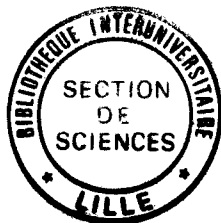


50376  
1991  
274



66338

50376  
1991  
274

THESE

présentée

à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES  
DE LILLE FLANDRES ARTOIS

LE GRADE DE DOCTEUR DE L'UNIVERSITE  
sciences des matériaux

par

ABDELKHALEK JBARA

ETATS ELECTRONIQUES LOCALISES ET PHONONS LOCALISES  
DANS CERTAINES STRUCTURES LAMELLAIRES

soutenue le 20 / 11 / 1991 devant la commission d'examen :

HUBERT FONTAINE , professeur à l'université de Lille I , Président  
ANTOINE KHATER , professeur à l'université du Maine , Rapporteur  
B.DJAFARI ROUHANI , professeur à l'université de Lille I , Rapporteur  
LEONARD DOBRZYNSKI , directeur de recherches C.N.R.S , directeur de thèse

A ma femme

A ma famille

## REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier Monsieur L.Dobrzynski pour sa patience , sa disponibilité et ses précieux conseils .

Je remercie également Messieurs R.Fouret et H.Fontaine de m'avoir accueilli dans le laboratoire de dynamique des cristaux moléculaires .

## SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE .....	1
CHAPITRE 1 : PUIITS QUANTIQUE A SEMICONDUCTEURS	
INTRDUCTION.....	3
I - MODELE .....	4
II - FONCTION REPOSE EN VOLUME .....	5
III - FONCTION REPOSE D'UN SEMICONDUCTEUR SEMI-INFINI .....	9
1 - Opérateur de clivage .....	9
2 - Opérateur réponse .....	10
3 - Fonction réponse du semiconducteur semi-infini .....	14
IV - OPERATEUR REPOSE DE SURFACE ET FONCTION REPOSE DE SURFACE D'UN SEMICONDUCTEUR AVEC DEUX SURFACES LIBRES .....	15
1 - Opérateur réponse de surface .....	15
2 - Fonction réponse de surface .....	18
V - PUIITS QUANTIQUE DE SEMICONDUCTEURS .....	20
1 - Fonction réponse du puits quantique .....	20
2 - Alignement des énergies de Fermi .....	25
3 - Etats électroniques localisés .....	26
4 - Résultats et discussion .....	28

CHAPITRE 2 : ETUDE DES SYSTEMES SEMICONDUCTEURS/VIDE

I - THEORIE DE REPONSE D'INTERFACE DES SYSTEMES COMPOSITES MIXTES..34

II - FONCTION REPONSE DE SURFACE D'UN SEMICONDUCTEUR SEMI-INFINI...35

III - FONCTION REPONSE DE SURFACE DU VIDE .....36

IV - ETUDE D'UNE INTERFACE SEMICONDUCTEUR/VIDE .....37

V - ETUDE DU SYSTEME SEMICONDUCTEUR/VIDE/SEMICONDUCTEUR .....38

VI - ALIGNEMENT DES ENERGIES DE FERMI ET DU NIVEAU  
D'ENERGIE DU VIDE .....41

VII - RESULTATS ET DISCUSSION .....42

CHAPITRE 3 : ETUDE DE LA JONCTION METAL/SEMICONDUCTEUR

I - INTRODUCTION .....48

II - SYSTEME METAL/SEMICONDUCTEUR/METAL .....51

1 - Modèle .....51-

2 - Fonction réponse de référence .....51-

3 - Opérateur réponse de surface .....52

4 - Opérateur réponse d'interface .....53

5 - Fonction réponse et états localisés du système .....55

III - ADSORPTION D'UN FILM METALLIQUE SUR UN SEMICONDUCTEUR  
SEMI-INFINI .....56

IV - ETUDE DU SYSTEME SEMICONDUCTEUR/METAL/SEMICONDUCTEUR .....58

V - RESULTATS ET DISCUSSION .....	61
CHAPITRE 4 : PHONONS DE SANDWICH POUR DES CRISTAUX CUBIQUES CENTRES	
I - INTRODUCTION .....	68-
II - MODELE DE PHONONS EN VOLUME ET FONCTION REPONSE .....	68-
1 - Description du modèle .....	68-
2 - Fonction réponse en volume .....	70
III - OPERATEUR DE CLIVAGE ET OPERATEUR REPONSE D'UN CRISTAL SEMI-INFINI .....	74
1 - Opérateur de clivage .....	74
2 - Opérateur réponse .....	75
IV - OPERATEUR DE CLIVAGE ET OPERATEUR REPONSE D'UN CRISTAL AVEC DEUX SURFACES LIBRES .....	77
V - PHONONS DE SANDWICH .....	79
1 - Opérateur de couplage et opérateur réponse d'interface....	79
2 - Phonons localisés .....	83
3 - Resultats .....	84

CHAPITRE 5 : PHONONS DE SANDWICH POUR DES CRISTAUX  
BIATOMIQUES (TYPE CsCl)

I - INTRODUCTION .....	89
II - MODELE DE PHONONS EN VOLUME ET FONCTION REPOSE .....	89
III - OBTENTION DU CRISTAL SEMI-INFINI ET D'UNE LAME MINCE .....	93
1 - Cristal semi-infini .....	93
2 - Lame mince .....	95
IV - PHONONS DE SANDWICH .....	97
CONCLUSION GENERALE .....	99
BIBLIOGRAPHIE.....	100
APPENDICE .....	104

## INTRODUCTION GENERALE

Les propriétés électroniques et vibrationnelles des systèmes composites sont d'un grand intérêt technologique et théorique . La connaissance de ces propriétés permettent , dans le domaine de l'électronique par exemple , la fabrication de composants plus rapides et plus performants ou encore , l'étude de l'établissement d'une barrière schottky .

Les nouvelles techniques de croissance telles que l'épitaxie par jets moléculaire ou le dépôt en phase vapeur permettent d'obtenir des surfaces qui peuvent être considérées comme abruptes . Ainsi il devient possible de faire l'étude théorique des propriétés électroniques et vibrationnelles des systèmes composites en utilisant des modèles simples .

Dans ce contexte nous abordons deux axes de recherche :

- étude des propriétés électroniques , des systèmes composites à semiconducteurs (puits quantique) , des structures semiconducteur/vide , des hétérostructures métal/semiconducteur .

- étude des modes de phonons localisés dans des sandwichs de cristaux cubiques centrés monoatomiques et biatomiques .

Le plan de la thèse est alors le suivant . Dans le premier chapitre nous présentons le modèle utilisé et brièvement la théorie de réponse d'interface [1] et débouche sur l'obtention



états électroniques localisés et des fonctions réponse d'un puits quantique de semiconducteurs . Dans le second chapitre nous présentons l'étude des systèmes composites semiconducteur/vide . Dans le troisième chapitre nous abordons les hétérostructures métal/semiconducteur telles que métal/semiconducteur/métal , semiconducteur/métal/semioconducteur , un film métallique déposé sur un semiconducteur semi-infini et un film de semiconducteur déposé au bout d'un métal semi-infini . Dans le quatrième chapitre nous présentons l'étude des modes de phonons localisés ,optiques ou acoustiques , dans des systèmes composites formés de cristaux cubiques centrés monoatomiques .Dans le cinquième chapitre nous présentons l'étude des modes de phonons localisés ,optiques ou acoustiques , dans des systèmes composites formés de cristaux cubiques centrés biatomiques .

# **chapitre 1**

## **puits quantique à semiconducteurs**

## INTRODUCTION

Le champ des applications des systèmes composites à semiconducteurs est très vaste . Ils sont , par exemple , utilisés pour la fabrication de composants hyperfréquence (diode Gunn) ou encore des composants plus rapides c'est-à-dire des composants qui puissent transporter le maximum d'informations possible en un minimum de temps , tels les circuits numériques qui permettent d'envisager des calculateurs plus rapides . Il est donc important de repertorier et de comprendre les phénomènes qui influent sur le transport électronique [2 - 6]

Ainsi , nous allons étudier l'apparition des états électroniques localisés dans de tels systèmes composites . Ces états peuvent être considérés comme des guides d'ondes électroniques , c'est-à-dire , que si on excite un électron et on lui donne une énergie  $E$  et un vecteur d'onde  $\vec{k}$  correspondant à un état localisé , alors cet électron pourra se propager dans le système composite . En outre ces états peuvent servir de centres de recombinaison et de pièges à électrons .

A l'aide de la théorie de réponse d'interface [1] on détermine ces états électroniques localisés .

## I - MODELE

Dans le cadre de l'approximation en liaisons fortes , le modèle utilisé est celui du cristal cubique centré à deux bandes  $s$  non dégénérées (type CsCl) , c'est-à-dire que l'on ne considère qu'une orbitale  $s$  par atome . Un tel modèle est suffisant pour décrire les bandes du semiconducteur près du gap , en l'occurrence la plus haute bande de valence et la plus basse bande de conduction . Il décrit bien la structure de bandes du semiconducteur au centre de la zone de Brillouin , en outre , il nous permet d'explorer la région située à l'extrémité de la zone et d'en déduire une description qualitative , en cette région , de la structure de bandes et des états localisés . L'intérêt d'un tel modèle est d'obtenir des résultats analytiques applicables à tout type de puits quantique à semiconducteurs . Il a été développé pour l'étude des surfaces des semiconducteurs [7] et des superréseaux [8] , [9]

## II - FONCTIONS REPONSE EN VOLUME

Considérons un cristal de structure cubique centrée du type CsCl .

L'Hamiltonien mono-électronique décrivant le semiconducteur i est

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \sum_l \sum_{\beta} U(\vec{r} - \vec{x}(l\beta)) \quad (1)$$

$\beta = 1$  ou  $2$  pour les deux types d'atomes de la maille élémentaire  $l$ .

$\vec{x}(l\beta)$  est la position de l'atome  $\beta$  se trouvant dans la maille élémentaire  $l$  .

$\vec{r}$  et  $m$  sont respectivement la position et la masse de l'électron .

$U$  est l'énergie potentielle d'interaction électron-ion centrée sur chaque site atomique . Les interactions électron-électron sont négligées .

La solution de l'équation de Schrödinger ,  $H_0 \Psi(\vec{r}) = E_i \Psi(\vec{r})$  , a la forme

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_l \sum_{\beta} C_{l\beta} \Phi(\vec{r} - \vec{x}(l\beta)) \quad (2)$$

où  $\Phi$  est l'orbitale atomique de l'atome libre et centrée sur le site  $(l\beta)$  .

Dans le cadre du modèle à deux bandes s on ne considèrera qu'une orbitale S pour chaque atome .

A partir de l'équation de Schrödinger et de l'équation (2) on obtient les relations suivantes

$$\sum_l \sum_{\beta} \langle l'\beta' | H_0 | l\beta \rangle C_{l\beta} = E_i C_{l'\beta'} \quad , \quad (3)$$

$$\langle l'\beta' | l\beta \rangle = \delta_{l'l'} \delta_{\beta\beta'} \quad , \quad (4)$$

$$|l\beta\rangle = \Phi(\vec{r} - \vec{x}(l\beta)) \quad , \quad (5)$$

$$\langle 1\beta | H_0 | 1\beta \rangle = E_\beta(i) \quad \beta = 1 \text{ ou } 2, \quad (6)$$

$E_1(i)$  et  $E_2(i)$  sont les énergies des orbitales S des atomes libres .  
 Dans la mesure où on ne tient compte que des interactions entre atomes premiers voisins , les seuls éléments matriciels non nuls sont de la forme :

$$\langle 11 | H_0 | 12 \rangle = \gamma_i, \quad (7)$$

Les fonctions d'ondes prennent la forme d'ondes de Bloch [10] si on impose la relation :

$$C_{1\beta} = \sqrt{N} w(\beta | \vec{k}_j) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}(1\beta)) ; j = 1 \text{ ou } 2, \quad (8)$$

où ,

$N$  est le nombre de mailles élémentaires dans le cristal ,  $\vec{k}$  est le vecteur d'onde et  $j$  est l'indice de la bande (conduction ou valence) .

En remplaçant  $C_{1\beta}$  dans l'équation (3) par sa valeur donnée par l'équation (8) on obtient une matrice carrée (2x2) dont l'annulation du déterminant donne les bandes d'énergie en volume :

$$E_i = \frac{1}{2} ( E_1(i) + E_2(i) ) \pm \frac{1}{2} [ (E_1(i) - E_2(i))^2 + 256\gamma_i^2 f^2(\phi) ]^{1/2}, \quad (9)$$

avec ,

$$f(\phi) = \cos(\phi_1/2) \cos(\phi_2/2) \cos(\phi_3/2), \quad (10)$$

$$\vec{\phi} = a_0 \cdot \vec{k} \quad (11)$$

$a_0$  est le paramètre de la maille .

$k_1, k_2, k_3$  sont les trois composantes du vecteur de propagation  $\vec{k}$  .

La fonction réponse en volume a déjà été obtenue auparavant [7] à l'aide du modèle à deux bandes s. Elle est définie par la relation

$$[(E + i\epsilon) \overleftrightarrow{I} - \overleftrightarrow{H}_0] \overleftrightarrow{G}_{oi} = \overleftrightarrow{I} \quad (12)$$

où  $\overleftrightarrow{I}$  est la matrice identité et  $\epsilon$  un infiniment petit. On posera pour la suite des calculs  $\overleftrightarrow{H}_{oi} = (E + i\epsilon) \overleftrightarrow{I} - \overleftrightarrow{H}_0$ . Après une transformée de Fourier partielle on obtient la fonction réponse du semiconducteur infini  $\overleftrightarrow{G}_{oi}$  dont les éléments matriciels non nuls sont donnés par les relations suivantes :

$$G_{oi}(1_s 1, 1'_s 1; E, k_{//}) = 2a_i P_i t_i \frac{|1_s - 1'_s| + 1}{|1_s - 1'_s| + 1} \quad (13)$$

$$G_{oi}(1_s 2, 1'_s 2; E, k_{//}) = 2d_i P_i t_i \frac{|1_s - 1'_s| + 1}{|1_s - 1'_s| + 1} \quad (14)$$

$$G_{oi}(1_s 1, 1'_s 2; E, k_{//}) = 2f_i P_i t_i \chi \left[ t_i \frac{|1_s - 1'_s|}{|1_s - 1'_s|} + t_i \frac{|1_s - 1'_s - 1|}{|1_s - 1'_s - 1|} \right] \quad (15)$$

$$G_{oi}(1_s 2, 1'_s 1; E, k_{//}) = 2f_i P_i t_i \chi \left[ t_i \frac{|1_s - 1'_s|}{|1_s - 1'_s|} + t_i \frac{|1_s - 1'_s + 1|}{|1_s - 1'_s + 1|} \right] \quad (16)$$

où

$\vec{k}_{//}$  est le vecteur d'onde parallèle à la surface (001) (fig.1), c'est-à-dire,  $\vec{k}_{//} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$ .

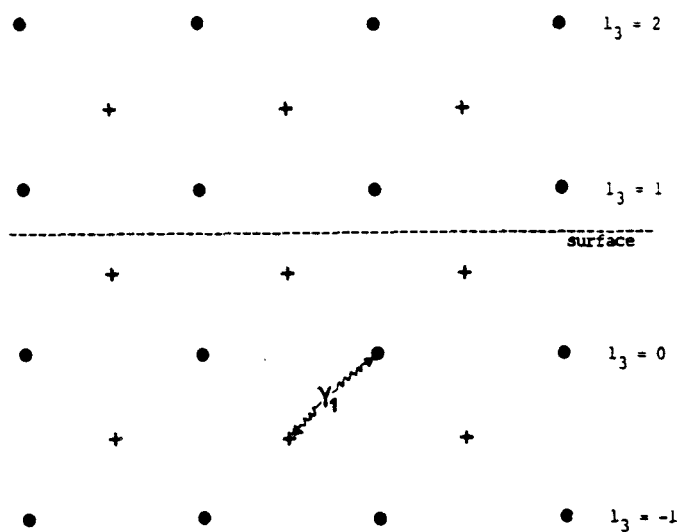
$$a_i = E - E_2(i) \quad (17)$$

$$P_i = \frac{-1}{2f_i^2 (t_i^2 - 1)} \quad (18)$$

$$d_i = E - E_1(i) \quad (19)$$

$$f_i = 4\gamma_i \cos(k_1 a / 2) \cos(k_2 a / 2) \quad (20)$$

$$\chi = \exp [ i (k_1 + k_2) a / 2 ] \quad (21)$$



**Figure 1**  
 Géométrie de la surface (001) .  
 • : atome de type 1  
 + : atome de type 2



$$t_i = \begin{cases} \xi_i - (\xi_i^2 - 1)^{1/2} & , \xi_i > 1 \\ \xi_i + i(1 - \xi_i^2)^{1/2} & , |\xi_i| < 1 \\ \xi_i + (\xi_i^2 - 1)^{1/2} & , \xi_i < -1 \end{cases} , (22)$$

avec ,

$$\xi_i(E, k_{//}) = -1 + \frac{a_i d_i}{2f_i^2} , (23)$$

Remarquons que les éléments matriciels de la fonction réponse en volume dépendent de la différence  $l_3 - l'_3$  et non de  $l_3$  et de  $l'_3$  séparément ce qui est en accord avec la symétrie de translation selon l'axe 3 perpendiculaire à la surface (001) .

### III - FONCTION REponse D'UN SEMICONDUCTEUR SEMI-INFINI

#### 1 - Opérateur de clivage

Le semiconducteur semi-infini a comme surface libre la surface (001). Pour créer cette surface il suffit de couper toutes les liaisons entre deux plans (001) voisins et donc d'annuler les intégrales de recouvrement entre ces deux plans. Ainsi on obtient des liaisons pendantes à la surface libre du semiconducteur. La géométrie de la surface (001) est représentée sur la figure 1. La création de cette surface introduit une perturbation représentée par l'opérateur de clivage  $\overleftarrow{V}_{oi}$ . L'hamiltonien qui décrit les interactions dans le semiconducteur semi-infini est donc

$$\overleftarrow{h}_{oi} = \overleftarrow{H}_{oi} + \overleftarrow{V}_{oi} \quad , \quad (24)$$

relation que l'on peut exprimer sous forme d'éléments matriciels,

$$h_{oi}(l_3\beta, l'_3\beta') = H_{oi}(l_3\beta, l'_3\beta') + V_{oi}(l_3\beta, l'_3\beta') \quad , \quad (25)$$

L'opérateur de clivage est [1]

$$V_{oi}(l\beta, l'\beta') = \gamma (\delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} \delta_{l'_3 0} \delta_{\beta' 2} + \delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{l'_3 1} \delta_{\beta' 1}) \times \\ (\delta_{l_1 l'_1} \delta_{l_2 l'_2} + \delta_{l_1 l'_1} \delta_{l_2 l'_2+1} + \delta_{l_1 l'_1+1} \delta_{l_2 l'_2} + \delta_{l_1 l'_1+1} \delta_{l_2 l'_2+1}) \quad , \quad (26)$$

La symétrie de translation parallèlement au plan (001) permet de simplifier le problème et le traiter comme étant unidimensionnel en effectuant la transformée de Fourier de l'équation (25). Ainsi l'opérateur de clivage devient

$$V_{oi}(l_3\beta, l_3'\beta'; k_{//}, E) = f_i X^* (\delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} \delta_{l_3' 0} \delta_{\beta' 2}) + f_i X (\delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' 1} \delta_{\beta' 1}), \quad (27)$$

Dans le cas où la surface libre du semiconducteur semi-infini est située entre les plans définis par  $l_3 = L, \beta = 2$  et  $l_3 = L + 1, \beta = 1$ , l'opérateur de clivage a pour expression

$$V_{oi}(l_3\beta, l_3'\beta'; k_{//}, E) = f_i X^* (\delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta 1} \delta_{l_3' L} \delta_{\beta' 2}) + f_i X (\delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' L+1} \delta_{\beta' 1}) \quad . \quad (28)$$

## 2 - L'opérateur réponse

La réponse du semiconducteur semi-infini à la création de la surface libre (001) est représentée par l'opérateur réponse  $\overleftarrow{A}_{oi}$  défini par la relation

$$\overleftarrow{A}_{oi} = \overleftarrow{V}_{oi} \cdot \overleftarrow{G}_{oi} \quad , \quad (29)$$

ou encore sous forme d'éléments matriciels

$$A_{oi}(l_3\beta, l_3'\beta'; k_{//}, E) = \sum_{l_3''\beta''} V_{oi}(l_3\beta, l_3''\beta''; k_{//}, E) G_{oi}(l_3''\beta'', l_3'\beta'; k_{//}, E) \quad . \quad (30)$$

