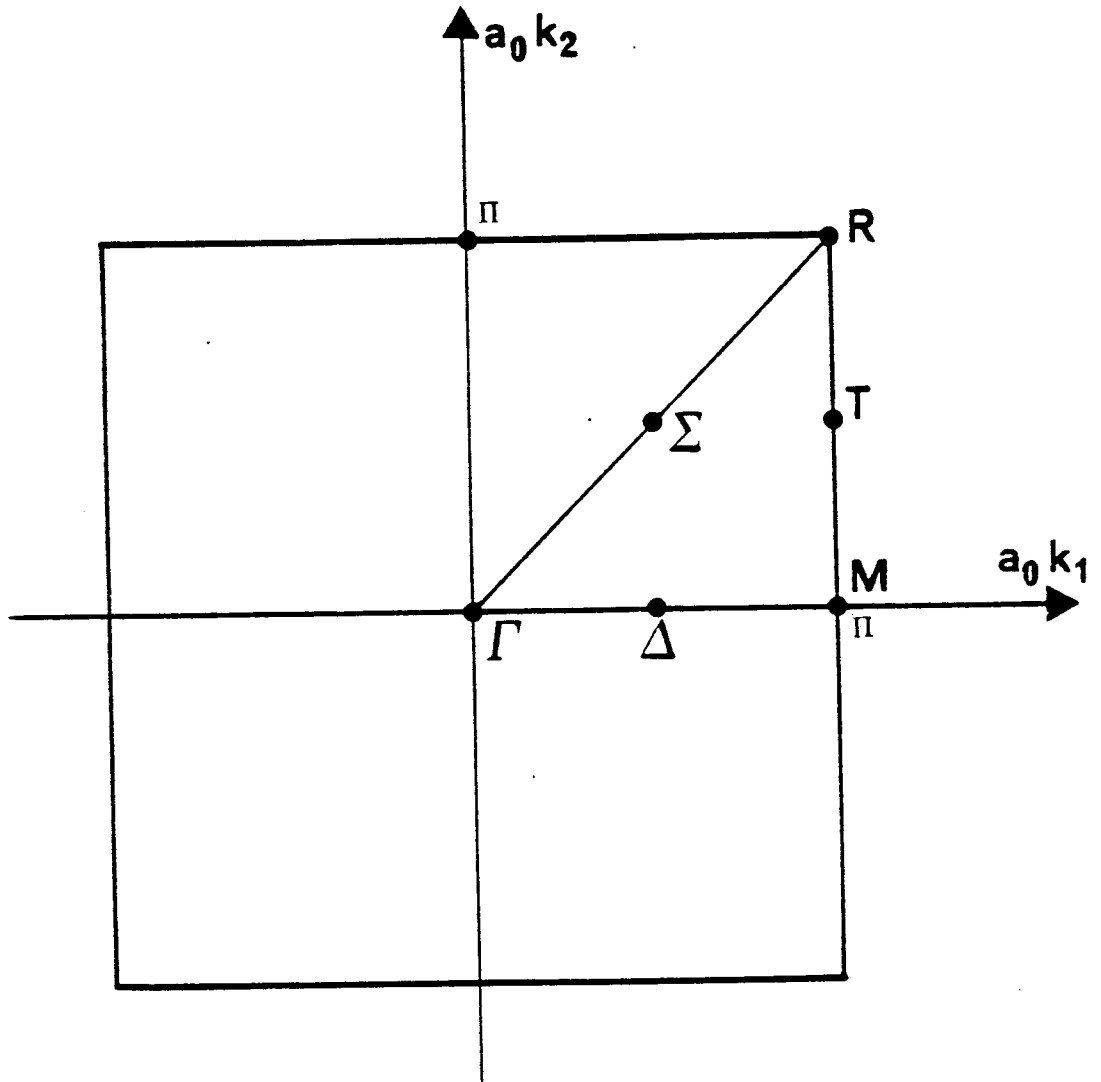


Fig. 3-6.2. : Zone de Brillouin à deux dimensions

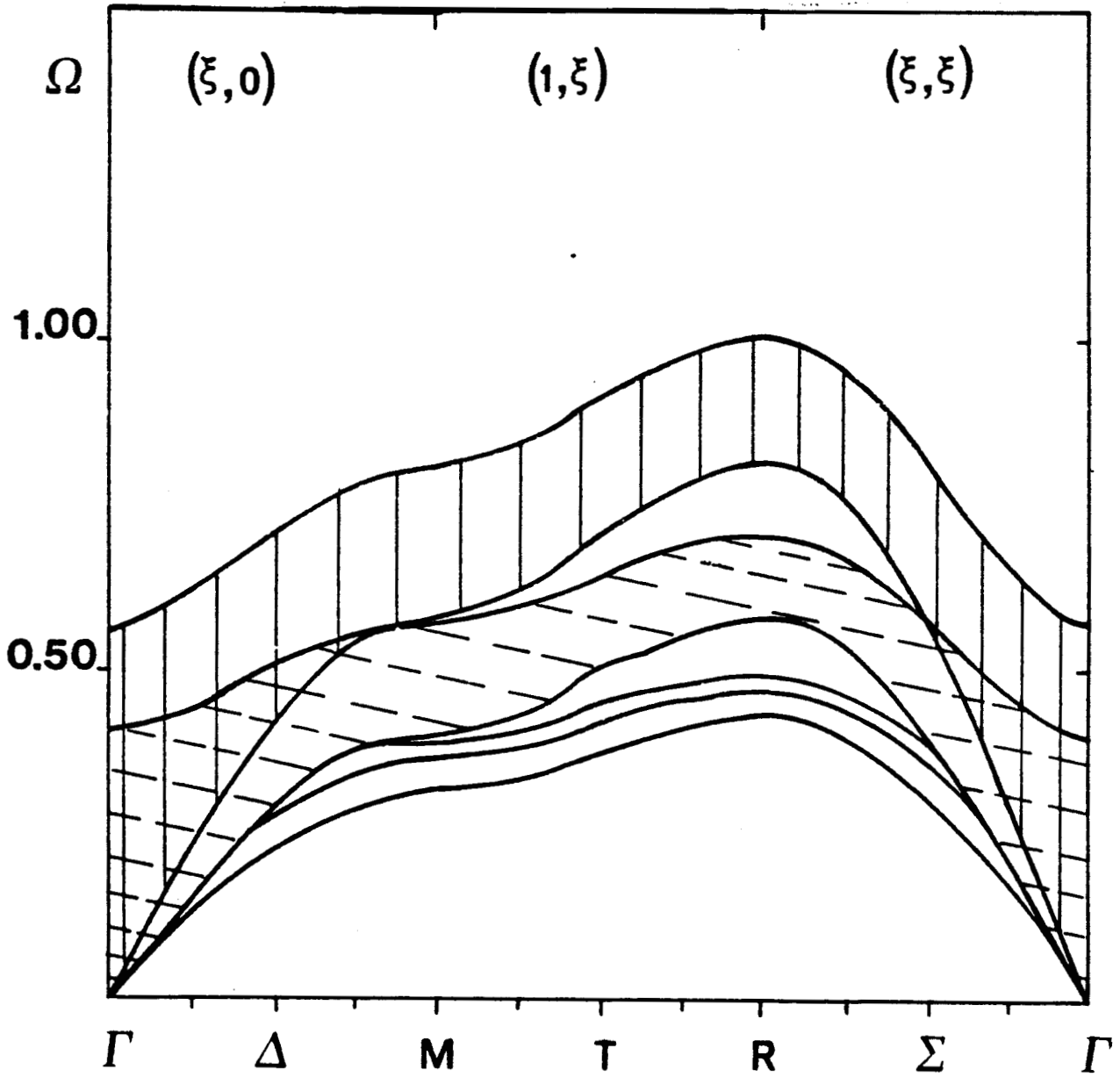


Fig. 3-6.3 : Trois Courbes de dispersion des phonons de sandwich dans la zone de Brillouin à deux dimensions en dessous des bandes de volume des cristaux semi-infinis pour un sandwich à trois plans atomiques :

$$\Omega = \frac{\omega}{\omega_{2\max}}, \quad \frac{m_1}{m_2} = 1.5; \quad \frac{m_3}{m_2} = 2.0; \quad \frac{\beta_1}{\beta_2} = 0.37; \quad \frac{\beta_3}{\beta_2} = 1.0; \quad \frac{\beta_I}{\beta_2} = 0.68;$$

$$\frac{\beta_{II}}{\beta_2} = 1.0, \quad L = 3.$$

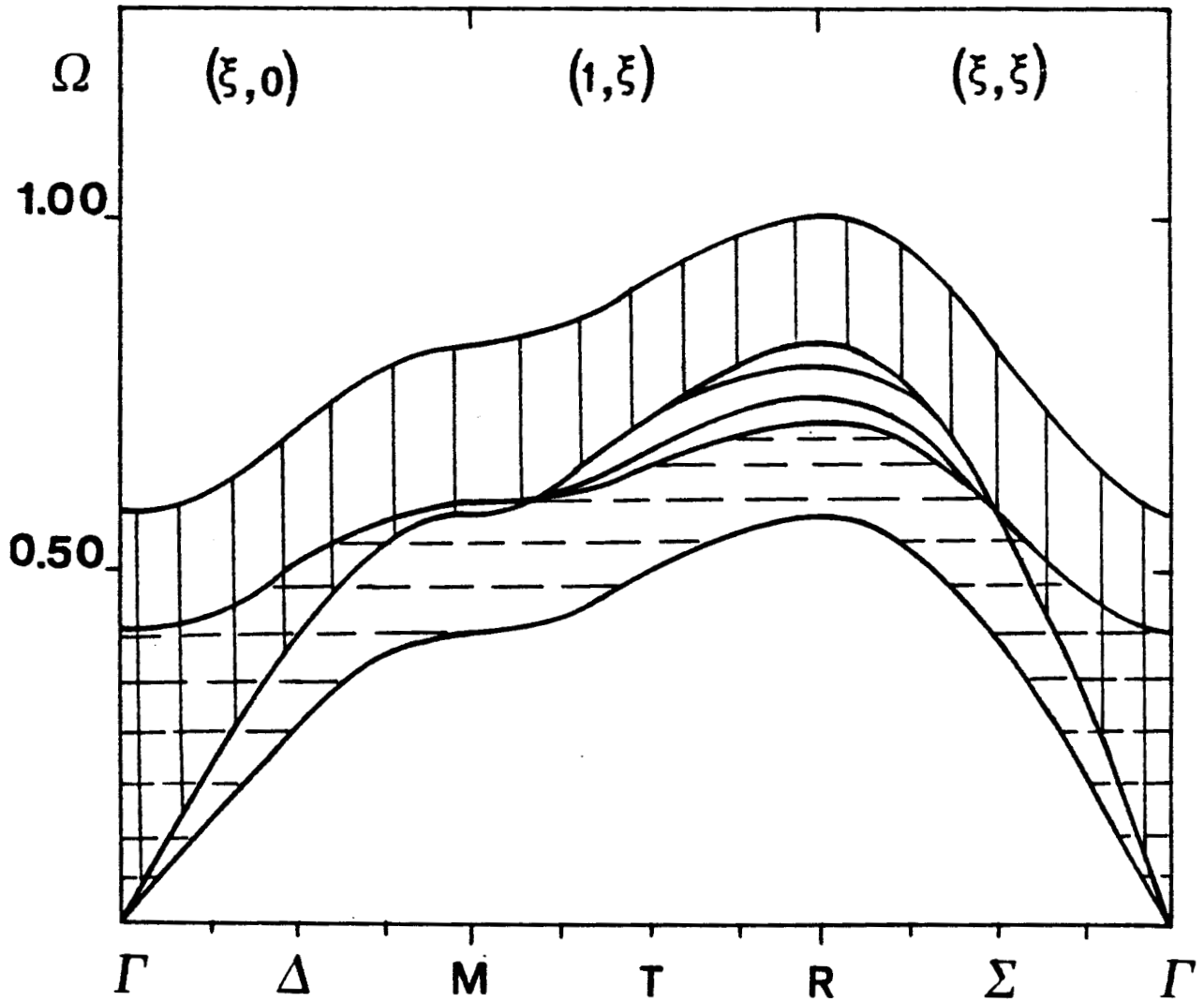


Fig. 3-6.4 : Deux courbes de dispersion des phonons de sandwich entre les bandes de volume des cristaux semi-infinis pour un sandwich avec trois plans atomiques :

$$\frac{m_1}{m_2} = 1.5 ; \frac{m_3}{m_2} = 2.0 ; \frac{\beta_1}{\beta_2} = 1.0 ; \frac{\beta_3}{\beta_2} = 1.0 ; \frac{\beta_I}{\beta_2} = 1.0 ; \frac{\beta_{II}}{\beta_2} = 1.0.$$



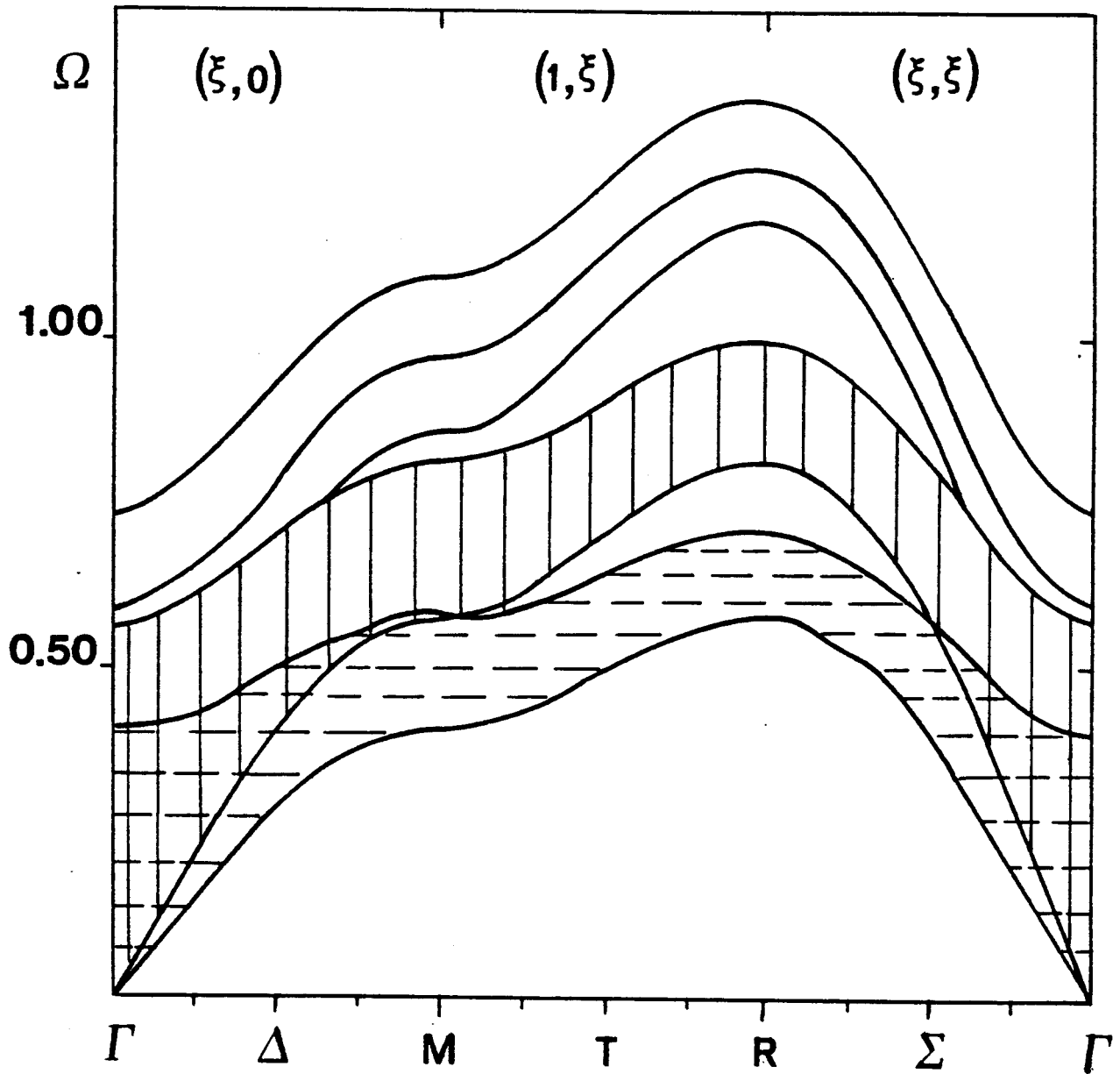


Fig. 3-6.5 : Trois courbes de dispersion des phonons de sandwich au dessus des bandes de volume des cristaux semi-infinis pour un sandwich avec trois plans atomiques :