Comme on aura besoin dans la suite d'un semiconducteur semi-infini dont la surface libre est située en  $l_3 = 0, \beta = 2$  et d'un autre dont la surface libre est située en  $l_3 = L + 1, \beta = 1$ , on distinguera deux cas pour le calcul de l'opérateur réponse de surface :

Cas 1 : la surface libre est située en  $l_3 = 0, \beta = 2$

L'équation (30) avec  $l_3'' = 0, 1$  et  $\beta'' = 1, 2$  donne

$$A_{oi}(l_a \beta, l'_a \beta'; k_{//}, E) = \delta_{l_a 0} \delta_{\beta 2} X f_i G_{oi}(11, l'_a \beta') + \delta_{l_a 1} \delta_{\beta 1} X^* f_i G_{oi}(02, l'_a \beta') \quad , (31)$$

On observe que la réponse du semiconducteur semi-infini en un site donné ( $l'_a \beta'$ ) à la création de la surface (001) dépend du type d'atomes présents en ce site. A l'aide de l'équation (31) et des relations (13 - 16) on obtient successivement l'opérateur réponse en un plan contenant les atomes du type 1 et en un autre contenant les atomes du type 2

si  $\beta' = 1$ , alors

$$A_{oi}(l_a \beta, l'_a 1; k_{//}, E) = - \delta_{l_a 0} \delta_{\beta 2} X \frac{a_i t_i^{|1 - l'_a| + 1}}{f_i (t_i^2 - 1)} - \delta_{l_a 1} \delta_{\beta 1} \frac{t_i [t_i^{|1'_a|} + t_i^{|1 - l'_a|}]}{t_i^2 - 1} \quad , (32)$$

Si  $\beta' = 2$ , alors

$$A_{oi}(l_a \beta, l'_a 2; k_{//}, E) = - \delta_{l_a 0} \delta_{\beta 2} \frac{t_i [t_i^{|1 - l'_a|} + t_i^{|1'_a|}]}{t_i^2 - 1} - \delta_{l_a 1} \delta_{\beta 1} X^* \frac{d_i t_i^{|1'_a|} + 1}{f_i (t_i^2 - 1)} \quad , (33)$$

Cas 2 : la surface libre est située en  $l_3 = L + 1$  ,  $\beta = 1$   
 L'équation (30) donne avec  $l''_3 = L, L+1$  et  $\beta = 1, 2$

$$A_{oi}(l_3\beta, l'_3\beta'; k_{//}, E) = \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta 1} X f_i G_{oi}(L, l'_3\beta') \\ + \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} X f_i G_{oi}(L+1, l'_3\beta') \quad , \quad (34)$$

Si  $\beta' = 1$  , l'équation (34) donne l'expression de l'opérateur réponse d'un plan situé en  $l'_3$  et contenant des atomes du type 1

$$A_{oi}(l_3\beta, l'_3 1; k_{//}, E) = - \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta 1} t_i \frac{t_i^{|L - l'_3|} + t_i^{|L - l'_3| + 1}}{t_i^2 - 1} \\ - \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} X \frac{a_i t_i^{|L+1 - l'_3|} + 1}{f_i(t_i^2 - 1)} \quad , \quad (35)$$

Si  $\beta' = 2$  , l'équation (34) donne l'opérateur réponse d'un plan situé en  $l'_3$  et contenant des atomes du type 2

$$A_{oi}(l_3\beta, l'_3\beta'; k_{//}, E) = - \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} t_i \frac{t_i^{|L - l'_3|} + t_i^{|L - l'_3| - 1}}{t_i^2 - 1} \\ - \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta 1} d_i X^* \frac{t_i^{|L - l'_3|} + 1}{f_i(t_i^2 - 1)} \quad , \quad (36)$$

L'opérateur réponse de surface du semiconducteur semi-infini est obtenu à partir des éléments matriciels  $A_{oi}(l_\beta, l'_\beta; k_{//}, E)$  donnés par les relations (31-36). Comme, pour l'étude du puits quantique de semiconducteurs, l'on aura besoin de deux semiconducteurs semi-infinis il convient de distinguer deux cas pour le calcul de l'opérateur réponse de surface.

Cas 1 :

Le semiconducteur 1 ( $i = 1$ ) a sa surface libre située en  $l_\beta = 0, \beta = 2$ . Son opérateur réponse de surface  $A_{s1}(l_\beta, l'_\beta; k_{//}, E)$  est obtenu à partir des équations (32) et (33) en imposant la condition  $l_\beta, l'_\beta \leq 0$  c'est-à-dire que  $\overleftarrow{A}_{s1}$  est la partie tronquée (à l'intérieur du semiconducteur semi-infini) de  $\overleftarrow{A}_{oi}$ .

$$A_{s1}(l_\beta, l'_\beta; k_{//}, E) = -\delta_{l_\beta 0} \delta_{\beta 2} \left[ \frac{\delta_{\beta 1} a_1 t_1^{2-l'_\beta}}{f_1(t_1^2 - 1)} + \frac{\delta_{\beta 2} t_1^{1-l'_\beta}}{t_1 - 1} \right], \quad (37)$$

Cas 2 :

Le semiconducteur semi-infini 3 ( $i = 3$ ) a une surface libre située en  $l_\beta = L + 1, \beta = 1$  et est défini par  $l_\beta \geq L + 1$ . Son opérateur réponse de surface  $A_{s3}(l_\beta, l'_\beta; k_{//}, E)$  est obtenu grâce aux relations (35) et (36) en imposant la condition  $l_\beta, l'_\beta \geq L + 1$ ,

$$A_{s3}(l_\beta, l'_\beta; k_{//}, E) = -\delta_{l_\beta L+1} \delta_{\beta 1} \left[ \frac{\delta_{\beta 1} t_3^{l'_\beta - L}}{t_3 - 1} + \frac{\delta_{\beta 2} d_3 X^* t_3^{l'_\beta - L + 1}}{f_3(t_3^2 - 1)} \right], \quad (38)$$

### 3 - Fonction réponse du semiconducteur semi-infini

La fonction réponse  $\overleftrightarrow{g}_{oi}$  du semiconducteur semi-infini est définie par la relation

$$\overleftrightarrow{h}_{oi} \cdot \overleftrightarrow{g}_{oi} = \overleftrightarrow{I} \quad , \quad (39)$$

où  $\overleftrightarrow{h}_{oi}$  est l'hamiltonien qui décrit les interactions dans le semiconducteur semi-infini et  $\overleftrightarrow{I}$  la matrice identité .

Les équations (12-a) , (24) et (28) nous permettent d'obtenir l'équation de Dyson qui donne l'expression de la fonction réponse du semiconducteur semi-infini connaissant  $\overleftrightarrow{G}_{oi}$  et  $\overleftrightarrow{A}_{oi}$

$$\overleftrightarrow{g}_{oi} \cdot (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{oi}) = \overleftrightarrow{G}_{oi} \quad , \quad (40)$$

Ci-dessous on donnera uniquement l'expression de la fonction réponse de surface du semiconducteur obtenue grace à l'équation (40)

$$\overleftrightarrow{g}_{oi} \cdot (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{oi}) = \overleftrightarrow{G}_{oi} \quad , \quad (41)$$

Ainsi la fonction réponse de la surface libre définie par  $l_s = 0$  et  $\beta = 2$  s'obtient à partir de l'équation (41)

$$g_{oi}(02,02;k_{//},E) = \frac{d_i t_i}{f_i^2(t_i + 1)} \quad , \quad (42)$$

La fonction réponse de la surface libre définie par  $l_s = L + 1$  et  $\beta = 1$  est

$$g_{oi}(L + 1, L + 1; k_{//}, E) = \frac{a_i t_i}{f_i^2(t_i + 1)}, \quad (43)$$

#### IV - OPERATEUR REPONSE DE SURFACE ET FONCTION REPONSE DE SURFACE D'UN SEMICONDUCTEUR AVEC DEUX SURFACES LIBRES

##### 1 - Opérateur réponse de surface

Pour obtenir le semiconducteur avec deux surfaces libres il suffit de couper toutes les liaisons entre deux plans voisins pour chaque surface créée. La première surface est située entre les plans définis par  $l_s = 0, \beta = 2$  et  $l_s = 1, \beta = 1$ , la deuxième surface est située entre les plans définis par  $l_s = L, \beta = 2$  et  $l_s = L + 1, \beta = 1$ .

L'opérateur de clivage qui représente la création de ces deux surfaces est obtenu en effectuant la somme des opérateurs donnés par les équations (27) et (28)

$$V_{oi}(l_s \beta, l'_s \beta'; k_{//}, E) = f_i X^* (\delta_{l_s 1} \delta_{\beta 1} \delta_{l'_s 0} \delta_{\beta' 2} + \delta_{l_s L+1} \delta_{\beta 1} \delta_{l'_s L} \delta_{\beta' 2}) + f_i X (\delta_{l_s 0} \delta_{\beta 2} \delta_{l'_s 1} \delta_{\beta' 1} + \delta_{l_s L} \delta_{\beta 2} \delta_{l'_s L+1} \delta_{\beta' 1}), \quad (44)$$



L'opérateur réponse de la lame est obtenu à partir de l'équation (30) avec  $l_3'' = 0, 1, L, L + 1$  et  $\beta'' = 1, 2$

$$A_{oi}(l_3 \beta, l_3' \beta'; k_{//}, E) = [\delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} G_{oi}(L+1, l_3' \beta') + \delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} G_{oi}(1, l_3' \beta')] f_i X + [\delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} G_{oi}(0, 2, l_3' \beta') + \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta 1} G_{oi}(L, 2, l_3' \beta')] f_i X^* \quad (45)$$

En utilisant les équations (13-16) on obtient l'expression de l'opérateur réponse d'un plan d'atomes de type 1 ( $\beta' = 1$ ) puis celui d'un plan d'atomes de type 2 ( $\beta' = 2$ )

Cas 1:  $\beta' = 1$

$$A_{oi}(l_3 \beta, l_3' 1; k_{//}, E) = - \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} t_i \frac{t_i^{|l_3' - l_3| + t_i} |1 - l_3'|}{t_i^2 - 1} - X \delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} \frac{a_i t_i^{|1 - l_3'| + 1}}{f_i(t_i^2 - 1)} - \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta 1} t_i \frac{t_i^{|L - l_3'| + t_i} |L - l_3' + 1|}{t_i^2 - 1} - \frac{a_i t_i^{|L + 1 - l_3'| + 1}}{f_i(t_i^2 - 1)} \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \quad (46)$$

Cas 2 :  $\beta' = 2$

$$\begin{aligned}
 A_{oi}(l_3\beta, l_3'2; k_{//}, E) = & -\delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} \frac{X^* d_i t_i^{|l_3'|+1}}{f_i(t_i^2-1)} - \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta 1} \frac{X^* d_i t_i^{|L-l_3'|+1}}{f_i(t_i^2-1)} \\
 & - t_i \frac{t_i^{|L-l_3'|} + t_i^{|L-l_3'+1|}}{t_i^2-1} \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \\
 & - \delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} t_i \frac{t_i^{|l_3'|} + t_i^{|1-l_3'|}}{t_i^2-1} \quad . (47)
 \end{aligned}$$

L'opérateur réponse de surface de la lame , qui est la partie tronquée (à l'intérieur de la lame) de l'opérateur réponse donné par l'équation (45), est obtenu en imposant la condition  $1 \leq l_3, l_3' \leq L$

$$\begin{aligned}
 A_{oi}(l_3\beta, l_3'\beta'; k_{//}, E) = & \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} X^* f_i G_{oi}(02, l_3'\beta') \\
 & + \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} G_{oi}(L+11, l_3'\beta') f_i X \quad . (48)
 \end{aligned}$$

Les équations (13-16) permettent de déterminer l'expression de l'opérateur réponse de surface de la lame

$$A_{sz}(l_3, \beta, l'_3, \beta') = -\delta_{\beta' 1} \left[ \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} \frac{t_i^{l'_3}}{t_i - 1} + \frac{a_i t_i^{L-l'_3+2}}{t_i^2 - 1} \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} X \right] - \delta_{\beta' 2} \left[ \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} X^* \frac{d_i t_i^{l'_3 + 1}}{f_i (t_i^2 - 1)} - \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \frac{t_i^{L-l'_3+1}}{t_i - 1} \right] , \quad (49)$$

avec  $1 \leq l_3, l'_3 \leq L$ .

## 2 - Fonction réponse de surface

La fonction réponse de surface du semiconducteur avec deux surfaces libres est donnée par la relation (41). Ainsi on obtient sous forme matricielle

$$\overleftrightarrow{g}_{si} = \overleftrightarrow{G}_{si} (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{si})^{-1} . \quad (50)$$

A titre d'exemple nous donnons ci-dessous l'expression de la fonction de surface de la lame dans l'espace des deux surfaces libres

$$\overleftrightarrow{g}_{si} = \begin{bmatrix} g_{si}(11, 11) & g_{si}(11, L2) \\ g_{si}(L2, 11) & g_{si}(L2, L2) \end{bmatrix} . \quad (51)$$

La fonction réponse de référence du semiconducteur dans l'espace des deux surfaces est

$$\overleftrightarrow{G}_{oi} = \begin{bmatrix} G_{oi}(11,11) & G_{oi}(11,L 2) \\ G_{oi}(L 2,11) & G_{oi}(L 2,L 2) \end{bmatrix} \quad . (52)$$

Les éléments matriciels de  $\overleftrightarrow{G}_{oi}$  sont obtenus à partir des équations (13-16).

L'opérateur réponse de surface dans l'espace des deux surfaces libres est donné par la relation (49) pour  $(1\beta) = (11)$ ,  $(L 2)$  et  $(1'\beta') = (11)$ ,  $(L 2)$

$$\overleftrightarrow{A}_{oi} = \begin{bmatrix} \frac{-t_i}{t_i - 1} & \frac{-X^* d_i t_i^{L+1}}{f_i(t_i^2 - 1)} \\ \frac{-a_i X t_i^{L+1}}{f_i(t_i^2 - 1)} & \frac{-t_i}{t_i - 1} \end{bmatrix} \quad . (53)$$

Après l'inversion de la matrice  $\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{oi}$  on obtient la fonction réponse du semiconducteur avec deux surfaces libres dans le plan des deux surfaces

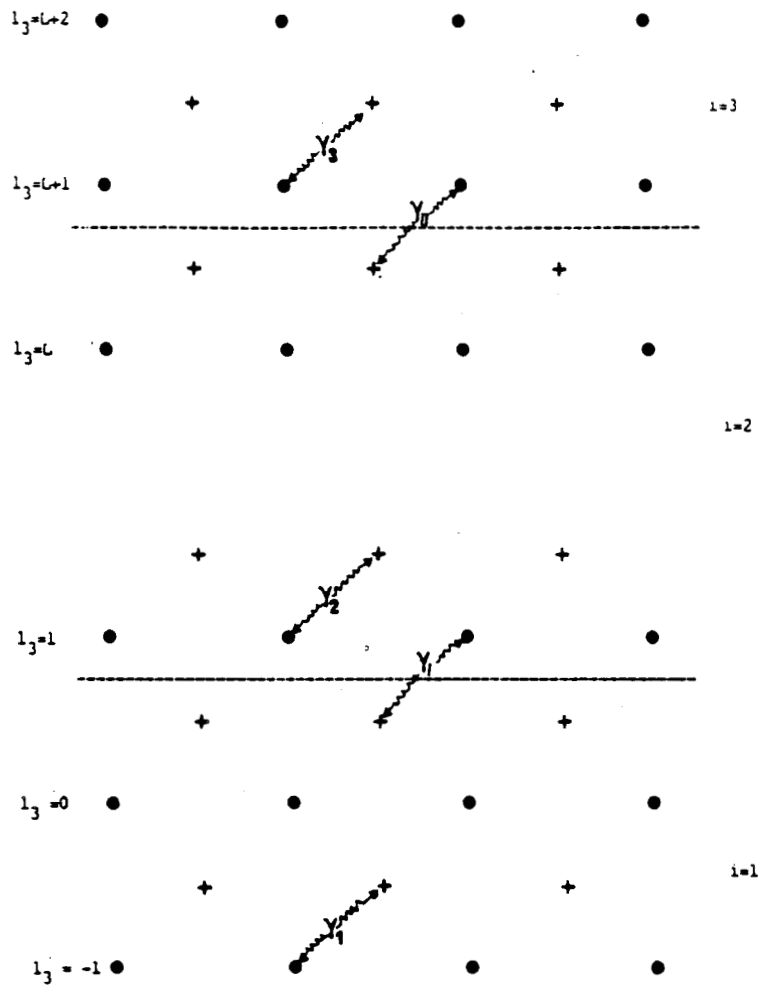
$$\vec{g}_{si} = \begin{bmatrix} \frac{a_i t_i (1 - t_i^{2L})}{f_i(t_i + 1)} & X^* t_i^L (1 - t_i) \\ X t_i^L (1 - t_i) & \frac{d_i t_i (1 - t_i^{2L})}{f_i(t_i + 1)} \end{bmatrix} \quad (54)$$

## V - PUIITS QUANTIQUE DE SEMICONDUCTEURS

Le puits quantique est formé d'un semiconducteur avec deux surfaces libres ( $i = 2$ ) située entre les plans définis par  $l_s = 1, \beta = 1$  et  $l_s = L, \beta = 2$ , d'un semiconducteur semi-infini ( $i = 1$ ) limité par la surface  $l = 0, \beta = 2$  et d'un autre semiconducteur semi-infini ( $i = 3$ ) dont la surface libre est définie par  $l_s = L + 1, \beta = 1$ . Ce système composite est représenté sur la figure 2.

La lame est formée de  $L$  couches. Chaque couche correspond à deux plans atomiques, l'un contenant les atomes de type 1 ( $\beta = 1$ ) et l'autre contenant les atomes de type 2 ( $\beta = 2$ ).

Les interactions entre le semiconducteur semi-infini 1 ( $i = 1$ ) (respectivement  $i = 3$ ) et la lame ( $i = 2$ ) sont représentées par les intégrales de recouvrement  $\gamma_I$  (respectivement  $\gamma_{II}$ ) définies par les relations  $\gamma_I = \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2}$ ,  $\gamma_{II} = \frac{\gamma_3 + \gamma_2}{2}$ .



**Figure 2**

Géométrie du puits quantique .

● : atome de type 1

+ : atome de type 2

Les interactions dans le semiconducteur  $i$  sont représentées par  $\gamma_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) .