$$\frac{m_1}{m_2} = 1.5 ; \frac{m_3}{m_2} = 2.0 ; \frac{\beta_1}{\beta_2} = 3.0 ; \frac{\beta_3}{\beta_2} = 1.0 ; \frac{\beta_I}{\beta_2} = 2.0 ; \frac{\beta_{II}}{\beta_2} = 1.0, L = 3.$$

3-6.4. Vecteurs propres [8, 11]

Pour obtenir les vecteurs propres du système sandwich, nous utilisons de nouveau les résultats (2-5.4) et (2-5.7). Pour des raisons de simplicité et d'utilité, nous ne donnerons ici que l'expression du vecteur propre correspondant aux états localisés donnés par les équations (3-6.9), pour le sandwich symétriques ( $\beta_I = \beta_{II}$ ,  $t_2 = t_3$ ,  $\beta_2 = \beta_3$ ). Dans ce cas ci, l'espace d'interface M étant formé par les sites  $n_3 = 0, 1, L$  et  $L+1$ , l'opérateur réponse d'interface s'écrit :

$$A(MD) = \frac{1}{\beta_2(t_2^2-1)} \cdot \begin{bmatrix} - [\beta_2(t_2-1) + \beta_I] \\ \frac{m_2 \beta_I}{m_1} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot t_2^{1-n'_3} \quad ; \quad n'_3 \leq 0$$

$$A(MD) = \frac{1}{\beta_1(t_1^2-1)} \cdot \begin{bmatrix} \frac{m_1 \beta_I}{m_2} \cdot t_1^{n'_3} \\ - [\beta_1(t_1-1) + \beta_I] \cdot t_1^{n'_3} \\ - [\beta_1(t_1-1) + \beta_I] \cdot t_1^{1+L-n'_3} \\ \frac{m_1 \beta_I}{m_2} \cdot t_1^{1+L-n'_3} \end{bmatrix} \quad ; \quad 1 \leq n'_3 \leq L$$

et

$$A(MD) = \frac{1}{\beta_3(t_3^2-1)} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{m_2 \beta_I}{m_1} \\ - [\beta_2(t_2-1) + \beta_I] \end{bmatrix} \cdot t_2^{n'_3-L} \quad ; \quad n'_3 \geq L + 1$$

En utilisant le vecteur propre de référence,

$$\langle U(M) | = (1, 0, 0, 0)$$

ou

$$\langle U(M) | = (0, 0, 0, t_3^{-(L+1)})$$

ou

$$\langle U(M) | = (0, t_1, t_1^L, 0)$$

ou

$$\langle U(M) | = (0, t_1^{-1}, t_1^{-L}, 0)$$

On trouve les expressions suivantes des vecteurs propres correspondants aux modes localisés symétriques et antisymétriques respectivement (pour le sandwich symétrique).

$$u(n'_3) = \begin{cases} Q(q_1, q_2) \cdot e^{q_2(1-n'_3)}, & n'_3 \leq 0 \\ \text{sh } q_1 \left( n'_3 - \frac{L+1}{2} \right) & 1 \leq n'_3 \leq L \\ Q(q_1, q_2) \cdot e^{q_2(n'_3-L)}, & n'_3 \geq L+1 \end{cases} \quad (3-6.11)$$

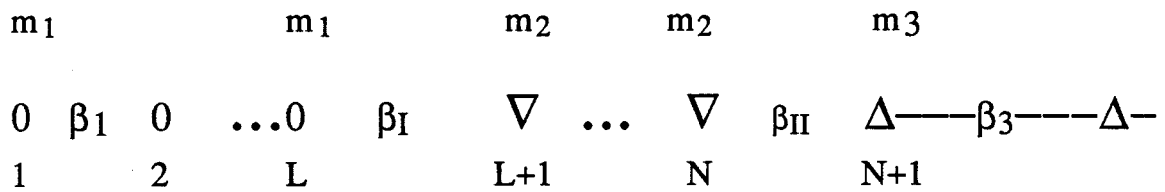
$$u(n'_3) = \begin{cases} - Q(q_1, q_2) e^{q_2(1-n'_3)}, & n'_3 \leq 0 \\ \text{sh } q_1 \left( n'_3 - \frac{L+1}{2} \right) & 1 \leq n'_3 \leq L \\ Q(q_1, q_2) \cdot e^{q_2(n'_3-L)}, & n'_3 \geq L+1 \end{cases} \quad (3-6.12)$$

avec,

$$Q(q_1, q_2) = \frac{m_2}{4m_1} \cdot \frac{\beta_1}{\beta_2} \cdot \frac{e^{-q_1} \cdot e^{-\frac{3q_2}{2}}}{\text{sh } q_2 \cdot \text{ch } \frac{q_2}{2}} \cdot \frac{\text{th } \frac{q_1}{2}}{\text{ch } \frac{q_1}{2}} \cdot \text{ch } \frac{q_1 L}{2} \quad (3-6.13)$$

3-7. ADSORPTION DE DEUX LAMES MINCES CRISTALLINES SUR UN SUBSTRAT.

Le système étudié ici est formé d'un cristal semi-infini ( $i = 3$ ) ou substrat sur lequel est déposée  $M = N - L$  couches atomiques d'un cristal fini ( $i = 2$ ) et  $L$  couches atomiques d'un autre cristal fini ( $i = 1$ ), (voir figure 3-7.1). Les interactions entre les atomes premiers voisins de la couche  $L$  et la couche  $L + 1$  sont notées par  $\beta_I$ , celles entre la couche  $N$  et la couche  $N+1$  par  $\beta_{II}$ .



**Fig. 3-7.1. Géométrie de deux lames minces adsorbées sur un cristal semi-infini**  $0, \nabla$  et  $\Delta$  **représentent des plans atomiques (001) des cristaux cubiques simples ;  $\beta_1, \beta_2$  et  $\beta_3$  représentant les interactions entre les atomes premiers voisins dans le volume des cristaux 1, 2 et 3 respectivement.  $\beta_I$  et  $\beta_{II}$  sont les interactions entre les atomes situés aux interfaces.**

3-7.1. Opérateur réponse d'interface

L'opérateur réponse d'interface est obtenu de la même façon que pour le système sandwich. Comme dans ce cas-ci l'espace des interfaces est formé par les sites  $n_3 = L, L+1, N$  et  $N+1$ , on a :

$$A(n_3, n'_3) = A_s(n_3, n'_3) + \sum_{n''_3} VI(n_3, n''_3) G(n''_3, n'_3) + \sum_{n'''_3} VII(n_3, n'''_3) G(n'''_3, n'_3),$$

avec,  $n''_3 = L, L+1$  et  $n'''_3 = N, N+1$ .

$\overleftrightarrow{V}_I$  et  $\overleftrightarrow{V}_{II}$  sont les opérateurs de couplage correspondant à ce problème. Ils s'expriment comme suit :

$$\overleftrightarrow{V}_I = \beta_I \begin{array}{c} \left[ \begin{array}{c|c} L & L+1 \\ \hline -\frac{1}{m_1} & \frac{1}{m_1} \\ \hline \frac{1}{m_2} & -\frac{1}{m_2} \end{array} \right] \begin{array}{l} L \\ L+1 \end{array} \end{array}$$

$$\overleftrightarrow{V}_{II} = \beta_{II} \begin{array}{c} \left[ \begin{array}{c|c} N & N+1 \\ \hline -\frac{1}{m_2} & \frac{1}{m_2} \\ \hline \frac{1}{m_3} & -\frac{1}{m_3} \end{array} \right] \begin{array}{l} N \\ N+1 \end{array} \end{array}$$

On a alors :

$$\begin{aligned} A(n_3, n'_3) = & A_s(n_3, n'_3) + \beta_I \left( \frac{\delta_{n_3 L}}{m_1} - \frac{\delta_{n_3 L+1}}{m_2} \right) \cdot (G_s(L+1, n'_3) - G_s(L, n'_3)) \\ & + \beta_{II} \left( \frac{\delta_{n_3 N}}{m_2} - \frac{\delta_{n_3, N+1}}{m_3} \right) \cdot (G_s(N+1, n'_3) - G_s(N, n'_3)) \end{aligned} \quad (3-7.1)$$

Les matrices  $\overleftrightarrow{A}_s$  et  $\overleftrightarrow{G}_s$  sont formées de trois blocs diagonaux et sont représentées comme suit,

$$\vec{A}_s = \begin{array}{c} \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & L & L+1 \quad N \quad N+1 \\ \hline \vec{A}_{s1} & \vec{0} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{A}_{s2} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{0} & \vec{A}_{s3} \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} 1 \\ L \\ L+1 \\ N \\ N+1 \end{array} \end{array}$$

$$\vec{G}_s = \begin{array}{c} \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & L & L+1 \quad N \quad N+1 \\ \hline \vec{G}_{s1} & \vec{0} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{G}_{s2} & \vec{0} \\ \hline \vec{0} & \vec{0} & \vec{G}_{s3} \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} 1 \\ L \\ L+1 \\ N \\ N+1 \end{array} \end{array}$$

A l'intérieur de la lame mince 1,

$$A_{s1}(n_3, n'_3) = - \frac{1}{t_{1+1}} \cdot (\delta_{n_3 1} \cdot t_1^{n'_3} + \delta_{n_3 L} t_1^{L+1-n'_3}), \quad 1 \leq n_3, n'_3 \leq L.$$

Dans la lame mince 2,

$$A_{s2}(n_3, n'_3) = - \frac{1}{t_{2+1}} (\delta_{n_3, L+1} t_2^{n'_3-L} + \delta_{n_3 N} t_2^{N+1-n'_3}), \quad (L+1) \leq n_3, n'_3 \leq N.$$

Enfin dans le cristal semi-infini 3,

$$A_{s3}(n_3, n'_3) = - (\delta_{n_3, N+1} \cdot \frac{t_3^{n'_3-N}}{t_{3+1}}), \quad n_3, n'_3 \geq N+1.$$

3.7-2. ETATS VIBRATIONNELS LOCALISES

La connaissance de l'opérateur réponse d'interface permet comme d'habitude de déterminer la matrice  $\overleftrightarrow{\Delta}(MM)$  (formule 2-4.9).

On trouve :

$$\overleftrightarrow{\Delta}(MM) = \begin{bmatrix} \frac{1}{t_1+1} ; & -\frac{t_1^L}{t_1+1} ; & 0 ; & 0 ; & 0 \\ -\frac{1 + \frac{\beta_I}{\beta_1(t_1-1)}}{t_1+1} t_1^L ; & \frac{1 - \frac{\beta_I t_1}{\beta_1(t_1-1)}}{t_1+1} ; & \frac{m_2 \beta_I t_2}{m_1 \beta_2(t_2^2-1)} ; & \frac{m_2 \beta_I t_2^{N-L}}{m_1 \beta_2(t_2^2-1)} ; & 0 \\ \frac{m_1 \beta_I t_1^L}{m_2 \beta_2(t_1^2-1)} ; & \frac{m_1 \beta_I t_1}{m_2 \beta_1(t_1^2-1)} ; & \frac{1 - \frac{\beta_I t_2}{\beta_2(t_2-1)}}{t_2+1} ; & -\frac{[1 + \frac{\beta_I}{\beta_2(t_2-1)}]}{t_2+1} t_2^{N-L} ; & 0 \\ 0 ; & 0 ; & -\frac{[1 + \frac{\beta_{II}}{\beta_2(t_2+1)}]}{t_2+1} t_2^{N-L} ; & \frac{1 - \frac{\beta_{II} t_2}{\beta_2(t_2-1)}}{t_2+1} ; & \frac{m_3 \beta_{II} t_3}{m_2 \beta_3(t_3^2-1)} \\ 0 ; & 0 ; & \frac{m_2 \beta_{II} t_2^{N-L}}{m_3 \beta_2(t_2^2-1)} ; & \frac{m_2 \beta_{II} t_2}{m_3 \beta_2(t_2^2-1)} ; & \frac{1 - \frac{\beta_{II} t_3}{\beta_3(t_3-1)}}{t_3+1} \end{bmatrix}$$

En dehors de la bande de volume, du substrat et des extrémités des bandes de volume des deux lames ( $t_2 = \pm 1$ ,  $t_1 = \pm 1$ ), les états vibrationnels localisés sont tels que , [16]

$$\det \overleftrightarrow{\Delta}(MM) = 0$$

ou (3-7.2)

$$\frac{(1 + \beta_I [ \frac{1}{\beta_2(t_2-1)} - \frac{t_1+t_1^{2L}}{\beta_1(t_1-1)(1-t_1^{2L})} ] ) t_2^{2M}}{1 - \beta_I [ \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} + \frac{t_1+t_1^{2L}}{\beta_1(t_1-1)(1-t_1^{2L})} ]} = \frac{1 - \beta_{II} [ \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} + \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} ]}{1 + \beta_{II} [ \frac{1}{\beta_2(t_2-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} ]}$$

Dans la zone de Brillouin à deux dimensions (fig. 3-6.2), les figures (3-7.2), (3-7.3) et (3-7.4) donnent les relations de dispersion pour les phonons localisés.  $\Omega$  est une fréquence réduite telle que :

$$\Omega = \frac{\omega}{\omega_{3\max}}$$

où 
$$\omega_{3\max} = 2 \left( \frac{\beta_3}{m_3} \right)^{1/2}$$

est la fréquence maximale de vibration des phonons du substrat. Les surfaces hachurées correspondent à la bande de volume du substrat.

La figure 3-7.2 montre quatre branches de phonons localisés en dessous de la bande de volume du substrat. Les deux branches les plus basses correspondent aux phonons localisés dans les deux couches atomiques du cristal 2 et les deux autres aux phonons localisés dans les deux couches atomiques du cristal 1.

La figure 3-7.3 montre quatre branches de phonons localisés au-dessus de la bande de volume du substrat. Les deux branches les plus hautes correspondent aux phonons localisés dans les deux couches atomiques du cristal 2 et les deux autres aux phonons localisés dans les deux couches atomiques du cristal 1. La figure 3-7.4 montre cinq branches de phonons localisés. Les deux branches situées au-dessus de la bande de volume du substrat correspondent aux phonons localisés dans les deux couches atomiques du cristal 1 et les trois autres aux phonons localisés dans les trois couches atomiques du cristal 2.

Ici aussi, la disposition de ces phonons localisés par rapport à la bande de volume du substrat ne dépend que des masses des atomes et des interactions atomiques entre ces derniers. Le nombre de branches obtenu dépend toujours du nombre de plans atomiques choisis dans les deux lames minces.