On définit d'abord la fonction réponse de référence  $\overleftrightarrow{G}_0$  pour le puits quantique comme une matrice diagonale par blocs [1] dont les éléments non nuls sont donnés par ,

$$G_0(l_3, \beta, l'_3, \beta'; k_{//}, E) = \begin{cases} G_{01}(l_3, \beta, l'_3, \beta'; k_{//}, E) & l_3, l'_3 \leq 0 \\ G_{02}(l_3, \beta, l'_3, \beta'; k_{//}, E) & 1 \leq l_3, l'_3 \leq L \\ G_{03}(l_3, \beta, l'_3, \beta'; k_{//}, E) & l_3, l'_3 \geq L + 1 \end{cases}, \quad (55)$$

L'opérateur de couplage qui lie les trois semiconducteurs grace aux intégrales de recouvrement  $\gamma_I$  et  $\gamma_{II}$  est

$$V_I(l_3, \beta, l'_3, \beta'; k_{//}, E) = -f_I X \left( \delta_{l_3, 1} \delta_{\beta, \beta_1} \delta_{l'_3, 0} \delta_{\beta', \beta_2} \right) - f_{II} X \left( \delta_{l_3, L+1} \delta_{\beta, \beta_1} \delta_{l'_3, L} \delta_{\beta', \beta_2} \right) \\ - f_I X \left( \delta_{l_3, 0} \delta_{\beta, \beta_2} \delta_{l'_3, 1} \delta_{\beta', \beta_1} \right) - f_{II} X \left( \delta_{l_3, L} \delta_{\beta, \beta_2} \delta_{l'_3, L+1} \delta_{\beta', \beta_1} \right), \quad (56)$$

avec

$$f_I = 4\gamma_I \cos(ak_1/2) \cos(ak_2/2)$$

$$f_{II} = 4\gamma_{II} \cos(ak_1/2) \cos(ak_2/2)$$

L'opérateur réponse d'interface est défini [1] par la relation

$$\overleftrightarrow{A} = \overleftrightarrow{A}_0 + \overleftrightarrow{V}_I \cdot \overleftrightarrow{G}_0, \quad (57)$$

où  $\overleftrightarrow{A}$  est une matrice diagonale par blocs qui représente l'opérateur réponse de surface du puits quantique de semiconducteurs. Les éléments matriciels non nuls de cet opérateur sont obtenus à partir des équations (37), (38), (49)

$$A_{\bullet} (l_{\beta}, l'_{\beta'}; k_{//}, E) = \begin{cases} A_{s1} (l_{\beta}, l'_{\beta'}; k_{//}, E) & l_{\beta}, l'_{\beta} \leq 0 \\ A_{s2} (l_{\beta}, l'_{\beta'}; k_{//}, E) & 1 \leq l_{\beta}, l'_{\beta} \leq L \\ A_{s3} (l_{\beta}, l'_{\beta'}; k_{//}, E) & l_{\beta}, l'_{\beta} \geq L + 1 \end{cases} \quad (58)$$

Pour obtenir les états électroniques localisés et la fonction réponse du puits quantique il suffit de calculer l'opérateur réponse d'interface dans l'espace des interfaces c'est-à-dire pour  $l_{\beta} = 0, 1, L, L + 1$  et  $\beta = 1, 2$  soit

$$\overleftrightarrow{A} = \begin{bmatrix} A_{s1} & -f_I X G_{O2} (11, 11) & -f_I X G_{O2} (11, L2) & 0 \\ -f_I X^* G_{O1} (02, 02) & f_2 X^* G_{O2} (02, 11) & f_2 X^* G_{O2} (02, L2) & 0 \\ 0 & f_2 X G_{O2} (L+11, 11) & f_2 X G_{O2} (L+11, L2) & -f_{II} X G_{O3} (L+11, L+1) \\ 0 & -f_{II} X^* G_{O2} (L2, 11) & f_{II} X^* G_{O2} (L2, L2) & A_{s3} \end{bmatrix}$$



En utilisant les équations (13 - 16) on obtient une matrice 4 x 4 qui représente l'opérateur réponse d'interface dans l'espace des deux surfaces

$$\vec{A} = \begin{bmatrix} \frac{-t_1}{t_1 - 1} & \frac{X f_{12} a_2 t_2}{f_2^2 (t_2^2 - 1)} & \frac{f_{12} t_2^L}{f_2 (t_2 - 1)} & 0 \\ \frac{X^* f_{11} d_1 t_1}{f_1^2 (t_1^2 - 1)} & \frac{-t_2}{t_2 - 1} & \frac{-d_2 X^* t_2^{L+1}}{f_2 (t_2 - 1)} & 0 \\ 0 & \frac{-a_2 X t_2^{L+1}}{f_2 (t_2 - 1)} & \frac{-t_2}{t_2 - 1} & \frac{f_{11} t_2 a_2 X}{f_2 (t_2 - 1)} \\ 0 & \frac{f_{11} t_2^L}{f_2 (t_2 - 1)} & \frac{X^* f_{11} d_2 t_2}{f_2^2 (t_2^2 - 1)} & \frac{-t_2}{t_2 - 1} \end{bmatrix} \quad (59)$$

La fonction réponse  $\vec{g}$  du puits quantique peut être calculée [1] à partir de l'équation

$$\vec{g} ( \vec{I} + \vec{A} ) = \vec{G}_0 \quad (60)$$

Les éléments matriciels de la fonction réponse du puits quantique de semiconducteurs sont donc donnés par la relation

$$g(l_s \beta, l'_s \beta'; k_{//}, E) = G_s(l_s \beta, l'_s \beta') - \sum_{\substack{m, m' \\ \beta'', \beta'''}} G_s(l_s \beta, m \beta'') \Delta^{-1}(m \beta'', m' \beta''') A(m' \beta''', l'_s \beta')$$

où  $\Delta(m, m') = I(m, m') + A(m, m')$ , avec,  $m, m' = 0, 1, L, L+1$ , (61)

Pour obtenir la fonction réponse du puits quantique il faut donc inverser la matrice  $\overleftrightarrow{\Delta}$

$$\overleftrightarrow{\Delta} = \begin{bmatrix} 1 + A(02, 02) & A(02, 11) & A(02, L2) & A(02, L+11) \\ A(11, 02) & 1 + A(11, 11) & A(11, L2) & A(11, L+11) \\ A(L2, 02) & A(L2, 11) & 1 + A(L2, L2) & A(L2, L+11) \\ A(L+11, 02) & A(L+11, 11) & A(L+11, L2) & 1 + A(L+11, L+11) \end{bmatrix}$$

Pour obtenir l'inverse de la matrice  $\overleftrightarrow{\Delta}$ ,  $\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}$ , on calcule d'abord son déterminant que l'on met sous la forme

$$\text{Det } \overleftrightarrow{\Delta} = \frac{W(k_{//}, E)}{(t_1 - 1)(t_2 - 1)^2(t_3 - 1)}, \quad (62)$$

où  $W(k_{//}, E)$  est donné par l'expression

$$\begin{aligned}
W(k, E) = & \left[ 1 - \frac{f_I^2 d_1 t_1 a_2 t_2}{f_1^2 f_2^2 (t_1 + 1) (t_2 + 1)} \right] \left[ 1 - \frac{f_{II}^2 d_2 t_3 a_3 t_2}{f_2^2 f_3^2 (t_2 + 1) (t_3 + 1)} \right] \\
& + \left[ \frac{d_2 t_2^{L+1}}{f_2 (t_2 + 1)} - \frac{f_I^2 d_1 t_1 t_2^L}{f_1^2 f_2 (t_1 + 1)} \right] \left[ \frac{f_{II}^2 a_3 t_3 t_2^L}{f_3^2 f_2 (t_3 + 1)} - \frac{a_2 t_2^{L+1}}{f_2 (t_2 + 1)} \right]. \quad (63)
\end{aligned}$$

Tous les éléments matriciels de la fonction réponse du puits quantique de semiconducteurs peuvent maintenant être calculés en utilisant l'équation (61). Les expressions de ces différents éléments sont donnés dans l'appendice I.

## 2 - Alignement des énergies de Fermi

Lors de la création d'une hétérojonction entre deux semiconducteurs il y a apparition de charges dipolaires à l'interface [11] qui tendent à aligner les niveaux d'énergie de Fermi. L'énergie qui joue le rôle d'énergie de Fermi lors de la création de l'interface semiconducteur/semiconducteur est le milieu du gap, soit à l'équilibre

$$E_F = \frac{E_1(j) + E_2(j)}{2}, \quad \text{où } j = 1, 2, 3, \quad (64)$$

$E_1(j)$  est l'énergie du haut de la bande de valence du semiconducteur (j).

$E_2(j)$  est l'énergie du bas de la bande de conduction du semiconducteur (j).

### 3 - Etats électroniques localisés

La connaissance de la fonction réponse du puits quantique permet d'étudier les propriétés électronique du système composite et en particulier ses états électroniques localisés. Ces états peuvent être considérés comme des guides d'ondes électroniques, c'est-à-dire, que si on donne à un électron une énergie  $E$  et un vecteur d'onde  $\vec{k}$  correspondant à un état localisé, cet électron pourra se propager dans le puits quantique. Ces états sont donnés par les nouveaux pôles de la fonction réponse. Ce sont les valeurs de  $E(k_{//})$  qui annulent  $W(k_{//}, E)$ , en dehors des bandes de volume des semiconducteurs 1 et 3. Il faut noter que dans ce cas  $t_1$  et  $t_3$  sont des nombres réels et  $t_2$  est un nombre complexe. Une expression de  $W(k_{//}, E)$  plus facile à utiliser lors de l'exploitation numérique est obtenue en définissant une nouvelle variable réelle  $q_2$  par

$$t_2 = \exp(iq_2) \quad , \quad (65)$$

on obtient :

$$W(k, E) = 2i \exp [iq_2(L+1/2)] \left[ \left[ \frac{f_{11}^2 t_a d_2}{f_2^2 f_3^2 (t_3 + 1)} + \frac{f_{12}^2 d_1 t_1}{f_1^2 f_2^2 (t_1 + 1)} \right] \sin(q_2 L) \right. \\ \left. + \sin [q_2 (L-1/2)] \frac{f_1^2 f_2^2 d_1 t_1 t_a}{f_1^2 f_2^2 f_3^2 (t_3 + 1) (t_1 + 1)} + \sin [q_2 (L+1/2)] \right] . (66)$$

La facilité d'utilisation de cette relation vient du fait que l'expression entre crochets est purement réelle .en outre ce résultat est général et peut être appliqué à n'importe quelle combinaison de semiconducteurs et d'en déduire les états électroniques localisés correspondants.

Les valeurs des différentes grandeurs nécessaires pour l'exploitation numérique proviennent de la référence [12] pour InAs et de la référence [13] pour GaAs et AlAs .

Le niveau d'énergie de As est choisi comme origine des énergies. Les valeurs numériques ci-dessous sont exprimées en électron-volt.

	$E_1$	$E_2$	$ 4\gamma $
InAs	0,42	0	2,69
GaAs	1,43	0	3,16
AlAs	2,80	-0,25	2,80

#### 4 - Résultats et discussion

Le résultat original obtenu à l'issue de ce calcul est de prévoir l'apparition des états électroniques localisés pour tout puits quantique .

Les résultats de la figure 3 et de la figure 4 montrent que le nombre d'états localisés augmentent quand le nombre de couches de InAs augmente . Dans le premier cas le nombre de ces états est huit correspondant à une largeur de puits de  $42.4 \text{ \AA}$  et dans le deuxième cas ils sont au nombre de dix correspondant à une largeur de puits de  $66.6 \text{ \AA}$  . Dans les deux cas ils sont situés dans la bande interdite de AlAs et peuvent servir de centres de recombinaison ou de pièges à électrons . Ce résultat est confirmé par d'autres résultats non présentés ici et qui nous permettent de conclure que le nombre de ces états augmente quand quand l'épaisseur du puits quantique augmente et se traduit par un pic de densité d'état qui devient de plus en plus étroit [14] .

Les hétérojonctions semiconducteur/semiconducteur considérées ici sont abruptes . Ceci est réalisable expérimentalement grâce aux nouvelles techniques épitaxiales comme l'épitaxie par jets moléculaires qui permet un contrôle précis de la croissance d'un semiconducteur sur un autre et donc la formation d'une interface de haute qualité . Toutefois la plupart de ces interfaces contiennent plusieurs types de défauts d'origine structurale ou chimique . L'accommodation des paramètres de mailles est l'un des

problèmes structuraux de cette interface et se traduit par l'apparition de déformations dans le semiconducteur . Pour les semiconducteurs III-V l'accomodation se réalise grâce à une déformation élastique quand l'écart entre les deux paramètres est faible [15] . Dans le cas d'une lame mince adsorbé sur un semiconducteur semi-infini , c'est le substrat qui détermine le paramètre de maille parallèle à l'interface et le matériau adsorbé accomode son paramètre de maille parallèle et accorde son paramètre de maille perpendiculaire avec son coefficient de Poisson . Les résultats qualitatifs présentés ici ne sont pas affectés par de faibles variations du paramètre de maille . On a donc choisi le même paramètre pour tous les semiconducteurs considérés .

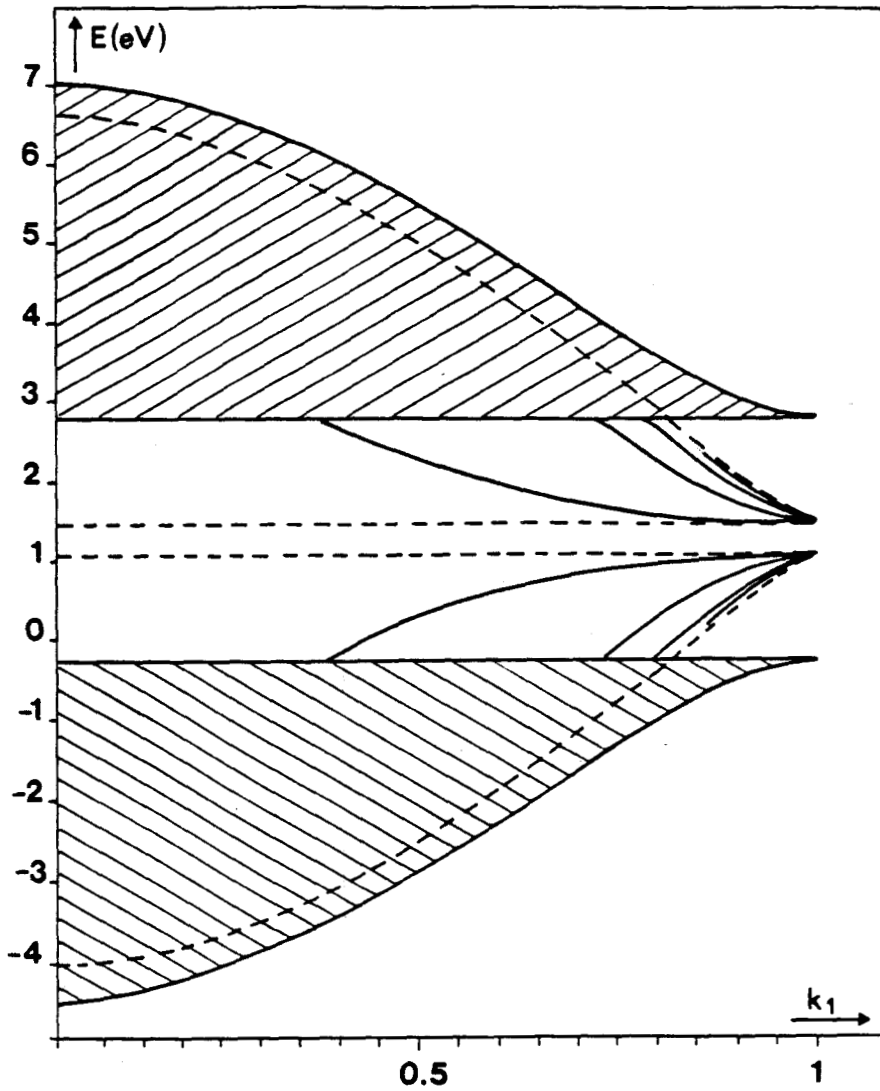


Figure 3

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le puits quantique AlAs/InAs/AlAs. Le nombre de couches de InAs est  $L = 4$  (4 plans atomiques de In et 4 plans atomiques de As).  $k_1$ ,  $k_2$  et  $k_3$  sont exprimés en unités  $\pi/a_0$ . Les bandes de volume de AlAs sont représentées par les régions hachurées. Les extrémités des bandes de volume de InAs sont représentées en trait interrompu. Les états électroniques localisés sont représentés en trait plein et se trouvent dans la bande interdite de AlAs. On obtient 8 états localisés, autant que de plans atomiques de InAs, symétriques par rapport à l'énergie de Fermi.



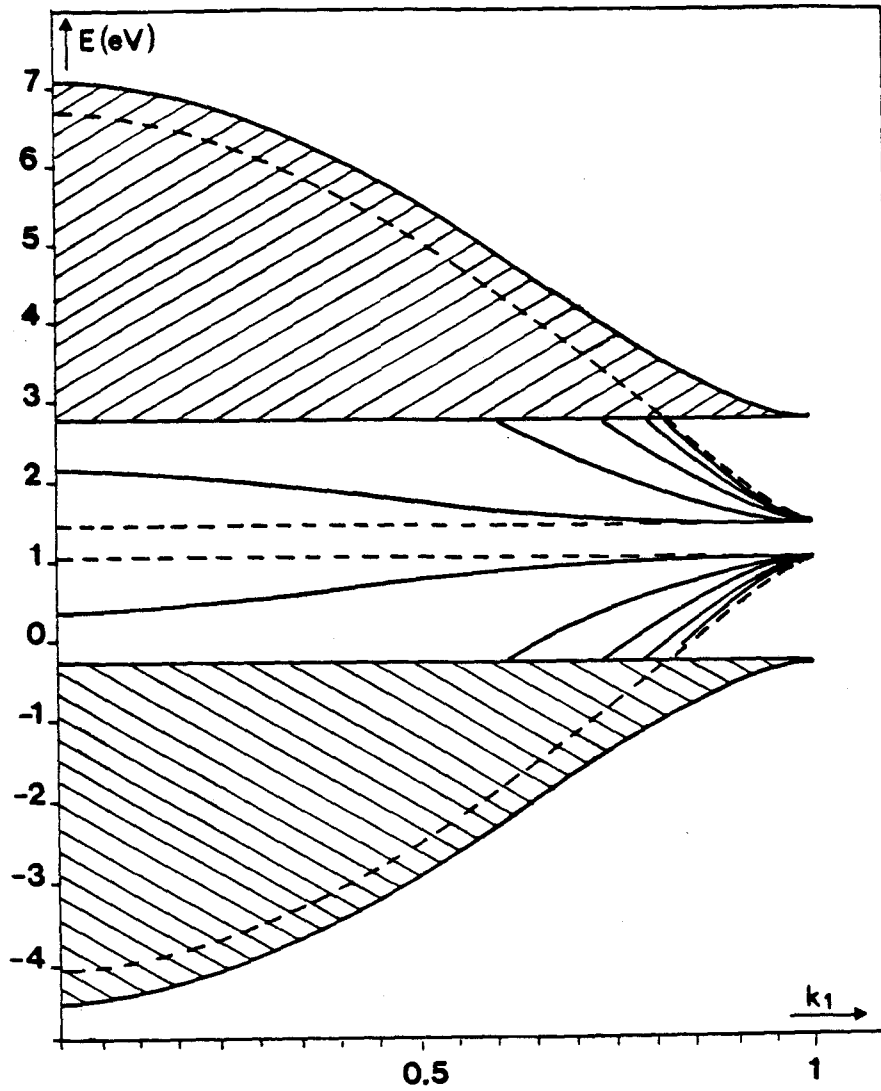


Figure 4

Même système que celui de la figure 3 avec  $L = 6$  (6 plans atomiques de In et 6 plans atomiques de As). On obtient dix états électroniques localisés situés dans la bande interdite de AlAs.

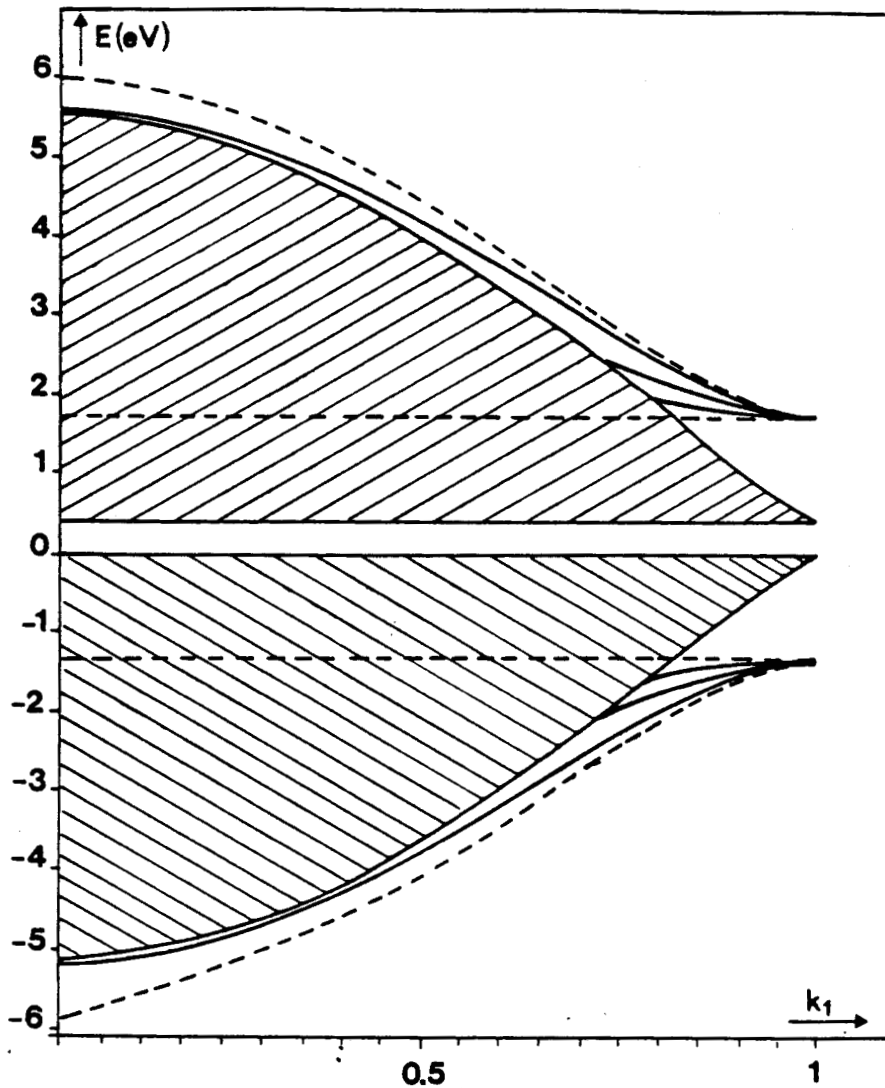


Figure 5

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le puits quantique InAs/AlAs/InAs. Le nombre de couches de AlAs est  $L = 4$  (4 plans atomiques de Al et 4 plans atomiques de As).  $k_1$ ,  $k_2$  et  $k_3$  sont exprimés en unités  $\pi/a_0$ . Les aires hachurées représentent les bandes de volume de InAs. Les extrémités des bandes de volume de AlAs sont représentées en trait interrompu. Les états électroniques localisés apparaissent en trait plein : trois états au dessus de la bande de conduction de AlAs et trois états en dessous de la bande de valence de AlAs.