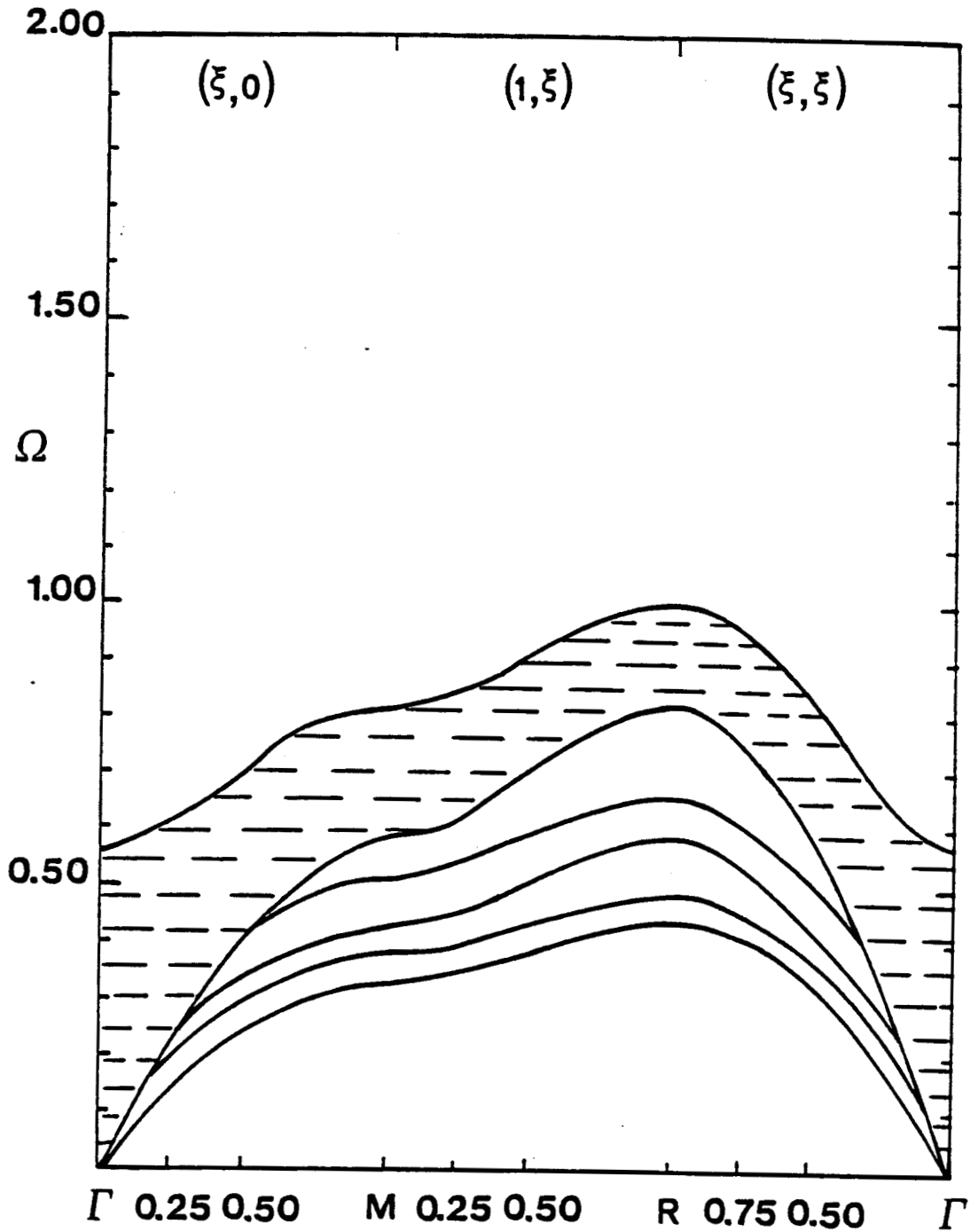


Fig. 3-7.2. : Quatre courbes de dispersion des phonons localisés (en dessous de la bande de volume du substrat) dans la zone de Brillouin à deux dimensions pour deux lames minces adsorbées.

$$\Omega = \frac{\omega}{\omega_{3\max}} ; \frac{m_1}{m_3} = 2.0 ; \frac{\beta_1}{\beta_3} = 1 ; L = 2.0 ; \frac{m_2}{m_3} = 1.5 ;$$

$$\frac{\beta_2}{\beta_3} = 0.37 ; M = N - L = 2.0 ; \frac{\beta_I}{\beta_3} = 0.68 ; \frac{\beta_{II}}{\beta_3} = 0.5$$

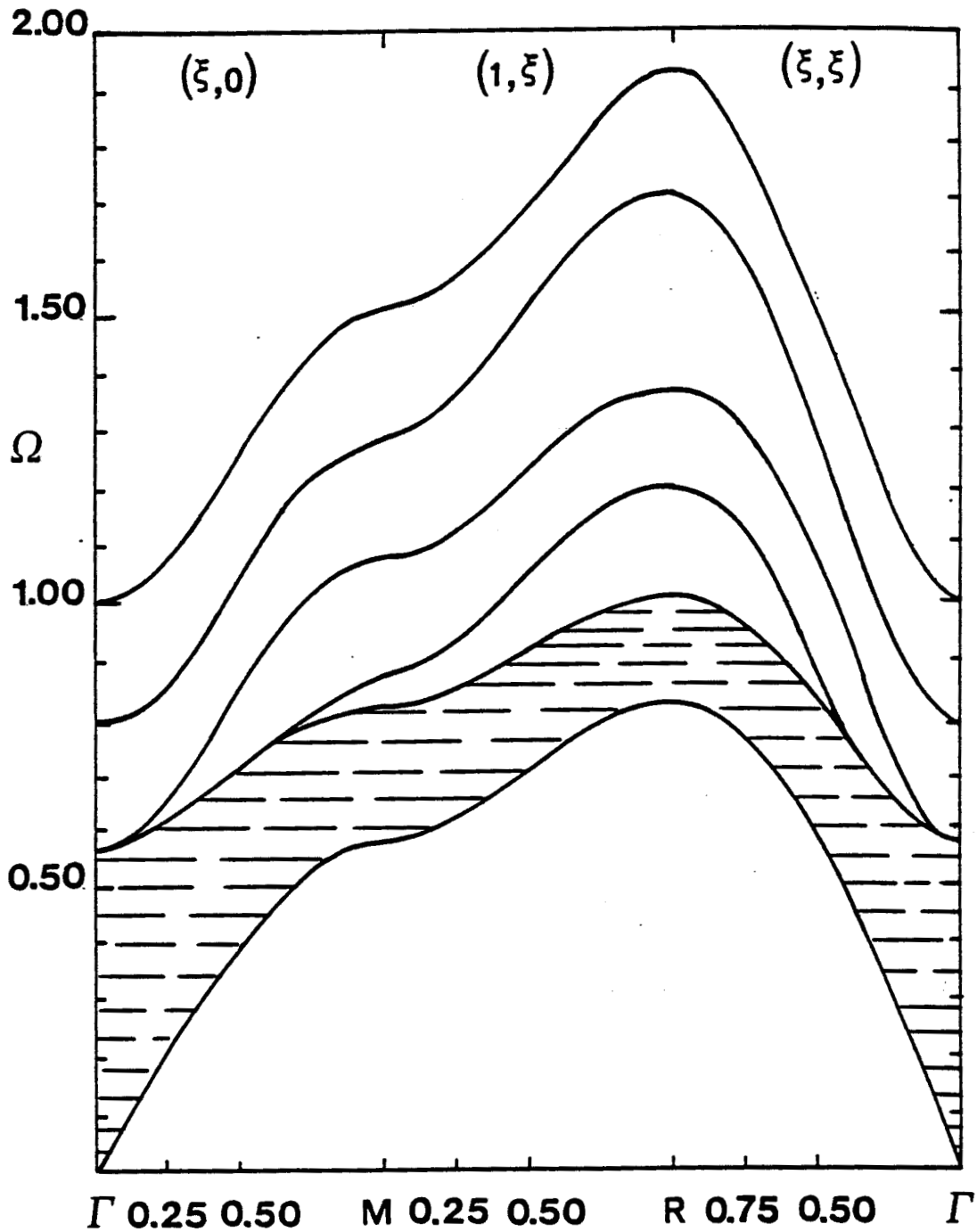


Fig. 3-7.3. : Quatre courbes de dispersion des phonons localisés (au dessus de la bande de volume du substrat) dans la zone de Brillouin à deux dimensions pour deux lames minces adsorbées.

$$\Omega = \frac{\omega}{\omega_{3\max}} ; \frac{m_1}{m_3} = 0.5 ; \frac{\beta_1}{\beta_3} = 1.0 ; L = 2.0 ; \frac{m_2}{m_3} = 0.75$$

$$\frac{\beta_2}{\beta_3} = 3.0 ; M = N - L = 2.0 ; \frac{\beta_I}{\beta_3} = 2.0 ; \frac{\beta_{II}}{\beta_3} = 2.0.$$

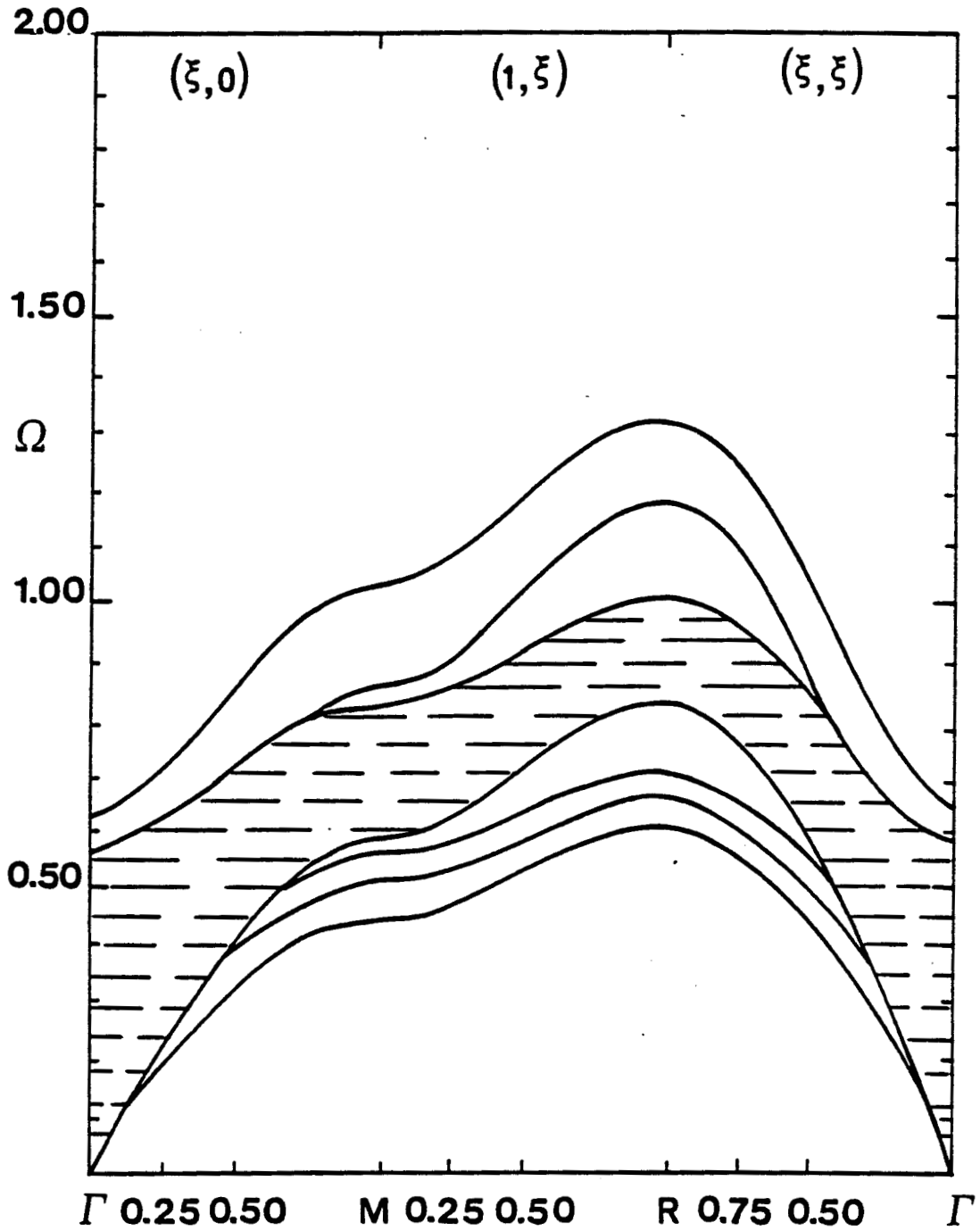


Fig. 3-7.4. : Cinq courbes de dispersion des phonons localisés dans la zone de Brillouin à deux dimensions pour deux lames minces adsorbées.

$$\Omega = \frac{\omega}{\omega_{3\max}} ; \frac{m_1}{m_3} = 0.5 ; \frac{\beta_1}{\beta_3} = 1 ; L = 2.0 ; \frac{m_2}{m_3} = 0.75 ;$$

$$\frac{\beta_2}{\beta_3} = 0.37 ; M = N - L = 3.0 ; \frac{\beta_I}{\beta_3} = 0.68 ; \frac{\beta_{II}}{\beta_3} = 0.5.$$

# **CONCLUSION**

Dans ce document sont représentés, dans une première partie, les fonctions réponses associées aux phonons dans un sandwich atomique [15]. La connaissance de ces fonctions réponses nous ont permis de déterminer les expressions analytiques pour les états vibrationnels localisés dans le sandwich. Nous avons considéré trois cas correspondant chacun à trois plans atomiques.

Le premier cas est représenté par les courbes de dispersion de la figure 3-6.3 qui montre que les paramètres choisis donnent trois branches de phonons de sandwich en dessous des bandes de volume des cristaux semi-infinis.

Dans le deuxième cas, figure 3-6.4, les paramètres choisis donnent deux branches qui apparaissent entre les bandes de volume des cristaux semi-infinis.

Dans le troisième cas, nous obtenons trois branches de phonons situées au-dessus des bandes de volume des deux cristaux semi-infinis, figure 3-6.5.

Enfin, dans une deuxième partie, nous présentons les courbes de dispersion des phonons dans deux lames minces déposées sur un cristal semi-infini (substrat). Les résultats sont présentés par les exemples suivants :

Dans le premier exemple, figure 3-7.2, nous avons quatre courbes de dispersion des phonons localisés en dessous de la bande de volume du substrat.

Dans le deuxième exemple, figure 3-7.3, il apparaît quatre courbes de dispersion des phonons localisés au dessus de la bande de volume du substrat.

Enfin, sur la figure 3-7.4, les paramètres choisis donnent cinq courbes de dispersion des phonons localisés dont deux sont situées au dessus de la bande de volume du substrat et trois en dessous.

Pour tous ces deux modèles étudiés (sandwich atomique et lames minces déposées sur un substrat) les calculs ont été effectués dans un premier temps en utilisant des chaînes linéaires. Par la suite, les résultats ont été facilement transposés à trois dimensions grâce au modèle de Montroll - Potts [9].

Notons que dans ce document, nous avons également présenté les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres pour un sandwich cristallin symétrique ainsi que pour des modèles étudiés auparavant : cristal avec surface libre, interface entre deux cristaux semi-infinis (ou finis) différents, adsorption d'une lame mince sur un substrat.

Les prolongements de ces études sont extrêmement nombreux et variés. Les premières études des magnons [17] et des électrons [18] de sandwich sont apparues et celles sur les polaritons de sandwich sont en cours. Des études ont été également entreprises sur les phonons optiques de surface en considérant des modèles plus réalistes tels que les cristaux ioniques [19]. Nous y avons contribué en étudiant les états localisés vibrationnels dans un cas particulier de cristal à deux atomes par maille élémentaire [20].