## **CHAPITRE 2**

# **ETUDE DES STRUCTURES SEMICONDUCTEUR / VIDE**

## I - THEORIE DE REPONSE D'INTERFACE DES SYSTEMES COMPOSITES MIXTES

L'étude des interfaces semiconducteurs / vide , puis des systèmes semiconducteur/vide/semiconducteur peut être faite à l'aide de la théorie de réponse d'interface des systèmes composites mixtes discrets-continus [16] .

Dans le cadre de cette théorie le semiconducteur sera traité en tant que système discret et le vide en tant que système continu . La théorie de réponse d'interface pour des systèmes continus a été établie à partir de celle des systèmes discrets [17] .

Nous rappelons ci-dessous les résultats utiles pour la suite des calculs obtenus grâce à cette théorie .

Considérons un système composite possédant plusieurs interfaces  $M_i$ . L'ensemble de ces interfaces constitue l'espace d'interface représenté par  $M$  . L'inverse de la fonction réponse du système composite dans l'espace  $M$  est donné par la relation

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM) = \overleftrightarrow{g}_s^{-1}(MM) + \overleftrightarrow{V}_I \quad , (67)$$

Dans la théorie des systèmes continus , l'opérateur de couplage est nul . Ainsi l'équation (67) devient

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM) = \overleftrightarrow{g}_s^{-1}(MM) \quad , (68)$$

Alors  $\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM)$  peut être obtenue par une superposition des différents éléments matriciels  $g_{si}^{-1}(M_{ij}; M_{ij'})$

$$g_{si}^{-1}(M_{ij}; M_{ij'}) = 0, \quad M_{ij'} \neq M_{ij}, \quad (69)$$

$$g_{si}^{-1}(M_{ij}; M_{ij'}) = g_{si}^{-1}(M_{ij}; M_{ij}), \quad j \neq j', \quad (70)$$

$$g_{si}^{-1}(M_{ij}; M_{ij'}) = \sum_{i'} g_{si}^{-1}(M_{i'j}; M_{i'j'}), \quad M_{i'j'} \equiv M_{ij}, \quad (71)$$

Ainsi pour calculer la fonction réponse d'un système composite mixte il faut d'abord calculer son inverse à partir de l'équation (68) dont les éléments matriciels sont obtenus en utilisant les équations (69-71). Les éléments matriciels de  $\overleftrightarrow{g}_{\bullet}^{-1}$  seront calculés dans les paragraphes suivants.

## II - FONCTION REPONSE DE SURFACE D'UN SEMICONDUCTEUR SEMI-INFINI

La relation générale donnant la fonction réponse de surface d'un semiconducteur semi-infini a été donnée précédemment (équation (41))

$$\overleftrightarrow{g}_{si} (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{si}) = \overleftrightarrow{G}_{si}$$

La surface libre du semiconducteur semi-infini est parallèle au plan (001). On notera  $\overleftrightarrow{g}_{s1}$  (respectivement  $\overleftrightarrow{g}_{s3}$ ) la fonction réponse de surface d'un semiconducteur dont la surface libre est définie

par  $l_3 = 0$ ,  $\beta = 2$  (respectivement  $l_3 = L$ ,  $\beta = 1$ )

Les équations (42) et (43) donnent

$$g_{s1}(02,02;k_{//},E) = \frac{d_1 t_1}{f_1^2(t_1 + 1)} \quad , (72)$$

$$g_{s3}(L + 11, L + 11; k_{//}, E) = \frac{a_3 t_3}{f_3^2(t_3 + 1)} \quad . (73)$$

### III - FONCTION REPONSE DE SURFACE DU VIDE

Considérons qu'il y a un vide situé dans l'espace  $l_3 > 0$  et est limité par une surface (001) parfaite correspondant au plan défini par  $l_3 = 0$  et  $\beta = 2$ . La fonction réponse de surface du vide a été calculée [16] en déterminant d'abord la fonction réponse de surface d'un métal noble puis on effectue le passage du système discret au système continu.

On obtient alors la fonction réponse de surface d'un vide limité par une surface libre :

$$g_{s2}(0,0;k_{//},E) = \frac{-a}{\alpha \beta_2} \quad , (74)$$

avec

$$\alpha^2 = k_{//}^2 - \frac{E - E_v}{\beta_2} \quad , (75)$$

$$\beta_2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

$E_v$  est le niveau d'énergie du vide ,

$m$  est la masse effective,

$a$  est le paramètre de la maille cristalline du semiconducteur .

#### IV - ETUDE D'UNE INTERFACE SEMICONDUCTEUR/VIDE

La surface de contact entre le semiconducteur semi-infini et le vide est le plan (001) défini par  $l_3 = 0, \beta = 2$ .

La fonction réponse du système semiconducteur/vide est obtenue à l'interface à partir des équations (68-71)

$$g^{-1}(0,0;k_{//},E) = g_{s1}^{-1}(0,0;k_{//},E) + g_{s2}^{-1}(0,0;k_{//},E) \quad . (76)$$

On obtient finalement , grâce aux équations (72) et (74) l'inverse de la fonction réponse puis la fonction réponse du système à l'interface

$$g^{-1}(0,0;k_{//},E) = \frac{f_1^2(t_1 + 1)}{d_1 t_1} - \frac{\alpha \beta_2}{a} \quad , (77)$$

$$g(0,0;k_{//},E) = \left[ \frac{f_1^2(t_1 + 1)}{d_1 t_1} - \frac{\alpha \beta_2}{a} \right]^{-1} \quad . (78)$$

On peut alors déterminer les états électroniques localisés du système semiconducteur/vide qui sont donnés par les nouveaux pôles de la fonction réponse  $g(0,0;k_{//},E)$ .

Notons que pour le modèle à deux bandes s on a

$$\frac{a_i d_i t_i}{f_i^2(t_i + 1)^2} = 1 \quad . \quad (79)$$

La fonction réponse du système donnée par l'équation (78) devient

$$g(0,0;k_{//},E) = \frac{a(t_1 + 1)}{a a_1 - \alpha \beta_2(t_1 + 1)} \quad . \quad (80)$$

Les états électroniques localisés correspondent donc aux valeurs de l'énergie  $E(k_{//})$  qui annulent le dénominateur de  $g(0,0;k_{//},E)$ ,

$$a_1 a - \alpha \beta_2(t_1 + 1) = 0 \quad . \quad (81)$$

#### V - ETUDE DU SYSTEME SEMICONDUCTEUR/VIDE/SEMICONDUCTEUR

Considérons le système formé d'une lame de vide située entre un semiconducteur semi-infini dont la surface libre est définie par  $l_g = 0$ ,  $\beta = 2$  et un autre semiconducteur semi-infini dont la surface libre est définie par  $l_g = L$ ,  $\beta = 2$ .



La fonction réponse de surface de la lame de vide est [10]

$$\overleftrightarrow{g}_{s2}^{-1} = \frac{\alpha \beta_2}{a} \begin{bmatrix} -\coth(\alpha x) & \frac{1}{\text{sh}(\alpha x)} \\ \frac{1}{\text{sh}(\alpha x)} & -\coth(\alpha x) \end{bmatrix}, \quad (82)$$

avec  $x = La$ ,  $a$  étant le paramètre de maille de la structure cubique centrée du semiconducteur.

L'inverse de la fonction réponse du système semiconducteur/vide/semiconducteur  $\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM)$  est obtenue dans l'espace des interfaces à l'aide des équations (69 - 71).

$$\overleftrightarrow{g}(MM) = \begin{bmatrix} g_{s1}^{-1}(E, k_{//}, 0, 0) + g_{s2}^{-1}(E, k_{//}, 0, 0) & g_{s2}^{-1}(E, k_{//}, 0, L) \\ g_{s2}^{-1}(E, k_{//}, L, 0) & g_{s3}^{-1}(E, k_{//}, L, L) + g_{s2}^{-1}(E, k_{//}, L, L) \end{bmatrix}$$

Les différents éléments de la matrice ci-dessus ont été obtenus auparavant et dont les expressions sont données par les équations (72), (73) et (82).

La fonction réponse du système dans l'espace des interfaces est

$$\overleftrightarrow{g}(\text{MM}) = \frac{1}{W(E, k_{//})} \begin{bmatrix} \frac{f_3^2(t_3+1)}{a_3 t_3} - \frac{\alpha \beta_2 \coth(\alpha x)}{a} & -\frac{\alpha \beta_2}{a \operatorname{sh}(\alpha x)} \\ -\frac{\alpha \beta_2}{a \operatorname{sh}(\alpha x)} & \frac{f_1^2(t_1+1)}{d_1 t_1} - \frac{\alpha \beta_2 \coth(\alpha x)}{a} \end{bmatrix}, \quad (83)$$

avec,

$$W(E, k_{//}) = \text{Det} [\overleftrightarrow{g}^{-1}(\text{MM})].$$

Les états électroniques localisés du système sont donnés par les nouveaux pôles de la fonction réponse. Ils correspondent aux valeurs de l'énergie  $E(k_{//})$  qui annulent le déterminant  $W(E, k_{//})$  en dehors des bandes de volume des semiconducteurs 1 et 3.

$$W(E, k_{//}) = \left[ \frac{a_1}{t_1+1} - \frac{\alpha \beta_2 \coth(\alpha x)}{a} \right] \left[ \frac{d_3}{t_3+1} - \frac{\alpha \beta_2 \coth(\alpha x)}{a} \right] - \left[ \frac{\alpha \beta_2}{a \operatorname{sh}(\alpha x)} \right]^2. \quad (84)$$

## VI - ALIGNEMENT DES ENERGIES DE FERMI ET NIVEAU D'ENERDIE DU VIDE

Pour exploiter numériquement les résultats on choisit comme potentiel dans le vide un potentiel constant par rapport aux variables d'espace et sera noté  $E_v$ .

D'autre part le milieu du gap du semiconducteur joue le rôle d'énergie de Fermi .

$$E_F = \frac{E_1 + E_2}{2}$$

où  $E_1$  est l'énergie du haut de la bande de valence et  $E_2$  le bas de la bande de conduction du semiconducteur .

Dans le cas où le système composite étudié est le puits semiconducteur/vide/semiconducteur on doit aligner les énergies de Fermi de chaque semiconducteur

$$E_F = \frac{E_1(j) + E_2(j)}{2} \quad , \quad j = 1,3 \quad . \quad (85)$$

Une étude récente [18] a montré expérimentalement que la différence entre le milieu du gap d'un semiconducteur et le niveau d'énergie du vide est contante

$$E_v = E_F + 5 \quad , \quad (86)$$

où les énergies sont exprimées en électron-volt .

## VII - RESULTATS ET DISCUSSION

Figure 6

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le système AlAs/vide/AlAs.  $k_1$  est exprimé en unités  $\Pi/a_0$ . Les extrémités des bandes de volume de AlAs sont représentées en trait plein. Les états électroniques localisés sont représentés en trait interrompu.

Figure 7

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le système GaAs/vide/GaAs.  $k_1$  est exprimé en unités  $\Pi/a_0$ . Les extrémités des bandes de volume de GaAs sont représentées en trait plein. Les états électroniques localisés sont représentés en trait interrompu.

Figure 8

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le système InAs/vide/InAs.  $k_1$  est exprimé en unités  $\Pi/a_0$ . Les extrémités des bandes de volume de InAs sont représentées en trait plein. Les états électroniques localisés sont représentés en trait interrompu.

Dans les deux premiers cas , le système AlAs/vide/AlAs et le système GaAs/vide/GaAs , on observe l'apparition de deux états électroniques localisés . L'un se trouve dans la bande interdite du semiconducteur , l'autre au dessus de la bande de conduction du semiconducteur . Les énergies  $E = f(k_1)$  correspondant à ces deux états , pour un vecteur de propagation donné , diminuent rapidement quand l'épaisseur du vide augmente . A partir de  $2 \text{ \AA}$  les deux états électroniques localisés ne subissent aucune évolution . Ce sont donc les états du système semiconducteur/vide/semiconducteur dont les deux interfaces sont indépendantes et n'interagissent plus . Il est à noter que la surface située en  $z_3 = 0$  est constituée d'atomes de type 2 ( $\beta = 2$ ) et la surface située en  $z_3 = L$  est formée d'atomes de type 1 ( $\beta = 1$ ) . Par contre si on choisit deux surfaces libres identiques , on obtient un seul état électronique localisé doublement dégénéré et qui s'identifie à l'état obtenu pour l'interface semiconducteur/vide .

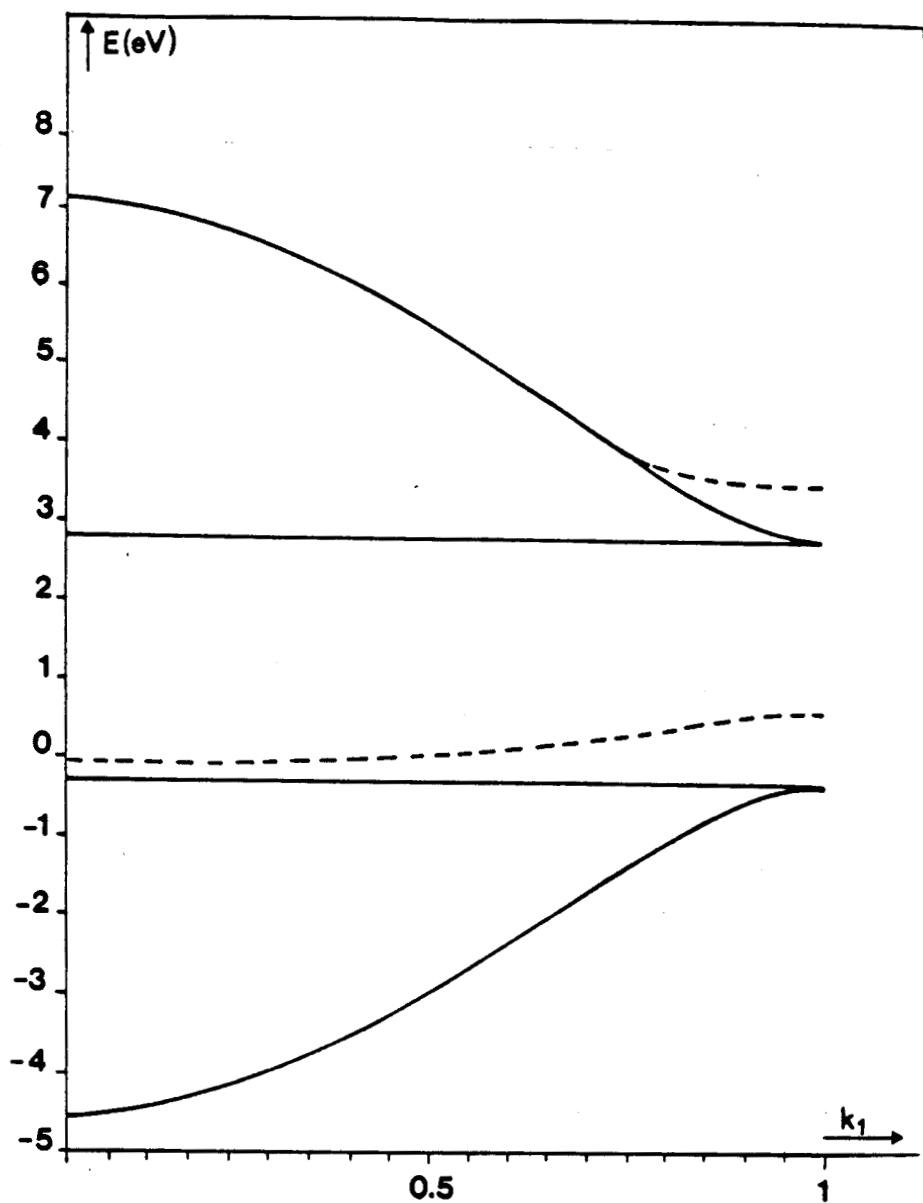


Figure 6

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le système AlAs/air/AlAs.  $k_1$  est exprimé en unités  $\Pi/a_0$ . Les extrémités des bandes de volume de AlAs sont représentées en trait plein. Les états électroniques localisés sont représentés en trait interrompu.

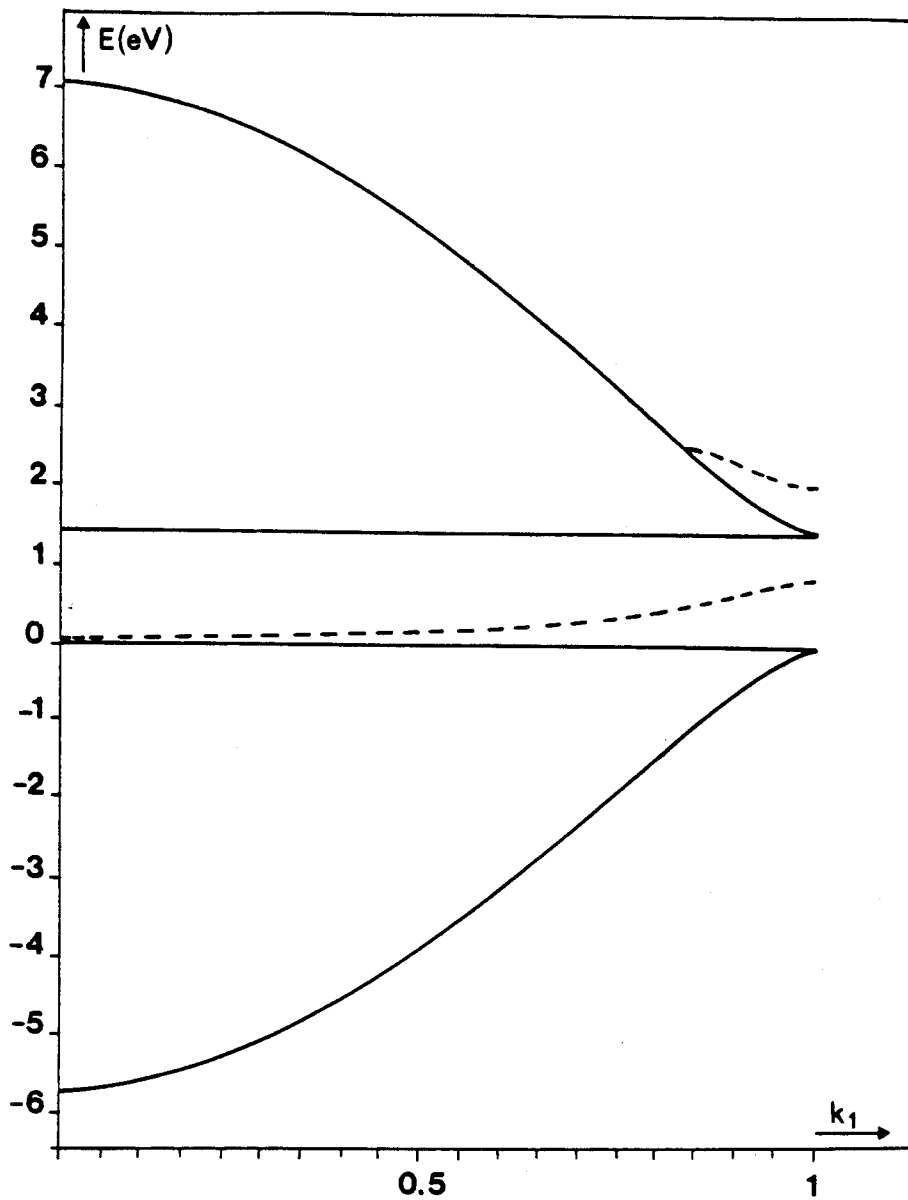


Figure 7

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le système GaAs/vide/GaAs.  $k_1$  est exprimé en unités  $\pi/a_0$ . Les extrémités des bandes de volume de GaAs sont représentées en trait plein. Les états électroniques localisés sont représentés en trait interrompu.

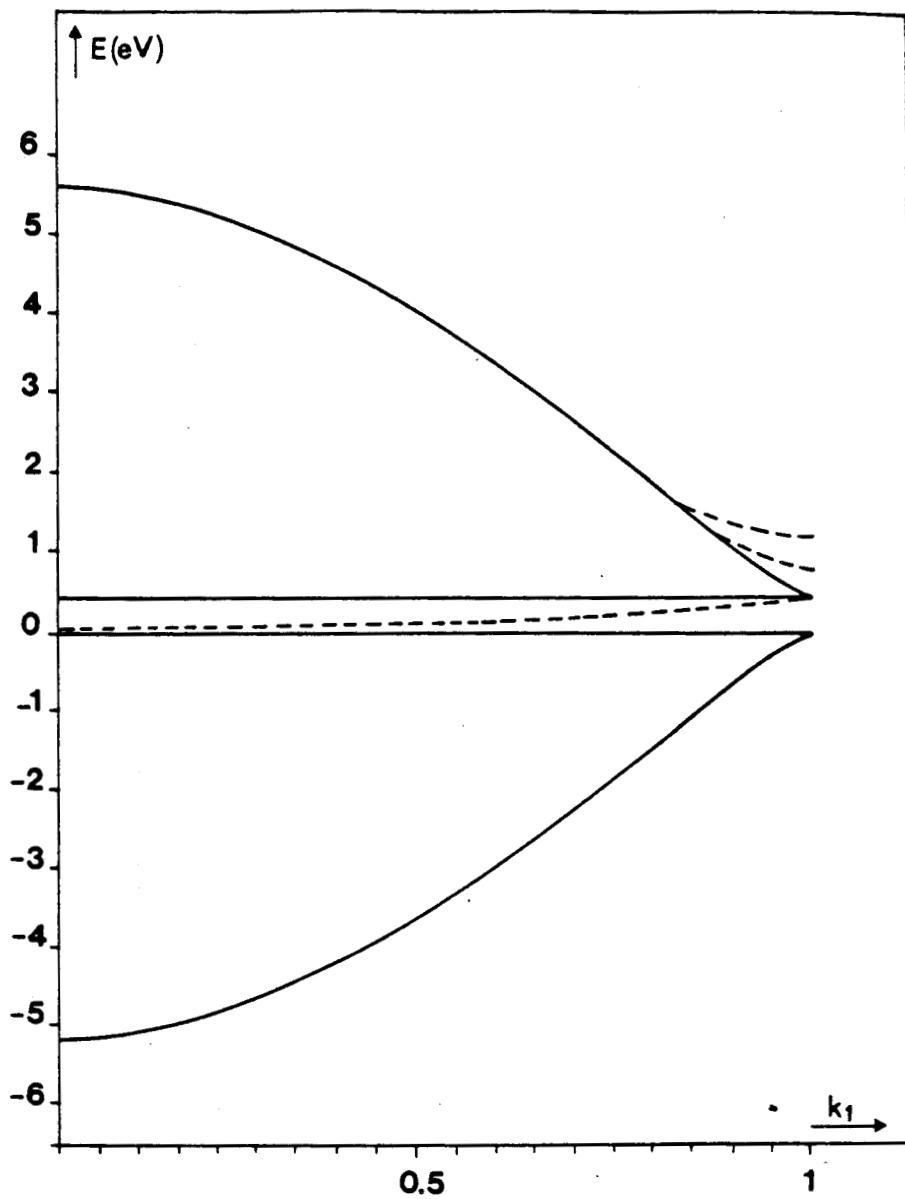


Figure 8

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le système InAs/vide/InAs.  $k_1$  est exprimé en unités  $\Pi/a_0$ . Les extrémités des bandes de volume de InAs sont représentées en trait plein. Les états électroniques localisés sont représentés en trait interrompu.



## **CHAPITRE 3**

### **ETUDE DE LA JONCTION**

### **METAL / SEMICONDUCTEUR**

## I - INTRODUCTION

La jonction métal/semiconducteur est du plus grand intérêt scientifique et technologique .on réalise une telle jonction à chaque fois que l'on procède à une métallisation , que l'on réalise un contact ohmique , etc..

Pour cette raison beaucoup d'études ont été réalisées pour essayer de comprendre les mécanismes de formation de la barrière Schottky et de montrer l'influence des facteurs structuraux , métallurgiques et chimiques .

A la lumière des résultats expérimentaux on peut classer ces jonctions en trois groupes :

i ) des interfaces abruptes pour lesquelles on observe la formation d'une jonction idéale avec une séparation entre la structure du métal et celle du semiconducteur [19 - 21].

ii ) des interfaces pour lesquelles des éléments chimiques tels que l'hydrogène ou l'oxygène se trouvent piégés à l'interface entre le semiconducteur et le métal [22] .

iii ) des interfaces pour lesquelles on observe une interdiffusion entre le métal et le semiconducteur avec formation ou non d'un nouveau composé à l'interface [23 - 28] .

La nature d'une telle interface peut être déterminée grâce à différentes techniques expérimentales . La spectroscopie Auger (AES) et la spectroscopie par photoémission des rayons X sont les plus utilisées pour de telles caractérisations et s'adressent aux interfaces constituées par un film déposé sur un substrat . Pour les interfaces épaisses d'autres techniques sont utilisées telle la mesure du courant en fonction de la différence de potentiel appliquée aux électrodes .

Cette somme de résultats représente pour le théoricien un véritable défi . Ainsi beaucoup de modèles théoriques ont été proposés pour expliquer la formation de la barrière Schottky et les propriétés électroniques de la jonction métal/semiconducteur , mais aucun n'est en accord avec tous les résultats expérimentaux obtenus . Deux types de modèles sont cependant très utilisés :

i ) un modèle qui tient compte des défauts et est applicable quand le semiconducteur a un nombre significatif de défauts natifs à sa surface ou près de cette surface [29 - 31].

ii ) l'autre modèle est utilisé quand il y a peu de défauts . Ce sont , alors , les états électroniques de l'interface , quand leur densité est significative , qui déterminent la hauteur de la barrière Schottky et par suite fixent les propriétés électroniques de cette jonction [32 - 34] .

L'étude présentée ici est développée autour de la théorie de réponse d'interface et s'adresse aux interfaces abruptes exemptes de défauts . Dans le cadre de l'approximation des liaisons fortes la structure des bandes de volume du semiconducteur est décrite par un modèle à deux bandes s et le métal est décrit par le modèle du cristal cubique simple .

Dans ce chapitre on s'intéressera aux états électroniques localisés dans la structure métal/semiconducteur/métal (section I), dans un film de semiconducteur déposé sur un métal semi-infini (section I) , dans un film métallique adsorbé sur un semiconducteur semi-infini (section II) et dans la structure semiconducteur/métal/semiconducteur (section III) .

## II - SYSTEME METAL/SEMI CONDUCTEUR/METAL

### 1 - Modèle

Considérons un système composite formé d'un métal semi-infini ( $i=1$ ) situé dans le demi-espace défini par  $l_3 \leq 0$ , d'un semiconducteur ( $i=2$ ) situé dans l'espace défini par  $1 \leq l_3 \leq L$  et d'un autre métal semi-infini ( $i=3$ ) situé dans l'espace défini par  $l_3 \geq L + 1$ . On observe qu'à l'interface la structure cubique simple du métal est remplacée par la structure cubique centrée (figure 9). Les matériaux sont couplés grâce aux intégrales de recouvrement  $\gamma_I$  et  $\gamma_{II}$ .

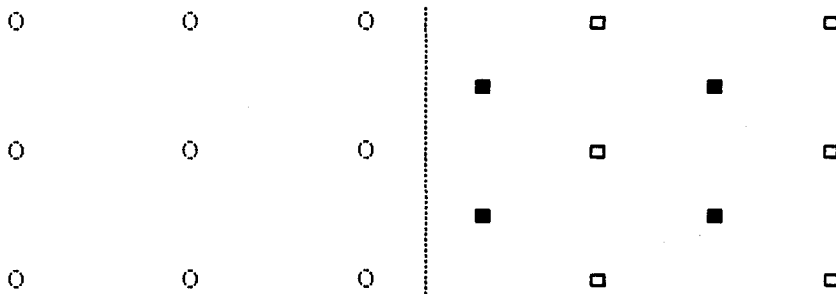


Figure 9 . Géométrie de l'interface métal/semiconducteur .  $\gamma_I$  est l'intégrale de résonance du métal . Les interactions dans le semiconducteur sont représentées par  $\gamma_2$  .  $\gamma_I$  est l'intégrale de recouvrement .

## 2 - Fonction réponse de référence

La fonction réponse  $\overleftrightarrow{G}_{\bullet}$  de référence du système est une matrice diagonale par blocs [1]

$$\overleftrightarrow{G}_{\bullet} = \begin{vmatrix} G_{\bullet 1} & & \\ & G_{\bullet 2} & \\ & & G_{\bullet 3} \end{vmatrix}, \quad (87)$$

où  $G_{\bullet 1}$  et  $G_{\bullet 3}$  sont les fonctions réponse de référence des métaux 1 et 3 et  $\overleftrightarrow{G}_{\bullet 2}$  la fonction réponse de référence du semiconducteur.  $\overleftrightarrow{G}_{\bullet 2}$  est donnée par la relation (52).  $\overleftrightarrow{G}_{\bullet 1}$  et  $\overleftrightarrow{G}_{\bullet 3}$  sont données par la relation [35]

$$\overleftrightarrow{G}_{\bullet oi}(l_3, l_3'; k_{//}, E) = \frac{t_i |l_3 - l_3'| + 1}{\gamma_i (t_i^2 - 1)} \quad (87)$$

où

$\gamma_i$  est l'intégrale de résonance du métal  $i$  ( $i = 1, 3$ ),

$$t_i = \begin{cases} \xi_i - \text{sgn}(\xi_i) [\xi_i^2 - 1]^{1/2}, & |\xi_i| > 1 \\ \xi_i + i [1 - \xi_i^2]^{1/2}, & |\xi_i| < 1 \end{cases}, \quad (88)$$

avec

$$\xi_i = \frac{E_0 - E_i}{2\gamma_i} - \cos(a_0 k_1) - \cos(a_0 k_2) \quad (89)$$

la structure de bande en volume du métal étant

$$E_i(k) = E_0 - 2\gamma_i [ \cos(a_0 k_1) + \cos(a_0 k_2) + \cos(a_0 k_3) ] \quad . \quad (90)$$

On obtient dans le plan des surfaces

$$\overleftarrow{G}_{s1} = \frac{t_1}{\gamma_1(t_1^2 - 1)} \quad , \quad (91)$$

$$\overleftarrow{G}_{s3} = \frac{t_3}{\gamma_3(t_3^2 - 1)} \quad . \quad (92)$$

$\overleftarrow{G}_{s2}$  est donnée par l'équation (52) .

### 3 - Opérateur réponse de surface

L'opérateur réponse de surface du système est  $\overleftarrow{A}_s$

$$\overleftarrow{A}_s = \left| \begin{array}{ccc} A_{s1} & & \\ & \overleftarrow{A}_{s2} & \\ & & A_{s3} \end{array} \right| \quad , \quad (93)$$

où  $\overleftarrow{A}_{s2}$  est l'opérateur réponse de surface du semiconducteur avec deux surfaces libres

$$\vec{A}_{s2} = \begin{pmatrix} \frac{-t_2}{t_2 - 1} & \frac{-X^* d_2 t_2^{L+1}}{f_2(t_2^2 - 1)} \\ \frac{-X a_2 t_2^{L+1}}{f_2(t_2^2 - 1)} & \frac{-t_2}{t_2 - 1} \end{pmatrix}, \quad (94)$$

où

$$f_i = 4\gamma_i \cos(a_0 k_1 / 2) \cos(a_0 k_2 / 2), \quad (95)$$

$$X = \exp [i a_0 (k_1 + k_2) / 2], \quad (96)$$

$a_2$ ,  $d_2$  et  $t_2$  sont respectivement donnés par les équations (17), (19) et (22).

$A_{s1}$  et  $A_{s3}$  sont respectivement les opérateurs réponse de surface du métal  $i = 1$  et du métal  $i = 3$  et sont donnés dans l'espace des deux surfaces par la relation [35]

$$A_{si} = \frac{-t_i^2}{t_i^2 - 1}, \quad (95)$$

#### 4 - Opérateur réponse d'interface

L'opérateur réponse d'interface est défini par la relation

$$\vec{A} = \vec{A}_s + \vec{V}_I \vec{G}_s, \quad (96)$$



où,  $\overleftrightarrow{V}_I$  est l'opérateur de couplage du système

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{V}_I = & -f_I X^* (\delta_{1_3} \delta_{\beta_1} \delta_{1_3} \delta_{\beta_2}) - f_I X (\delta_{1_3} \delta_{\beta_2} \delta_{1_3} \delta_{\beta_1}) \\ & - f_{II} X^* (\delta_{1_3} \delta_{\beta_1} \delta_{1_3} \delta_{\beta_2}) - f_{II} X (\delta_{1_3} \delta_{\beta_2} \delta_{1_3} \delta_{\beta_1}) \quad , \quad (97) \end{aligned}$$

avec

$$f_I = \frac{f_1 + f_2}{2} \quad , \quad f_{II} = \frac{f_2 + f_3}{2}$$

On obtient l'opérateur réponse d'interface  $\overleftrightarrow{A}$  ,

$$\overleftrightarrow{A} = \left[ \begin{array}{ccc|c} \frac{-t_1^2}{t_1^2 - 1} & \frac{f_I X a_2 t_2}{f_2^2 (t_2^2 - 1)} & \frac{f_I t_2^L}{f_2 (t_2 - 1)} & 0 \\ \frac{-f_I t_1 X^*}{\gamma_1 (t_1^2 - 1)} & \frac{-t_2}{t_2 - 1} & \frac{-X d_2^* t_2^{L+1}}{f_2 (t_2^2 - 1)} & 0 \\ 0 & \frac{-X a_2 t_2^{L+1}}{f_2 (t_2^2 - 1)} & \frac{-t_2}{t_2 - 1} & \frac{-f_{II} X t_3}{\gamma_3 (t_3^2 - 1)} \\ 0 & \frac{f_{II} t_2^L}{f_2 (t_2 - 1)} & \frac{f_{II} t_2 d_2 X^*}{f_2^2 (t_2^2 - 1)} & \frac{-t_3^2}{t_3^2 - 1} \end{array} \right] \quad . \quad (98)$$

### 5 - Fonction réponse et états localisés du système

La fonction réponse du système est donnée par l'équation (61), où

$$\overleftrightarrow{\Delta} = \overleftrightarrow{A} + \overleftrightarrow{I}.$$

Les états électroniques localisés du système sont donnés par les nouveaux pôles de la fonction réponse. Ce sont les valeurs de l'énergie  $E(k_{//})$  qui annulent le déterminant de la matrice  $\overleftrightarrow{\Delta}$ .

$$\text{Det } \overleftrightarrow{\Delta} = \frac{W(k_{//}, E)}{(t_1^2 - 1)(t_2 - 1)^2(t_3^2 - 1)}, \quad (99)$$

$$W = 1 - t_2^{2L+1} + \frac{f_{II}^2 d t_2 (t_2 - t_2^{2L+1})}{f_2^2 \gamma_3 (t_2 + 1)} + \frac{f_I^2 t_{12} a (t_2 - t_2^{2L+1})}{f_2^2 \gamma_1 (t_2 + 1)}$$

$$+ \frac{f_I^2 f_{II}^2 t_1 t_2 (t_2 - t_2^{2L})}{f_2^2 \gamma_1 \gamma_3} \quad (100)$$

### III - ADSORPTION D'UN FILM METALLIQUE SUR UN SEMICONDUCTEUR SEMI-INFINI

Considérons un système composite formé d'un métal de  $L$  couches ( $i = 2$ ), situé dans l'espace défini par  $1 \leq l_2 \leq L$ , adsorbé au bout d'un semiconducteur semi-infini ( $i = 1$ ) situé dans l'espace défini par  $l_1 \leq 0$ .

La fonction réponse du système est  $\overleftrightarrow{G}_s$ . Ses éléments matriciels sont donnés par les relations suivantes

$G_{s1}(l_2, l_2', k_{//}, E) = G_{o1}(l_2, l_2', k_{//}, E)$ , pour  $l_2, l_2' \leq 0$ , dont l'expression est donnée par les équations (13-16).

$G_{s2} = G_{o2}$ , pour  $1 \leq l_2, l_2' \leq L$  dont l'expression est donnée par l'équation (87).

Les éléments matriciels de l'opérateur réponse de surface  $\overleftrightarrow{A}_s$  sont déterminés à partir des relations

$$\overleftrightarrow{A}_{s1} = X \delta_{l_2 0} \delta_{\beta 2} f G_{o1}(11, l_2', k_{//}, E), \quad l_2, l_2' \leq 0, \quad (101)$$

$G_{o1}(11, l_2', k_{//}, E)$  est donnée par les relations (13) et (15).

$$\overleftrightarrow{A}_{s2} = - \frac{\delta_{l_2 1} t_i^{l_2' + 1} + \delta_{l_2 L} t_i^{L + 2 - l_2'}}{t_i^2 - 1}, \quad 1 \leq l_2, l_2' \leq L. \quad (102)$$

L'opérateur de couplage du système composite est

$$\overleftrightarrow{V}_I = -f_I X^* \delta_{1_3} \delta_{\beta_1} \delta_{1_3} \delta_{\beta_2} - f_I X \delta_{1_3} \delta_{\beta_2} \delta_{1_3} \delta_{\beta_1} \quad (103)$$

L'opérateur réponse d'interface est défini par la relation

$$\overleftrightarrow{A} = \overleftrightarrow{A}_s + \overleftrightarrow{V}_I \overleftrightarrow{G}_s$$

$$\overleftrightarrow{A} = \begin{pmatrix} \frac{-t_1}{t_1 - 1} & \frac{-f_I X t_2}{\gamma_2 (t_2^2 - 1)} & \frac{-f_I X t_2^L}{\gamma_2 (t_2^2 - 1)} \\ \frac{f_I X^* d_1 t_1}{f_1^2 (t_1^2 - 1)} & \frac{-t_2^2}{t_2^2 - 1} & \frac{-t_2^{L+1}}{t_2^2 - 1} \\ 0 & \frac{-t_2^{L+1}}{t_2^2 - 1} & \frac{-t_2^2}{t_2^2 - 1} \end{pmatrix} \quad (104)$$

La fonction réponse du système est donnée par l'équation (61). Les nouveaux pôles de la fonction réponse sont donc les zéros du déterminant de la matrice  $\overleftrightarrow{\Delta}$ ,

$$\overleftrightarrow{\Delta} = \overleftrightarrow{A} + \overleftrightarrow{I}$$

$$\text{Det } \overleftrightarrow{\Delta} = - \frac{1}{(t_1 - 1)(t_2^2 - 1)^2} [ 1 - t_2^{2L+2} + \frac{f_{I_1}^2 d t_1}{f_1^2 \gamma_2 (t_1 + 1)} (t_2 - t_2^{2L+4}) ] \quad . \quad (105)$$

#### IV- ETUDE DU SYSTEME SEMICONDUCTEUR/METAL/SEMICONDUCTEUR

Considérons un système composite formé d'un métal de L couches ( $i = 2$ ), situé dans l'espace défini par  $1 \leq l_2 \leq L$ , et de deux semiconducteurs semi-infinis situés respectivement dans les espaces définis par  $l_3 \leq 0$  et  $l_3 \geq L + 1$ .