# **ANNEXE**

**I. Expressions des éléments matriciels de  $\hat{\Delta}^{-1}(MM)$  dans le cas de l'interface entre deux lames minces cristallines**

$$\Delta^{-1}(11) = \frac{\left\{ 1 - \beta_1 \left[ \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} + \frac{t_2+t_2^2M}{\beta_2(t_2-1)(1-t_2^2M)} \right] \right\} (1-t_2^2M)}{W(t_1+1)(t_2+1)^2} ; \quad \Delta^{-1}(1L) = \frac{\left\{ 1 - \frac{\beta_1(t_2+t_2^2M)}{\beta_2(t_2-1)(1-t_2^2M)} \right\} t_1 L (1-t_2^2M)}{W(t_1+1)(t_2+1)^2}$$

$$\Delta^{-1}(1L+1) = - \frac{m_2 \beta_1 t_1 L (t_2+t_2^2M)}{W m_1 \beta_2 (t_1+1)(t_2+1)^2 (t_2-1)} ; \quad \Delta^{-1}(1N) = - \frac{m_2 \beta_1 t_1 L t_2^2 M}{W m_1 \beta_2 (t_1+1)(t_2^2-1)}$$

$$\Delta^{-1}(L,1) = \frac{\left\{ 1 + \beta_1 \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_2+t_2^2M}{\beta_2(t_2-1)(1-t_2^2M)} \right] \right\} (1-t_2^2M) t_1 L}{W(t_1+1)(t_2+1)^2} ; \quad \Delta^{-1}(L,L) = \frac{\left\{ 1 - \frac{\beta_1(t_2+t_2^2M)}{\beta_2(t_2-1)(1-t_2^2M)} \right\} (1-t_2^2M)}{W(t_1+1)(t_2+1)^2}$$

$$\Delta^{-1}(L,L+1) = - \frac{m_2 \beta_1 (t_2+t_2^2M)}{W m_1 \beta_2 (t_1+1)(t_2-1)(t_2+1)^2} ; \quad \Delta^{-1}(L,N) = - \frac{m_2 \beta_1 t_2^2 M}{W m_1 \beta_2 (t_1+1)(t_2^2-1)}$$

$$\Delta^{-1}(L+1,1) = - \frac{m_1 \beta_1 t_1 L}{W m_2 \beta_1 (t_2+1)(t_1^2-1)} ; \quad \Delta^{-1}(L+1,L) = - \frac{m_1 \beta_1 (t_1+t_1 L)}{W m_2 \beta_1 (t_2+1)(t_1+1)^2 (t_1-1)}$$



$$\Delta^{-1}(L+1, L+1) = \frac{\left\{ 1 - \frac{\beta_I (t_1 + t_1^{2L})}{\beta_1 (t_1 - 1)(1 - t_1^{2L})} \right\} (1 - t_1^{2L})}{W(t_2 + 1)(t_1 + 1)^2} ; \quad \Delta^{-1}(L+1, N) = \frac{\left\{ 1 + \beta_I \left[ \frac{1}{\beta_1 (t_1 - 1)} - \frac{t_1 + t_1^{2L}}{\beta_1 (t_1 - 1)(1 - t_1^{2L})} \right] \right\} t_2^M (1 - t_1^{2L})}{W(t_2 + 1)(t_1 + 1)^2}$$

$$\Delta^{-1}(N, 1) = - \frac{m_1 \beta_I t_1^L t_2^M}{W m_2 \beta_1 (t_2 + 1)(t_1^{2-1})} ; \quad \Delta^{-1}(N, L) = - \frac{m_1 \beta_I (t_1 + t_1^{2L}) t_2^M}{W m_2 \beta_1 (t_2 + 1)(t_1^{2-1})}$$

$$\Delta^{-1}(N, L+1) = \frac{\left\{ 1 - \frac{\beta_I (t_1 + t_1^{2L})}{\beta_1 (t_1 - 1)(1 - t_1^{2L})} \right\} t_2^M (1 - t_1^{2L})}{W(t_2 + 1)(t_1 + 1)^2} ; \quad \Delta^{-1}(N, N) = \frac{\left\{ 1 - \beta_I \left[ \frac{t_2}{\beta_2 (t_2 - 1)} + \frac{t_1 + t_1^{2L}}{\beta_1 (t_1 - 1)(1 - t_1^{2L})} \right] \right\} (1 - t_1^{2L})}{W(t_2 + 1)(t_1 + 1)^2}$$

**II Expression des éléments matriciels de  $\vec{\Delta}^{-1}(MM)$  dans le cas du sandwich atomique.**

$$\Delta^{-1}(0, 0) = \frac{-1 + t_1(1 - \frac{\beta_I}{\beta_1})}{(t_1^{2-1}) W^3} \left\{ \frac{1 - \beta_{II} \left[ \frac{t_1}{\beta_1 (t_1 - 1)} + \frac{t_3}{\beta_3 (t_3 - 1)} \right]}{(t_1 + 1)(t_3 + 1)} \right\} + \frac{1 - t_1 - \frac{\beta_I}{\beta_1}}{(t_1^{2-1}) W^3} \left\{ \frac{1 + \beta_{II} \left[ \frac{1}{\beta_1 (t_1 - 1)} - \frac{t_3}{\beta_3 (t_3 - 1)} \right]}{(t_1 + 1)(t_3 + 1)} \right\} t_1^{2L}$$

$$\Delta^{-1}(0, 1) = \frac{m_1}{m_2} \left\{ \frac{\beta_{II} t_1}{\beta_1 (t_1^{2-1})} \left[ \frac{1 - \beta_{II} \left[ \frac{t_1}{\beta_1 (t_1 - 1)} + \frac{t_3}{\beta_3 (t_3 - 1)} \right]}{(t_1 + 1)(t_3 + 1)} \right] - \frac{\beta_I t_1^{2L}}{\beta_1 (t_1^{2-1})} \left[ \frac{1 + \beta_{II} \left[ \frac{1}{\beta_1 (t_1 - 1)} - \frac{t_3}{\beta_3 (t_3 - 1)} \right]}{(t_1 + 1)(t_3 + 1)} \right] \right\} \frac{1}{W^3}$$

$$\Delta^{-1}(0,L) = -\frac{-1 + t_3(1 - \frac{\beta_{II}}{\beta_3})}{(t_3-1) W'_3} \frac{m_1}{m_2} \frac{\beta_I}{\beta_1} \frac{t_1 L}{t_2-1}$$

$$\Delta^{-1}(0,L+1) = \frac{\beta_{II}}{W'_3 \beta_3} \frac{m_3}{m_2} \frac{\beta_I}{\beta_1} \frac{t_3}{t_3-1} \frac{t_1 L}{t_2-1}$$

$$\Delta^{-1}(1,0) = -\frac{m_2}{m_1 W'_3} \frac{\beta_I}{\beta_2} \frac{t_2}{t_2-1} \left\{ \frac{1-\beta_{II}}{(t_1+1)(t_3+1)} \left[ \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} + \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right] \right\}$$

$$\Delta^{-1}(1,1) = -\frac{-1 + t_2(1 - \frac{\beta_I}{\beta_2})}{W'_3(t_2-1)} \left\{ \frac{1-\beta_{II}}{(t_1+1)(t_3+1)} \left[ \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} + \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right] \right\}$$

$$\Delta^{-1}(1,L) = \frac{-1 + t_3(1 - \frac{\beta_{II}}{\beta_3})}{W'_3 (t_3-1)} \left\{ \frac{1+\beta_I}{(t_1+1)(t_2+1)} \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right] \right\} t_1 L$$

$$\Delta^{-1}(1,L+1) = \frac{m_3}{m_1} \frac{\beta_{II}}{w'_{3}} \frac{t_3}{\beta_3} \frac{1}{t_{3-1}} \left\{ \frac{1+\beta_I \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right]}{(t_1+1)(t_2+1)} \right\} t_1^L$$