L'opérateur réponse de surface du système est défini par une matrice diagonale par blocs dont les éléments sont (equation (93))

$$A_{s1} = X \delta_{l_3 0} \delta_{\beta_2} f_1 G_{o1} (11, l_3' \beta') \quad , \quad \text{pour } l_3, l_3' \leq 0$$

$$A_{s2} = - \frac{\delta_{l_3 1} t_2^{1+l_3'} + \delta_{l_3 L} t_2^{L+2-l_3'}}{t_2^2 - 1} \quad , \quad \text{pour } 1 \leq l_3, l_3' \leq L$$

$$A_{s3} = X^* \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta_1} f_3 G_{os} (L2, l_3' \beta') \quad , \quad \text{pour } l_3 \geq L + 1 .$$

L'opérateur de couplage du système est

$$\begin{aligned} \overleftrightarrow{V}_I = & -f_I X^* (\delta_{1_3} \delta_{\beta_1} \delta_{1_3} \delta_{\beta'2}) - f_I X (\delta_{1_3} \delta_{\beta_2} \delta_{1_3} \delta_{\beta'1}) \\ & - f_{II} X^* (\delta_{1_3^{L+1}} \delta_{\beta_1} \delta_{1_3^L} \delta_{\beta'2}) - f_{II} X (\delta_{1_3^L} \delta_{\beta_2} \delta_{1_3^{L+1}} \delta_{\beta'1}) \end{aligned} \quad . (106)$$

L'opérateur réponse d'interface est défini par la relation

$$\overleftrightarrow{A} = \overleftrightarrow{A}_s + \overleftrightarrow{V}_I \overleftrightarrow{G}_s ,$$

où  $\overleftrightarrow{G}_s$  est une matrice diagonale par blocs donnée par l'équation (87).

$$\overleftrightarrow{A} = \left( \begin{array}{ccc|c} \frac{-t_1}{t_1 - 1} & \frac{-f_I X t_2}{\gamma_2 (t_2^2 - 1)} & \frac{-f_I X t_2^L}{\gamma_2 (t_2^2 - 1)} & 0 \\ \frac{-f_I X^* t_1}{\gamma_1 (t_1^2 - 1)} & \frac{-t_2^2}{t_2^2 - 1} & \frac{-t_2^{L+1}}{t_2^2 - 1} & 0 \\ 0 & \frac{-t_2^{L+1}}{t_2^2 - 1} & \frac{-t_2^2}{t_2^2 - 1} & \frac{-f_{II} X t_3}{\gamma_3 (t_3^2 - 1)} \\ 0 & \frac{-f_{II} X^* t_2^L}{\gamma_2 (t_2^2 - 1)} & \frac{-f_{II} X^* t_2}{\gamma_2 (t_2^2 - 1)} & \frac{-t_3^2}{t_3^2 - 1} \end{array} \right) \quad . (107)$$

Les états électroniques localisés sont donnés par les nouveaux pôles de la fonction réponse du système .Ce sont les valeurs de l'énergie  $E(k_{//})$  qui annulent le déterminant de la matrice

$$\overleftrightarrow{\Delta} = \overleftrightarrow{A} + \overleftrightarrow{I} .$$

$$\text{Det } \overleftrightarrow{\Delta} = \frac{W(k_{//}, E)}{(t_1 - 1)(t_2^2 - 1)^2(t_3 - 1)} , \quad (108)$$

$$W(k_{//}, E) = \left[ 1 - \frac{f_I^2 t_1 t_2}{\gamma_1 \gamma_2 (t_1 + 1)} \right] \left[ 1 - \frac{f_{II}^2 t_2 t_3}{\gamma_2 \gamma_3 (t_3 + 1)} \right]$$

$$- t_2^{2L} \left[ t_2 - \frac{f_I^2 t_1}{\gamma_1 \gamma_2 (t_1 + 1)} \right] \left[ t_2 - \frac{f_{II}^2 t_3}{\gamma_2 \gamma_3 (t_3 + 1)} \right] . \quad (109)$$

## V - RESULTATS ET DISCUSSION

Le semiconducteur et le métal choisis pour illustrer cette étude sont GaAs et Ag . La jonction Ag/GaAs est connue comme étant une jonction abrupte [36] . La structure Ag/GaAs/Ag (figure 10) est formé de deux métaux semi-infinis (Ag) entre lesquels se trouve un film de semiconducteur (GaAs) constitué de quatre couches , i.e 4 plans atomiques de Ga et 4 plans atomiques de As . L'intégrale de résonance de Ag est  $\gamma_1 = \gamma_3 = 0.50$  eV . L'intégrale de recouvrement de GaAs est  $\gamma_2 = 0.70$  eV . On observe l'apparition d'états électroniques localisés dans le semiconducteur . Le nombre de ces états augmente quand l'épaisseur du film augmente . Par exemple , au centre de la zone de Brillouin , le nombre de ces états est  $n = 4$  pour  $L = 1$  (1 plan atomique de Ga et 1 plan atomique de As ) ,  $n = 6$  pour  $L = 2$  et  $n = 8$  pour  $L = 4$  . De plus l'énergie de ces états augmente quand l'épaisseur du film augmente . Ce phénomène contribue certainement à la diminution de la barrière énergétique à l'interface quand l'épaisseur du film augmente , fait qui est observé expérimentalement [37] .

Le couplage entre les deux matériaux ( semiconducteur et métal ) a été choisi comme étant la moyenne arithmétique de l'intégrale de recouvrement  $\gamma_2$  du semiconducteur et de l'intégrale de rasonnance  $\gamma_1 = \gamma_3$  dans le métal , i.e  $\gamma_1 = \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} = 0.60$  eV .



Ce couplage à l'interface est un des paramètres qui caractérisent une telle jonction . Quel est alors le comportement de cette structure en fonction du couplage interfacial ?

On observe que les quatre états qui sont situés dans la bande de conduction du semiconducteur sont très peu sensibles au couplage interfacial . Par exemple pour  $k_1 = 0$  l'état localisé supérieur (plus haute énergie ) a une énergie  $E = 5.51$  eV pour un couplage  $\gamma_I = 0.60$  eV ,  $E = 5.54$  eV pour  $\gamma_I = 0.30$  eV et  $E = 5.54$  eV pour  $\gamma_I = 0.80$  eV . En outre ces états sont exactement les mêmes aussi bien pour la structure Ag/GaAs/Ag (figure 10) que pour la structure Ag/GaAs . Il apparaît donc que ces états appartiennent en propre au semiconducteur (états qui ont un caractère de conduction ) . Par contre les états qui ont un caractère de valence sont sensibles au couplage à l'interface . En effet les deux états qui sont situés en dessous de la bande de valence du semiconducteur disparaissent quand on diminue le couplage . Pour  $\gamma_I = 0.30$  eV ces deux états n'existent plus . Pour  $\gamma_I = 0.60$  eV (figure 10) ils ont les énergies  $E_1(k_1 = 0) = - 6.29$  eV et  $E_2(k_2 = 0) = - 6.66$  eV . L'état d'énergie  $E_1$  est exactement le même que celui obtenu en dessous de la bande de volume du métal pour la jonction Ag/GaAs (figure 11) . Ce sont donc des états d'interface induits par le métal [38] .

Pour le système GaAs/Ag (figure 12) il n'y a pas d'états localisés en dessous de la bande de volume du métal . Toutefois ces états réapparaissent quand le couplage augmente ou quand l'épaisseur du film augmente .

Les résultats et conclusions présentés ici peuvent être reconduits intégralement pour les systèmes Ag/AlAs/Ag , Ag/AlAs et AlAs/Ag .

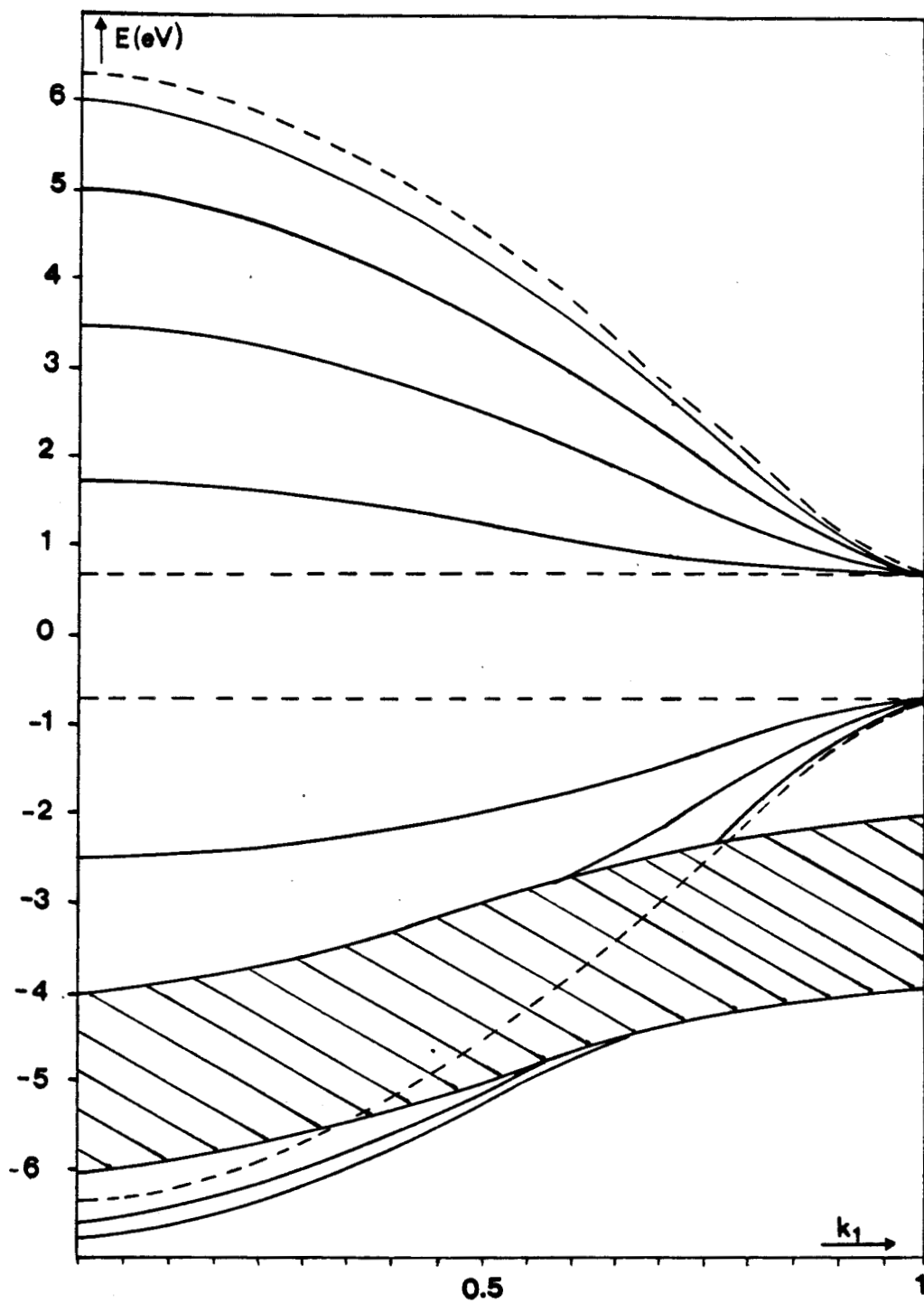


Figure 10

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le système Ag/GaAs/Ag.  $k_1$  est exprimé en unités  $\pi/a_0$ . Les extrémités des bandes de volume de GaAs sont représentées en trait interrompu. La région hachurée représente la bande de volume du métal. Les états électroniques localisés sont représentés en trait plein.

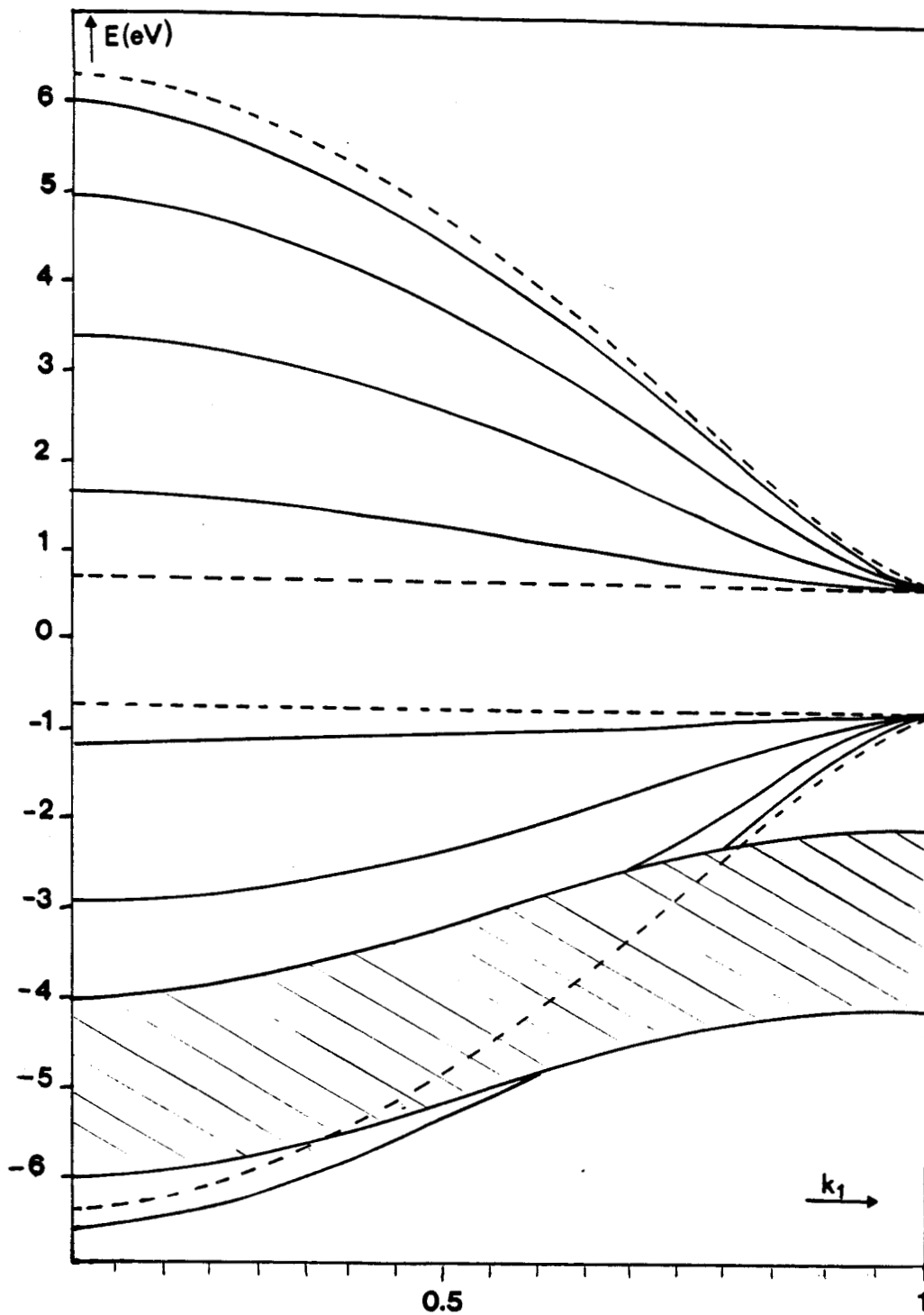


Figure 11

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le système Ag/GaAs ( 4 couches de GaAs adsorbées au bout du métal semi-infini ).  $k_1$  est exprimé en unités  $\Pi/a_0$  . les extrémités des bandes de volume de GaAs sont représentées en trait interrompu . La région hachurée représente la bande de volume du métal . Les états électroniques localisés sont représentés en trait plein .

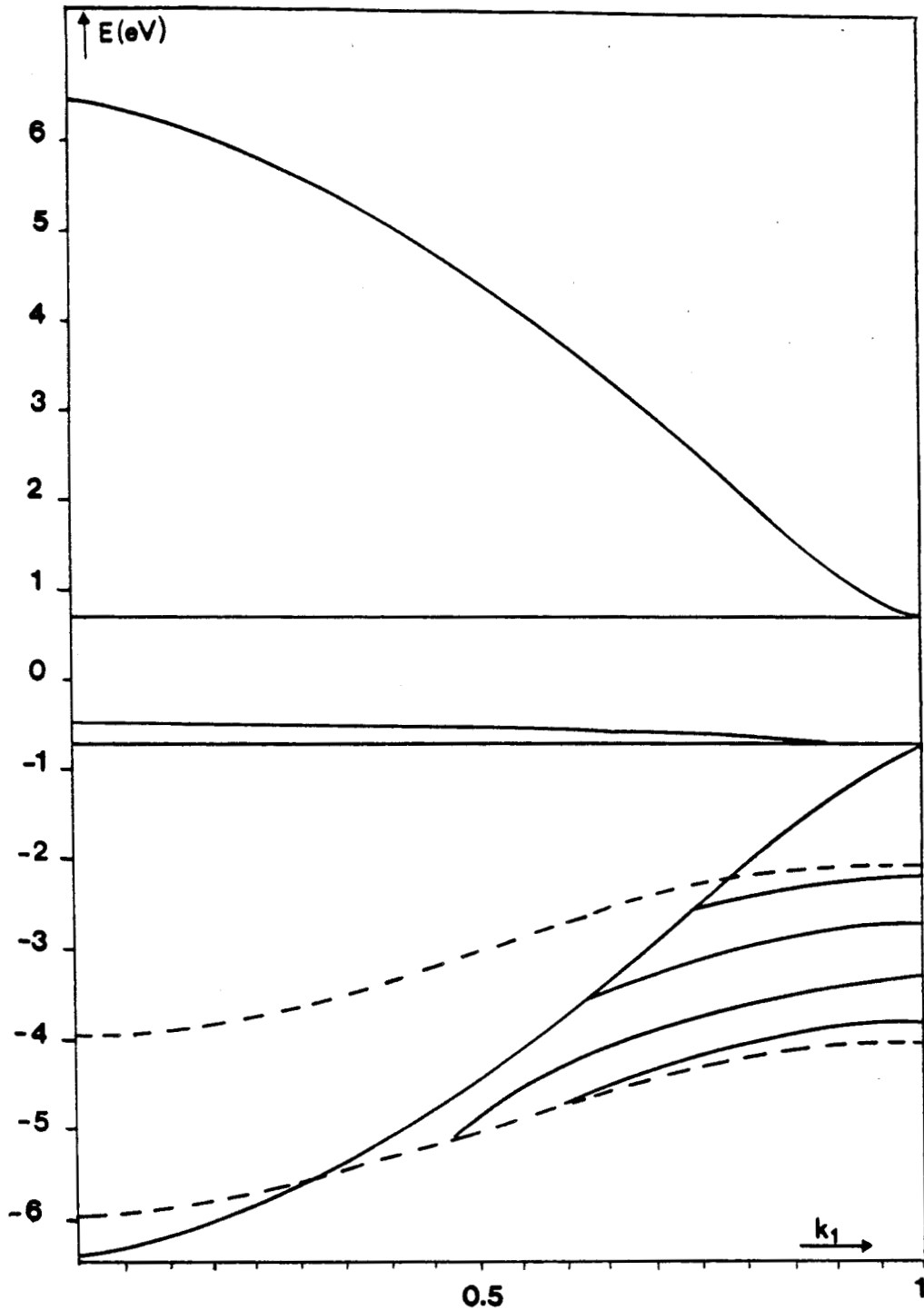


Figure 12

Courbes de dispersion  $E = f(k_1)$  pour le système GaAs/Ag (4 couches de Ag adsorbées au bout du semiconducteur semi-infini).  $k_1$  est exprimé en unités  $\pi/a_0$ . Les régions hachurées représentent les bandes de volume du semiconducteur. Les extrémités de la bande de volume du métal sont représentées en trait interrompu. Les états électroniques localisés sont représentés en trait plein.

## **CHAPITRE 4**

# **PHONONS DE SANDWICH POUR CRISTAUX CUBIQUES CENTRES**

## PHONONS DE SANDWICH POUR DES CRISTAUX CUBIQUES CENTRES

### I - Introduction

Les modes de phonons localisés optiques et acoustiques ont été prédits auparavant [39 , 40] à l'aide d'un modèle utilisant des cristaux cubiques simples . Dans ce chapitre on étudie ces mêmes phonons dans des sandwiches de cristaux cubiques centrés .

Le système composite étudié ici est formé d'une lame cristalline située entre deux cristaux semi-infinis . L'étude est développée en utilisant des cristaux cubiques centrés monoatomiques . La simplicité du modèle permet l'obtention de la fonction réponse du système sous forme analytique . La connaissance de cette fonction réponse permet d'étudier les propriétés vibrationnelles du système composite et en particulier l'obtention des modes de phonons localisés . Comme c'est le cas pour le modèle de Montroull-Potts [41] , notre modèle décrit les phonons polarisés transversalement (modes transverses ) et ne décrit pas les phonons polarisés dans le plan sagittal qui est le plan qui contient le vecteur de propagation  $\vec{k}_{//}$  , parallèle aux plans des interfaces .

## II - MODELE DE PHONONS EN VOLUME ET FONCTION REPONSE

### 1 - Description du modèle

On considère un cristal dont la maille est cubique centrée , dont les atomes ont la masse  $m_i$  .  $u_\alpha(l\beta)$  représente la composante dans la direction  $\alpha = 1, 2$  ou  $3$  du vecteur déplacement de l'atome du site  $(l\beta)$  . L'énergie potentielle associée au cristal a la forme :

$$\phi_i = \frac{\beta_i}{2} \sum_{l,\beta} \sum_{l',\beta'} \sum_{\alpha} [ u_\alpha(l\beta) - u_\alpha(l'\beta') ]^2 \quad , \quad (108)$$

où  $l' = l \pm 1$  ,  $\beta, \beta' = 1, 2$  et  $\beta_i$  la constante de force qui représente les interactions entre l'atome du cristal  $i$  et ses premiers voisins .