$$\Delta^{-1}(L,0) = -\frac{m_2}{m_1} \frac{\beta_I}{\beta_2} \frac{t_2}{t_{2-1}} \frac{1}{w'_{3}} \left\{ \frac{1+\beta_{II} \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right]}{(t_1+1)(t_3+1)} \right\} t_1^L$$

$$\Delta^{-1}(L,1) = \frac{-1+t_2(1-\frac{\beta_I}{\beta_2})}{w'_{3}(t_{2-1})} \left\{ \frac{1+\beta_{II} \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_3}{\beta_3(t_3-1)} \right]}{(t_1+1)(t_3+1)} \right\} t_1^L$$

$$\Delta^{-1}(L,L) = \frac{-1+t_3(1-\frac{\beta_{II}}{\beta_3})}{w'_{3}(t_{3-1})} \left\{ \frac{1-\beta_{II} \left[ \frac{1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right]}{(t_1+1)(t_2+1)} \right\}$$

$$\Delta^{-1}(L,L+1) = -\frac{m_3}{m_1} \frac{\beta_{II}}{\beta_3} \frac{t_3}{(t_{3-1})} \frac{1}{w'_{3}} \left\{ \frac{1-\beta_I \left[ \frac{t_1}{\beta_1(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right]}{(t_1+1)(t_2+1)} \right\}$$

$$\Delta^{-1}(L+1,0) = \frac{m_2}{m_3 w'_{3}} \frac{\beta_I}{\beta_2} \frac{\beta_{II}}{\beta_1} \frac{t_2}{t_{2-1}} \frac{t_1^L}{t_{1-1}}$$

$$\Delta^{-1}(L+1,1) = \frac{-1 + t_2(1 - \frac{\beta_I}{\beta_2})}{W'_3(t_2^2-1)} \quad \frac{m_1}{m_3} \quad \frac{\beta_{II}}{\beta_I} \quad \frac{t_1^L}{t_1^2-1}$$

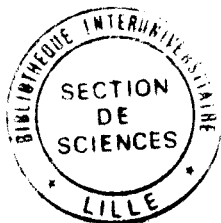
$$\Delta^{-1}(L+1,L) = \frac{m_1}{m_3} \frac{1}{W'_3} \left[ -\frac{\beta_{II} t_1}{\beta_I(t_1^2-1)} \left\{ \frac{1-\beta_I \left[ \frac{t_1}{\beta_I(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right]}{(t_1+1)(t_2+1)} \right\} - \frac{\beta_{II} t_1^2 L}{\beta_I(t_1^2-1)} \left\{ \frac{1+\beta_I \left[ \frac{1}{\beta_I(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right]}{(t_1+1)(t_2+1)} \right\} \right]$$

$$\Delta^{-1}(L+1,L+1) = \frac{-1 + t_1(1 - \frac{\beta_{II}}{\beta_I})}{W'_3(t_1^2-1)} \left\{ \frac{1-\beta_I \left[ \frac{t_1}{\beta_I(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right]}{(t_1+1)(t_2+1)} \right\} + \frac{1 - t_1 - \frac{\beta_{II}}{\beta_I}}{W'_3(t_1^2-1)} \left\{ \frac{1+\beta_I \left[ \frac{1}{\beta_I(t_1-1)} - \frac{t_2}{\beta_2(t_2-1)} \right]}{(t_1+1)(t_2+1)} \right\} t_1^{2L}$$

# REFERENCES

- 1 - L. DOBRZYNSKI  
Surface Science Reports 6, n° 3 (1986) 119-157.
- 2 - L. DOBRZYNSKI  
Surface Science, 180 (1987) 489.
- 3 - A A. MARADUDIN, R F. WALLIS and L. DOBRZYNSKI  
Handbook of Surfaces and Interfaces volume 3  
Surface Phonons and Polaritons.  
GARLAND STPM PRESS, New York and London.
- 4 - L. DOBRZYNSKI, V.R. VELASCO and F. GARCIA MOLINER  
Physical Review B, n°11 35 (1987) 5872-5875.
- 5 - L. DOBRZYNSKI  
Surface Science, 200 (1988) 435.
- 6 - L. DOBRZYNSKI  
Surface Science, 175 (1986) 1-8.
- 7 - A. AKJOUJ, L. DOBRZYNSKI and C. OLEKSY  
Surface Science 213, (1989) 630.
- 8 - L. DOBRZYNSKI and H. PUSZKARSKI  
J. of Physics Condens. Matter 1 (1989) 1239-1245.
- 9 - E.N. MONTROLL and R.B. POTTS  
Physical Review 102 (1956) 72.
- 10 - H.I. ZHANG, K.H. LEE and M.H. LEE  
J. Physics C : Solid State Phys. 19, (1986) 699-708.
- 11 - B. SYLLA, L. DOBRZYNSKI et H. PUSZKARSKI  
J. of Physics Condens. Matter 1 (1986) 1247-1252.

- 12 - H. PUSZKARSKI  
Acta Physica. Polonica A 74 (1988) 701.
- 13 - P. MASRI  
Surface Science 99 (1980) 714-733.
- 14 - H. PUSKARSKI  
Surface Science 34 (1973) 125-135.
- 15 - A. AKJOUJ, B. SYLLA, P. ZIELINSKI and L. DOBRZYNSKI  
J. of physics C, 20 (1987) 6201.
- 16 - B. SYLLA, M. MORE and L. DOBRZYNSKI  
Surface Science 213 (1989) 588-593.
- 17 - A. AKJOUJ, B. SYLLA, P. ZIELINSKI and L. DOBRZYNSKI,  
Physical Review B, volume 37, 10 (1988) 5670-5676.
- 18 - A. AKJOUJ, P. ZIELINSKI and L. DOBRZYNSKI  
J. Physics C : Solid State Phys. 20 (1987) 6201.
- 19 - D. CASSTIEL, L. DOBRZYNSKI and D. SPANJAARD,  
Surface Science 59 (1976) 252-278.
- 20 - A. JBARA, A. AKJOUJ, B. SYLLA and L. DOBRZYNSKI,  
Proceedings of the Third International Conference on phonons  
Physics, volume 2.  
HEIDELBERG, Federal Republic of GERMANY  
August 21-25 (1989) 980-982.



## Résumé

---

Ce travail a pour objet l'étude des propriétés vibrationnelles des cristaux composites en utilisant comme méthode la théorie de réponse d'interface. Les cristaux composites avec une ou deux interfaces étudiés ici sont formés :

- d'une lame mince déposée au bout d'un cristal semi-infini,
- de deux lames minces différentes assemblées,
- d'une lame mince déposée entre deux cristaux semi-infinis (système sandwich),
- et de deux lames minces déposées sur un substrat.

Dans une première étape la théorie a été développée sur des modèles de chaînes linéaires. Par la suite, les différents résultats obtenus dans le cas unidimensionnel ont été facilement transposés à trois dimensions à l'aide d'un modèle simple.

La connaissance des expressions analytiques des fonctions réponses associées à de tels systèmes composites permet d'étudier leurs propriétés vibrationnelles.

Deux applications pour les états localisés vibrationnels dans les lames minces, ainsi que les valeurs propres et les vecteurs propres correspondants sont donnés dans ce document.

D'une part, on montre par des calculs numériques, l'apparition de ces phonons localisés à l'intérieur de la lame mince prise en sandwich entre deux autres cristaux semi-infinis. D'autre part, le même type de calcul montre l'apparition de phonons localisés à l'intérieur de deux lames minces adsorbées sur un substrat. Notons que dans les deux cas, en fonction des paramètres choisis, ces modes localisés apparaissent soit au dessus soit en dessous des bandes de volume des cristaux semi-infinis. Dans le cas du système sandwich, ils apparaissent également entre les bandes de volume des deux substrats.

---

### Mots clés

- \* Surface
- \* Interface
- \* Adsorption
- \* Phonons
- \* Sandwich
- \* Substrat