En admettant que les déplacements ont une dépendance sinusoïdale du temps , on obtient , à partir de la relation (108) , un système de trois équations de mouvement

$$\sum_{l'\beta'} H_{oi}(l\beta, l'\beta'; \omega^2) u_\alpha(l'\beta') = 0 \quad , \quad (109)$$

avec

$$H_{oi}(l\beta, l'\beta'; \omega^2) = (\omega^2 - 8\beta_i/m_i) \delta_{ll'} \delta_{\beta\beta'} + \beta_i/m_i \sum_{l''\beta''} \delta_{ll''} \delta_{\beta\beta''} \quad , \quad (110)$$

où  $(l''\beta'')$  représente les sites des 8 atomes premiers voisins de l'atome du site  $(l\beta)$  .



Grâce aux relations (109) et (110) on obtient les relations de dispersion pour les phonons en volume à partir de

$$\begin{bmatrix} \frac{8\beta_i}{m_i} - \omega_j^2(\Phi) & -\frac{8\beta_i}{m_i} F(\Phi) \\ -\frac{8\beta_i}{m_i} F(\Phi) & \frac{8\beta_i}{m_i} - \omega_j^2(\Phi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W(1|\Phi_j) \\ W(2|\Phi_j) \end{bmatrix} = 0, \quad (111)$$

où

$\Phi = \vec{k} a$ ,  $\vec{k}$  est le vecteur de propagation,  $a$  étant le paramètre du réseau et  $F(\Phi) = \cos(\Phi_1/2)\cos(\Phi_2/2)\cos(\Phi_3/2)$ .

La résolution de ce système donne les relations de dispersion suivantes

$$\omega_j^2(\Phi) = \frac{8\beta_i}{m_i} [ 1 \pm F(\Phi) ] \quad , \quad (112)$$

avec,  $j = 1$  pour le signe  $+$  et  $j = 2$  pour le signe  $-$ .

Les vecteurs propres  $W(1|\Phi_j)$  et  $W(2|\Phi_j)$  sont

$$W(1|\Phi_j) = \frac{8\beta_i - m_i \omega_j^2(\Phi)}{[ (8\beta_i F(\Phi))^2 + (8\beta_i - m_i \omega_i(\Phi))^2 ]^{1/2}} \quad , (113)$$

$$W(2|\Phi_j) = \frac{8\beta_i F(\Phi)}{[ (8\beta_i F(\Phi))^2 + (8\beta_i - m_i \omega_i(\Phi))^2 ]^{1/2}} \quad . (114)$$

Finalement on obtient

$$W(2|\Phi_2) = W(1|\Phi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , (115)$$

$$W(1|\Phi_1) = -W(2|\Phi_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad . (116)$$

## 2 - Fonction réponse en volume

Les propriétés vibrationnelles du cristal considéré peuvent être étudiées à l'aide de la théorie de réponse d'interface en déterminant la fonction réponse en volume définie par

$$\overleftrightarrow{H}_{oi} \cdot \overleftrightarrow{G}_{oi} = \overleftrightarrow{I} \quad , (117)$$

$\overleftrightarrow{I}$  étant la matrice identité .

La solution de cette équation est donnée par la relation

$$G_{oi}(\ell\beta, \ell'\beta', \omega^2) = \frac{1}{N} \sum_k \exp(ik \cdot x \left[ \begin{smallmatrix} \ell\ell' \\ \beta\beta' \end{smallmatrix} \right]) \{ \beta\beta' \} \quad , \quad (118)$$

avec ,

$$\{ \beta\beta' \} = \frac{W(\beta|\Phi_1) W(\beta'|\Phi_1)}{\omega^2 - \omega_1^2(\Phi)} + \frac{W(\beta|\Phi_2) W(\beta'|\Phi_2)}{\omega^2 - \omega_2^2(\Phi)} \quad , \quad (119)$$

$x \left[ \begin{smallmatrix} \ell\ell' \\ \beta\beta' \end{smallmatrix} \right]$  est la distance entre l'atome de type  $\beta'$  situé dans la maille élémentaire  $\ell'$  et celui de type  $\beta$  situé dans la maille  $\ell$  et  $N$  est le nombre de mailles élémentaires .

On obtient

$$\{11\} = \{22\} = \frac{m_i^2 \omega^2 - 8\beta_i m_i}{(m_i \omega^2 - 8\beta_i)^2 - 64\beta_i^2 F^2(\Phi)} \quad , \quad (120)$$

$$\{12\} = \frac{-8\beta_i m_i F(\Phi)}{(m_i \omega^2 - 8\beta_i)^2 - 64\beta_i^2 F^2(\Phi)} \quad . \quad (121)$$

Pour exploiter la symétrie de translation parallèlement à la surface (001) on introduit le vecteur d'onde  $\vec{k}_{//}$  parallèle aux plans (001) et on effectue la transformée de Fourier partielle de la fonction réponse .

$$\vec{k}_{//} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 ,$$

où  $\vec{k}_1$  et  $\vec{k}_2$  sont les composantes du vecteur d'onde dans les directions 1 et 2 de la surface (001) .

Ainsi la fonction réponse peut s'écrire

$$G_{oi}(\ell\beta, \ell'\beta', \omega^2) = \frac{1}{N_s} \sum_{\vec{k}_{//}} G_{oi}(\ell_s\beta, \ell'_s\beta'; \vec{k}_{//}, \omega^2) \exp(i\vec{k}_{//} \cdot \vec{x}(\ell\ell')) , \quad (122)$$

où  $N_s$  est le nombre de mailles de la surface .

En identifiant les équations (118) et (122) on obtient finalement

$$G_{oi}(\ell_s\beta, \ell'_s\beta'; \vec{k}_{//}, \omega^2) = \frac{1}{L_s} \sum_{k_3} \exp(i\vec{k}_{//} \cdot \vec{x}(\ell\ell')) \exp(i\vec{k}_{//} \cdot \vec{x}(\beta\beta')) \{ \beta\beta' \} , \quad (123)$$

où  $L_s$  est le nombre de mailles entre deux surfaces (001) .

Les éléments matriciels de la fonction réponse sont donnés par les relations suivantes

$$G_{oi}(\ell_3 \beta, \ell'_3 \beta; k_{//}, \omega^2) = \frac{8\beta_i m_i - \omega^2 m_i^2}{f_i^2} \times \frac{t_i^{|\ell - \ell'| + 1}}{t_i^2 - 1}, \quad (124)$$

$$G_{oi}(\ell_3 1, \ell'_3 2; k_{//}, \omega^2) = \frac{X^* m_i}{f_i} t_i \left[ \frac{t_i^{|\ell_3 - \ell'_3|} + t_i^{|\ell_3 - \ell'_3 - 1|}}{t_i^2 - 1} \right], \quad (125)$$

$$G_{oi}(\ell_3 \beta, \ell'_3 \beta'; k_{//}, \omega^2) = \frac{X m_i}{f_i} t_i \left[ \frac{t_i^{|\ell_3 - \ell'_3|} + t_i^{|\ell_3 - \ell'_3 + 1|}}{t_i^2 - 1} \right], \quad (126)$$

avec

$$f_i = 4\beta_i \cos(\Phi_1/2) \cos(\Phi_2/2), \quad (127)$$

$$a_i = \omega^2 - \frac{8\beta_i}{m_i}, \quad (128)$$

$$X = \exp [i (\Phi_1 + \Phi_2)/2], \quad (129)$$

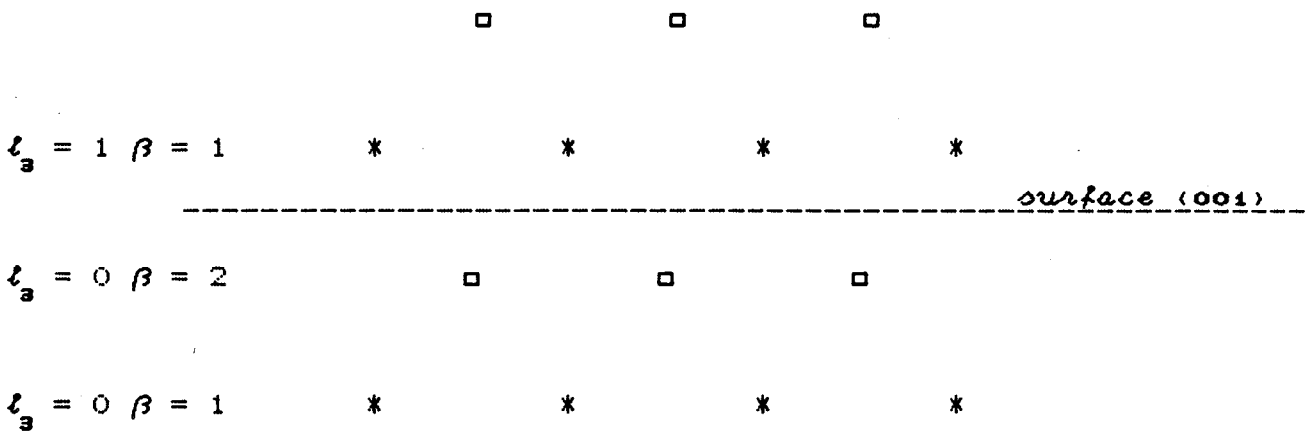
$$t_i = \begin{cases} \xi_i - (\xi_i^2 - 1)^{1/2} & , \quad \xi_i > 1 \\ \xi_i + i (1 - \xi_i^2)^{1/2} & , \quad |\xi_i| < 1 \\ \xi_i + (1 - \xi_i^2)^{1/2} & , \quad \xi_i < -1 \end{cases}, \quad (130)$$

$$\xi_i = \frac{a_i^2 m_i^2}{2f_i^2} - 1 \quad (131)$$

### III - OPERATEUR DE CLIVAGE ET OPERATEUR REPONSE D'UN CRISTAL SEMI-INFINI

#### 1 - Opérateur de clivage

Pour créer une surface (001) dans un cristal cubique centré il suffit de couper toutes les liaisons entre deux plans voisins .La géométrie de la surface (001)est représentée sur la figure suivante .



géométrie de la surface (001) .

La création de cette surface correspond à un opérateur de clivage  $\overleftarrow{V}_{oi}$ .  
L'hamiltonien du système devient

$$\overleftarrow{h}_{oi} = \overleftarrow{H}_{oi} + \overleftarrow{V}_{oi} \quad , (132)$$

Comme cela a été fait pour la fonction réponse , on effectue la transformée de Fourier de l'opérateur de clivage pour exploiter la symétrie de translation parallèlement à la surface (001) .On obtient

$$\overleftrightarrow{V}_{oi} = \begin{vmatrix} \frac{4 \beta_i}{m_i} & \frac{-f_i X}{m_i} \\ \frac{-f_i X^*}{m_i} & \frac{4 \beta_i}{m_i} \end{vmatrix} \quad . \quad (133)$$

## 2 - Opérateur réponse

L'opérateur réponse est donné par la relation

$$\overleftrightarrow{A}_{oi} = \overleftrightarrow{V}_{oi} \cdot \overleftrightarrow{G}_{oi} \quad , \quad (134)$$

ou encore sous forme d'éléments matriciels

$$A_{oi}(\ell_3\beta, \ell_3'\beta') = \sum_{\ell_3''\beta''} V_{oi}(\ell_3\beta, \ell_3''\beta'') G_{oi}(\ell_3''\beta'', \ell_3'\beta') \quad , \quad (135)$$

avec  $\ell_3'' = 0, 1$  et  $\beta'' = 1, 2$ .

Pour la suite des calculs on posera  $f = \cos(\Phi_1/2)\cos(\Phi_2/2)$ .

L'opérateur réponse du cristal semi-infini dont la surface libre est située entre les plans définis par  $\ell_3 = 0$ ,  $\beta = 2$  et  $\ell_3 = 1$ ,  $\beta = 1$  est donné par la relation

$$A_{oi}(\ell_3\beta, \ell_3'\beta') = \frac{-4\beta}{m_i} \left[ (f\delta_{\ell_3 1}\delta_{\beta 1}X^* - \delta_{\ell_3 0}\delta_{\beta 2}) \cdot G_{oi}(02, \ell_3'\beta') \right. \\ \left. + (fX\delta_{\ell_3 0}\delta_{\beta 2} - \delta_{\ell_3 1}\delta_{\beta 1}) G_{oi}(11, \ell_3'\beta') \right] \quad , \quad (136)$$

où les éléments de la fonction réponse sont donnés par les relations (124), (125) et (126).

Dans le cas où la surface libre du cristal est située entre les plans définis par  $\ell_3 = L$ ,  $\beta = 2$  et  $\ell_3 = L + 1$ ,  $\beta = 1$  l'opérateur de clivage devient



$$V_{oi}(\ell_3\beta, \ell_3''\beta'') = \frac{-4\beta_i}{m_i} \left[ fX\delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{\ell_3'' L+1} \delta_{\beta'' 1} - \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{\ell_3'' L} \delta_{\beta'' 2} \right. \\ \left. + fX^* \delta_{\ell_3'' L} \delta_{\beta'' 2} \delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta 1} - \delta_{\ell_3'' L+1} \delta_{\beta'' 1} \delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta 1} \right] . \quad (137)$$

En utilisant la relation (135) , avec  $\ell_3 = L ; L + 1$  , on obtient l'opérateur réponse du cristal semi-infini défini par  $\ell_3 \geq L + 1$

$$A_{oi}(\ell_3\beta, \ell_3'\beta') = \frac{-4\beta_i}{m_i} \left[ (f\delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta 1} fX^* - \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta 2}) \cdot G_{oi}(L2, \ell_3'\beta') \right. \\ \left. + (fX \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta 2} - \delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta 1}) G_{oi}(L+11, \ell_3'\beta') \right] . \quad (138)$$

#### IV - OPERATEUR DE CLIVAGE ET OPERATEUR REPONSE D'UN CRISTAL AVEC DEUX SURFACES LIBRES

##### 1 - Opérateur de clivage

On considère une lame d'un cristal cubique centré dont les surfaces libres sont situées en  $\ell_3 = 1$  et  $\ell_3 = L$  . Cette lame est obtenue en coupant toutes les liaisons entre deux plans (001)voisins . L'opérateur de clivage  $\overleftrightarrow{V}_{oi}$  correspondant à la création de ces deux surfaces est obtenu à partir de la relation (132)

$$\begin{aligned}
V_{oi}(\ell_3\beta, \ell_3''\beta'') &= \frac{-4\beta_i}{m_i} \left( \delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta 1} fX^* \delta_{\ell_3 0} \delta_{\beta'' 2} + fX \delta_{\ell_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta'' 1} \right. \\
&- \delta_{\ell_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{\ell_3 0} \delta_{\beta'' 2} - \delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta 1} \delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta'' 1} + fX \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta'' 1} - \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta'' 2} \\
&\left. + fX^* \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta'' 2} \delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta 1} - \delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta'' 1} \delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta 1} \right) \quad . \quad (139)
\end{aligned}$$

A partir de la relation (135) on obtient l'opérateur réponse  $\overleftrightarrow{A}_{oi}$  de la lame cristalline

$$\begin{aligned}
A_{oi}(\ell_3\beta, \ell_3'\beta') &= \frac{-4\beta_i}{m_i} \left( f\delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta 1} X^* \cdot G_{oi}(02, \ell_3'\beta') - \delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta 1} \cdot G_{oi}(11, \ell_3'\beta') \right. \\
&\left. - \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta 2} \cdot G_{oi}(L2, \ell_3'\beta') + \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta 2} \right) fX G_{oi}(L+11, \ell_3'\beta') \quad \left. \right) \quad . \quad (140)
\end{aligned}$$

L'opérateur réponse de surface du cristal avec deux surfaces libres est obtenu à partir de l'équation (140) en imposant la relation  $1 \leq \ell_3' \leq L$ . Son expression dans le plan des surfaces est

$$\vec{A}_{si} = \frac{-4\beta_i}{m_i} \begin{vmatrix} fX^*G_{oi}(02,11) - G_{oi}(11,11) & fX^*G_{oi}(02,L2) - G_{oi}(11,L2) \\ fXG_{oi}(L+1,11) - G_{oi}(L2,11) & fXG_{oi}(L+1,L2) - G_{oi}(L2,L2) \end{vmatrix} , \quad (141)$$

où les différents éléments matriciels  $G_{oi}(\ell_3\beta, \ell_3'\beta')$  de la fonction réponse sont donnés par les relations (124), (125) et (126).

## V - PHONONS DE SANDWICH

### 1 - Opérateur de couplage et opérateur réponse d'interface

On considère un système composite formé de deux cristaux cubiques centrés semi-infins situés, l'un dans le demi-espace défini par  $\ell_3 \leq 0$  ( $i = 1$ ), l'autre dans le demi-espace défini par  $\ell_3 \geq L + 1$  ( $i = 3$ ) et d'une lame de cristal située entre les surfaces libres définies par  $\ell_3 = 1, \beta = 1$  et  $\ell_3 = L, \beta = 2$ . La géométrie du sandwich est représentée sur la figure 13. Les interactions entre le cristal semi-infini  $i = 1$  (resp. 3) et la lame cristalline  $i = 2$  sont représentées par les constantes de forces  $\beta_I$  (resp.  $\beta_{II}$ ) telles que :

$$\beta_I = \frac{\beta_1 + \beta_2}{2} , \quad \beta_{II} = \frac{\beta_1 + \beta_3}{2} .$$

L'opérateur réponse d'interface est défini par la relation

$$\overleftrightarrow{A} = \overleftrightarrow{A}_s + \overleftrightarrow{V}_I \cdot \overleftrightarrow{G}_s \quad , (142)$$

où

$$* \quad \overleftrightarrow{A}_s = \begin{vmatrix} \overleftrightarrow{A}_{s1} & 0 & 0 \\ 0 & \overleftrightarrow{A}_{s2} & 0 \\ 0 & 0 & \overleftrightarrow{A}_{s3} \end{vmatrix} \quad , (143)$$

$\overleftrightarrow{A}_{s1}$ ,  $\overleftrightarrow{A}_{s2}$  et  $\overleftrightarrow{A}_{s3}$  étant respectivement les opérateurs réponse de surface du cristal semi-infini  $i = 1$ , de la lame  $i = 2$  et du cristal semi-infini  $i = 3$ . Ils sont donnés par les relations (136), (138) et (141).

\*  $\overleftrightarrow{G}_s$  est la fonction réponse de référence du système composite

$$\overleftrightarrow{G}_s = \begin{vmatrix} \overleftrightarrow{G}_{s1} & 0 & 0 \\ 0 & \overleftrightarrow{G}_{s2} & 0 \\ 0 & 0 & \overleftrightarrow{G}_{s3} \end{vmatrix} \quad , (144)$$

avec

$$G_{s1}(\ell_3\beta, \ell'_3\beta') = G_{o1}(\ell_3\beta, \ell'_3\beta') \quad , \ell_3, \ell'_3 \leq 0 ,$$

$$G_{s2}(\ell_3\beta, \ell'_3\beta') = G_{o2}(\ell_3\beta, \ell'_3\beta') \quad , 1 \leq \ell_3, \ell'_3 \leq L ,$$

$$G_{s3}(\ell_3\beta, \ell'_3\beta') = G_{o3}(\ell_3\beta, \ell'_3\beta') \quad , \ell_3, \ell'_3 \geq L + 1 .$$

Les différents éléments  $G_{oi}(l_3\beta, l_3'\beta')$  ( $i = 1, 2, 3$ ) sont donnés par les relations (124), (125) et (126).

\*  $\overleftarrow{V}_I$  est l'opérateur de couplage

$$\begin{aligned} \overleftarrow{V}_I(l_3\beta, l_3'\beta') = & \frac{4\beta_I}{m_1} \left[ fX \delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' 1} \delta_{\beta' 1} - \delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' 0} \delta_{\beta' 2} \right] \\ & + \frac{4\beta_I}{m_2} \left[ \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} fX \delta_{l_3' 0} \delta_{\beta' 2} - \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} \delta_{l_3' 1} \delta_{\beta' 1} \right] \\ & + \frac{4\beta_{II}}{m_2} \left[ fX \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' L+1} \delta_{\beta' 1} - \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' L} \delta_{\beta' 2} \right] \\ & + \frac{4\beta_{II}}{m_3} \left[ fX \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' L+1} \delta_{\beta' 1} - \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta' 1} \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta' 1} \right] \end{aligned} \quad . (145)$$

On peut alors déterminer l'opérateur réponse d'interface  $\overleftarrow{A}$ , à partir des relations (142), (143), (144) et (145). Dans le plan des surfaces il se présente sous forme d'une matrice 4x4

$$\overleftarrow{A} = \begin{pmatrix} A(02,02) & A(02,11) & A(02,L2) & A(02,L+11) \\ A(11,02) & A(11,11) & A(11,L2) & A(11,L+11) \\ A(L2,02) & A(L2,11) & A(L2,L2) & A(L2,L+11) \\ A(L+11,2) & A(L+11,11) & A(L+11,L2) & A(L+11,L+11) \end{pmatrix}, \quad (146)$$

où

$$A(02,02) = - \frac{t_1}{t_1 - 1} - \frac{4(\beta_1 - \beta_I) a_{11} m_1 t_1}{f_1^2 (t_1^2 - 1)},$$

$$A(11,11) = - \frac{t_2}{t_2 - 1} - \frac{4(\beta_2 - \beta_{II}) a_{22} m_2 t_2}{f_2^2 (t_2^2 - 1)},$$

$$A(L2,L2) = - \frac{t_2}{t_2 - 1} - \frac{4(\beta_2 - \beta_{II}) a_{22} m_2 t_2}{f_2^2 (t_2^2 - 1)},$$

$$A(L+1,L+1) = - \frac{t_3}{t_3 - 1} - \frac{4(\beta_3 - \beta_{III}) a_{33} m_3 t_3}{f_3^2 (t_3^2 - 1)},$$

$$A(02,11) = - \frac{t_2}{t_2^2 - 1} \cdot \frac{a_{22} m_2^2 f_{II} X}{m_1 f_2^2}, \quad A(11,02) = - \frac{t_1}{t_1^2 - 1} \cdot \frac{a_{11} m_1 f}{m_2 f_1^2}$$

$$A(02,L2) = \frac{t_2^L m_2 f_{II}}{(t_2 - 1) m_1 f_2}, \quad A(L+1,11) = \frac{t_2^L}{t_2 - 1} \cdot \frac{m_2 f_{II}}{m_3 f_2}$$

$$A(L+1,L2) = - \frac{t_2 a_{22} m_2^2 f_{II} X^*}{(t_2^2 - 1) m_3 f_2^2}, \quad A(L2,L+1) = - \frac{t_3 a_{33} m_3 f_{II}^2 X^*}{(t_3^2 - 1) m_2 f_3^2}$$

$$A(11,L2) = \frac{4(\beta_2 - \beta_I) X^* t_2^L}{f_2 (t_2 - 1)} + \frac{a_{22} m_2 t_2^{L+1} X^*}{f_2 (t_2^2 - 1)},$$

$$A(L2, 11) = \frac{4(\beta_2 - \beta_{II})Xt_2^L}{f_2(t_2 - 1)} + \frac{a_{22}^m t_2^{L+1} X}{f_2(t_2^2 - 1)},$$

les autres éléments matriciels sont nuls .

## 2 - Phonons localisés

La fonction réponse du sandwich de phonons  $\overleftrightarrow{g}$  peut être obtenue sous forme analytique à partir des équations (60) et (61) .

Les phonons localisés dans le sandwich sont les nouveaux pôles de la fonction réponse du système composite . Ce sont les valeurs  $\omega(k_{//})$  qui annulent le déterminant de  $\overleftrightarrow{\Delta}$  .

Dans le cas où le sandwich est symétrique , c'est-à-dire quand les cristaux 1 et 3 sont identiques , on obtient une expression plus simple de ce déterminant que l'on met sous la forme

$$\text{Det } \overleftrightarrow{\Delta} = \frac{W(k_{//}, \omega^2)}{(t_1 - 1)^2 (t_2 - 1)^2}$$

avec

$$\begin{aligned}
 W(k, \omega^2) = & \left\{ \left[ \frac{4(\beta_1 - \beta_I) a_1 m_1 t_1}{f_1^2(t_1 + 1)} + 1 \right] \left[ \frac{4(\beta_2 - \beta_I) a_2 m_2 t_2}{f_2^2(t_2 + 1)} + 1 \right] \right. \\
 & \left. - \frac{a_1 a_2 m_1 m_2 f_1^2 t_1 t_2}{f_1^2 f_2^2 (t_1 + 1)(t_2 + 1)} \right\}^2 - \left[ - \frac{f_1^2 a_1 a_2 m_1 t_1}{f_1^2 f_2 (t_1 + 1)} \right. \\
 & \left. + \left[ \frac{4(\beta_1 - \beta_I) a_1 m_1 t_1}{f_1^2 (t_1 + 1)} + 1 \right] \left[ \frac{4(\beta_2 - \beta_I) a_2 m_2 t_2}{f_2} + \frac{a_2 m_2 t_2}{f_2 (t_2 + 1)} \right] \right\} \\
 & \quad \quad \quad \cdot (147)
 \end{aligned}$$

### 3 - Résultats et discussion

Figure 14

Relations de dispersion pour un sandwich dont le cristal central est constitué de six plans atomiques :  $m_2/m_1 = 4$  ,  $\beta_2/\beta_1 = 1.5$  . La région hachurée est la bande du cristal 1. Les phonons localisés sont représentés entr'ait plein .



Figure 15

Relations de dispersion pour un sandwich dont le cristal central est constitué de six plans atomiques :

$m_2/m_1 = 0.5$  ,  $\beta_2/\beta_1 = 1.5$  .La région hachurée est la bande du cristal 1. Les phonons localisés sont représentés en trait plein .

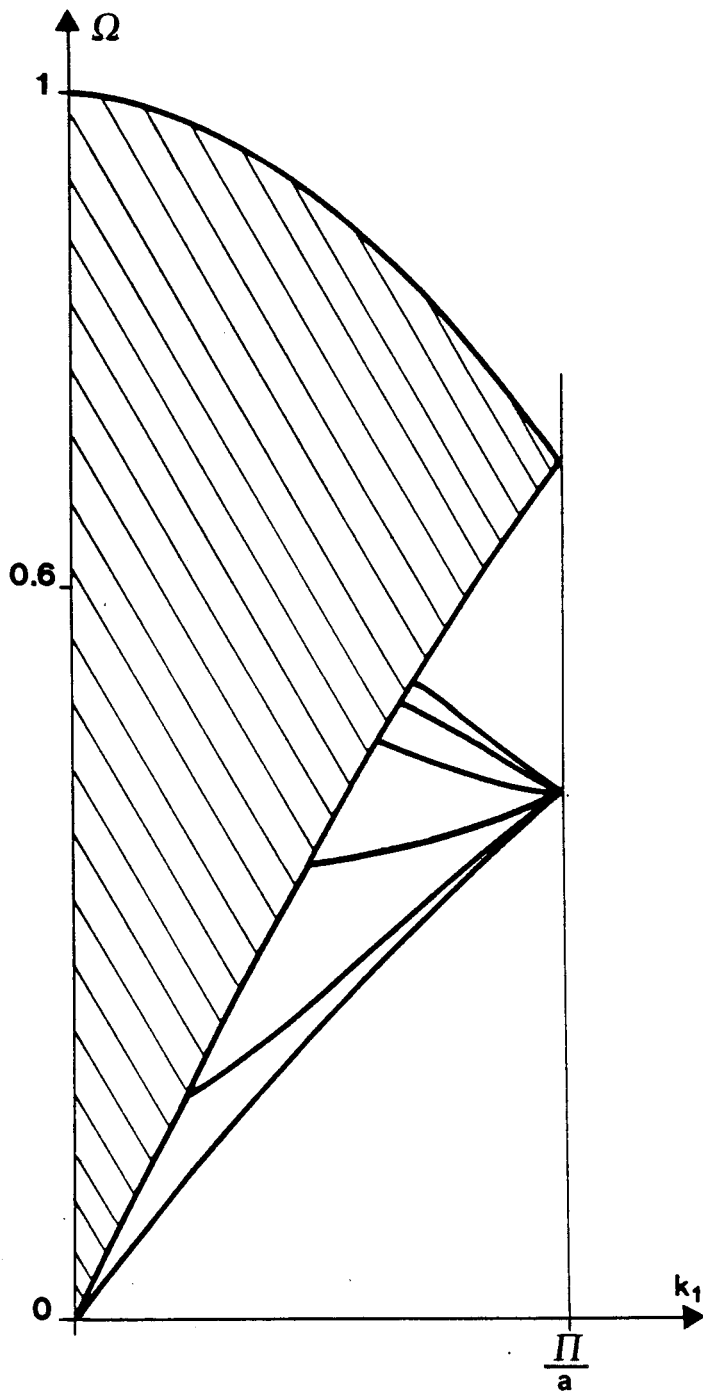


Figure 14

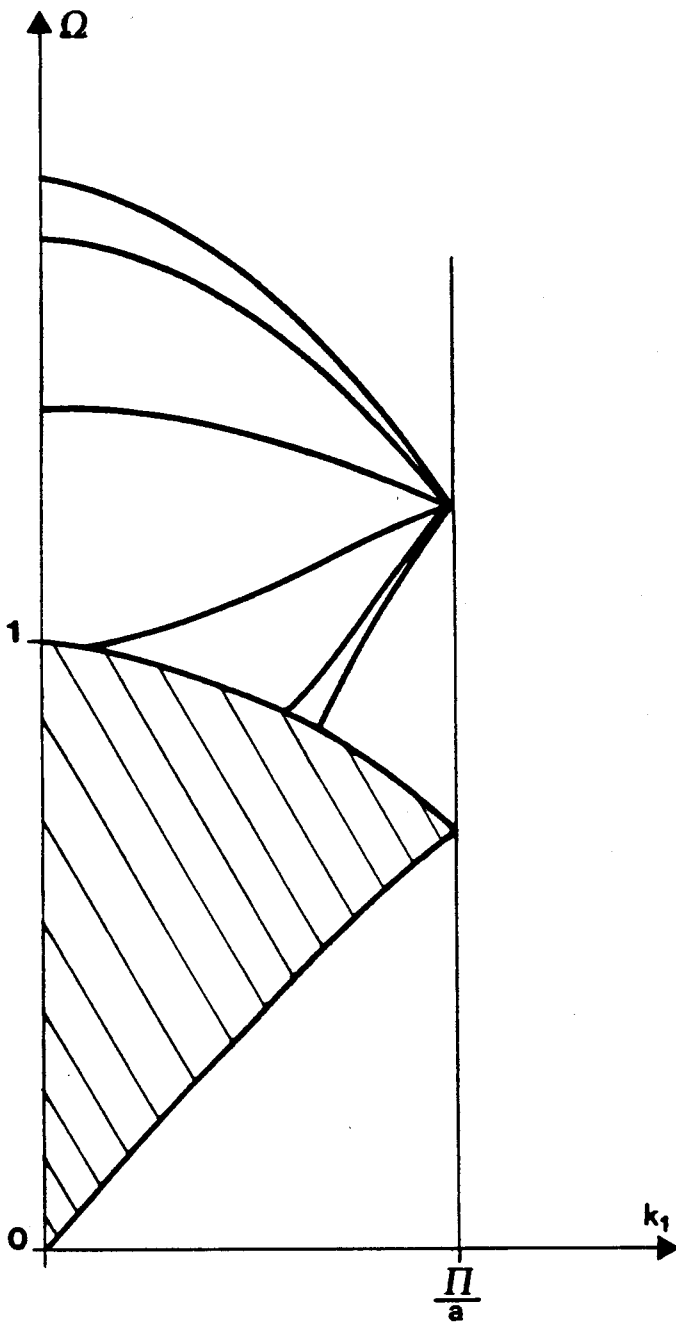


Figure 15

## **CHAPITRE 5**

# **PHONONS DE SANDWICH POUR DES CRISTAUX BIATOMIQUES ( TYPE $C_0C_1$ )**

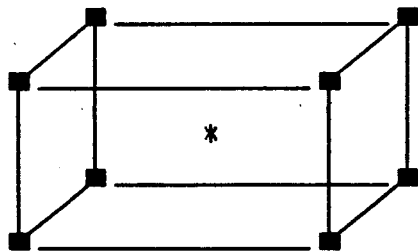
## PHONONS DE SANDWICH POUR DES CRISTAUX BIATOMIQUES

### I - Introduction

L'intérêt de cette étude est de prévoir l'existence de modes localisés de phonons dans des systèmes composites formés de cristaux cubiques centrés biatomiques .

### II - MODELE DE PHONONS EN VOLUME ET FONCTION REPONSE

Les cristaux considérés ici ont une structure cubique centrée du type CsCl . L'atome au centre de la maille a une masse  $m_1$  , l'autre une masse  $m_2$  . On ne considère que les interactions entre atomes premiers voisins .



Les éléments non nuls de l'énergie potentielle d'interaction sont

$$\Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \ell & \ell \\ \beta & \beta \end{pmatrix} = 8 \begin{vmatrix} \beta_i & & \\ & \beta_i & \\ & & \beta_i \end{vmatrix} \quad , \quad (148)$$

$$\Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \ell & \ell' \\ \beta & \beta' \end{pmatrix} = - \begin{vmatrix} \beta_i & & \\ & \beta_i & \\ & & \beta_i \end{vmatrix} \quad , \quad (149)$$

où  $\beta_i$  est la constante de force relative au cristal  $i$ ,  $\ell$  le numéro de la maille et  $\beta = 1$  ou  $2$  représente le type d'atome de masse  $m_1$  ou  $m_2$ . La matrice dynamique est définie par la relation

$$D_{\alpha\beta}(\beta\beta' | k) = \frac{1}{M_{\beta}} \sum_{\ell} \Phi_{\alpha\beta} \begin{pmatrix} \ell & \ell' \\ \beta & \beta' \end{pmatrix} \exp [- ik [x(\ell) - x(\ell')]] \quad , \quad (150)$$

où  $\vec{k}$  représente le vecteur d'onde et  $x(\ell)$  la position de l'atome dans la maille  $\ell$ .

On obtient

$$\vec{D}(k) = \begin{vmatrix} \frac{8\beta_i}{m_1} & - \frac{8\beta_i F(\Phi)}{m_1} \\ - \frac{8\beta_i F(\Phi)}{m_2} & \frac{8\beta_i}{m_2} \end{vmatrix} \quad , \quad (151)$$

où

$$\Phi_i = k_i \cdot a \quad , \quad i = 1, 2, 3 \quad ,$$

$k_i$  la composante du vecteur d'onde selon la direction  $i$  de l'espace,

$$F(\Phi) = \cos(\Phi_1/2) \cos(\Phi_2/2) \cos(\Phi_3/2) \quad ,$$

$a$  la distance entre deux seconds voisins .

Les fréquences de vibration sont obtenues à partir de la l'équation

$$|\omega^2 \delta_{\beta\beta'} - D(\beta\beta' | k)| = 0 \quad , \quad (152)$$

soit .

$$\begin{vmatrix} \omega_j^2 - \frac{8\beta}{m_1} & \frac{8\beta F}{m_1} \\ \frac{8\beta F}{m_2} & \omega_j^2 - \frac{8\beta}{m_2} \end{vmatrix} = 0 \quad . \quad (153)$$

L'annulation de ce déterminant permet d'obtenir les relations de dispersion

$$\omega_j^2 = 4\beta \left( \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \pm \left[ 64 \beta^2 \left( \frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right) + \frac{256 \beta^2 F^2}{m_1 m_2} \right]^{1/2} \quad , \quad (154)$$

avec  $j = 1$  pour le signe  $+$  et  $j = 2$  pour le signe  $-$  .

On obtient la fonction réponse du cristal biatomique de la même manière que celle du cristal monoatomique

$$G_{oi}(\ell_3^1, \ell_3^1; k_{//}, \omega^2) = \frac{8\beta_i m_1(i) - \omega^2 m_1(i) m_2(i)}{f_i^2} \times \frac{t_i^{|\ell_3 - \ell_3^1| + 1}}{t_i^2 - 1}, \quad (155)$$

$$G_{oi}(\ell_3^2, \ell_3^2; k_{//}, \omega^2) = \frac{8\beta_i m_2(i) - \omega^2 m_1(i) m_2(i)}{f_i^2} \times \frac{t_i^{|\ell_3 - \ell_3^2| + 1}}{t_i^2 - 1}, \quad (156)$$

$$G_{oi}(\ell_3^1, \ell_3^2; k_{//}, \omega^2) = \frac{m_2(i) X^*}{f_i} t_i \left[ \frac{t_i^{|\ell_3 - \ell_3^1|} + t_i^{|\ell_3 - \ell_3^2 - 1|}}{2t_i - 1} \right], \quad (157)$$

$$G_{oi}(\ell_3^2, \ell_3^1; k_{//}, \omega^2) = \frac{m_1(i) X}{f_i} t_i \left[ \frac{t_i^{|\ell_3 - \ell_3^2|} + t_i^{|\ell_3 - \ell_3^1 + 1|}}{2t_i - 1} \right], \quad (158)$$

avec

$$f_i = 4\beta_i \cos(\Phi_1/2) \cos(\Phi_2/2), \quad (159)$$

$$a_i = \omega^2 - \frac{8\beta_i}{m_2(i)}, \quad (160)$$

$$d_i = \omega^2 - \frac{8\beta_i}{m_1(i)}, \quad (161)$$

$$X = \exp [i (\Phi_1 + \Phi_2)/2], \quad (162)$$



$$t_i = \begin{cases} \xi_i - (\xi_i^2 - 1)^{1/2} & , \xi > 1 \\ \xi_i + i (1 - \xi_i^2)^{1/2} & , |\xi_i| < 1 \\ \xi_i + (1 - \xi_i^2)^{1/2} & , \xi < -1 \end{cases} \quad , (163)$$

$$\xi_i = \frac{a_i d_i m_1(i) m_2(i)}{2f_i^2} - 1 \quad . (164)$$

### III - OBTENTION DU CRISTAL SEMI-INFINI ET D'UNE LAME MINCE

#### 1 - Cristal semi-infini

Le cristal semi-infini est obtenu à partir du cristal infini en coupant toutes les liaisons entre atomes de deux plans voisins. La création de cette surface libre introduit une perturbation représentée par un opérateur de clivage  $\overleftarrow{V}_{oi}$ .

Si la surface libre est définie par le plan  $\ell_3$ ,  $\beta$

$$\overleftarrow{V}_{oi} = \begin{pmatrix} \frac{4 \beta_i}{m_2(i)} & \frac{-4 \beta_i X F}{m_2(i)} \\ \frac{-4 \beta_i X^* F}{m_1(i)} & \frac{4 \beta_i}{m_1(i)} \end{pmatrix} \quad . (165)$$

A l'aide de l'équation (134) on obtient l'opérateur réponse du cristal

$$\begin{aligned}
 A_{oi}(\ell_3 \beta, \ell_3' \beta') &= -4 \beta_i (F \delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta 1} X^* / m_1(i) - \delta_{\ell_3 0} \delta_{\beta 2} / m_2(i)) \cdot G_{oi}(02, \ell_3' \beta') \\
 &\quad - 4 \beta_i (F \delta_{\ell_3 0} \delta_{\beta 2} X / m_2(i) - \delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta 1} / m_1(i)) \cdot G_{oi}(11, \ell_3' \beta')
 \end{aligned}$$

. (166)

L'opérateur réponse de surface  $\overleftrightarrow{A}_{si}$  est obtenu à partir de l'équation (166) en imposant la condition  $\ell_3 \leq 0$

$$A_{si}(\ell_3 \beta, \ell_3' \beta', k_{//}, \omega^2) = \frac{4_i \beta}{m_2(i)} \delta_{\ell_3 0} \delta_{\beta 2} \left[ G_{oi}(02, \ell_3' \beta') - F X G_{oi}(11, \ell_3' \beta') \right]$$

. (167)

Quand le cristal semi-infini est situé dans le demi-espace défini par  $\ell_3 \geq L + 1$ , le même raisonnement que précédemment conduit à l'opérateur réponse de surface

$$A_{si}(\ell_3 \beta, \ell_3' \beta', k_{//}, \omega^2) = \frac{4_i \beta}{m_2(i)} \delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta 2} \left[ G_{oi}(L+11, \ell_3' \beta') - F X^* G_{oi}(L2, \ell_3' \beta') \right]$$

. (168)

## 2 - lame mince

Pour construire la lame mince on coupe toutes les liaisons d'une part entre les plans  $l_3 = 0$ ,  $\beta = 2$  et  $l_3 = 1$ ,  $\beta = 1$  puis entre les plans  $l_3 = L$ ,  $\beta = 2$  et  $l_3 = L + 1$ ,  $\beta = 1$ . l'opérateur de clivage correspondant à la création de ces deux surfaces libres est

$$\begin{aligned}
 V_{oi}(l_3\beta, l_3'\beta') &= \frac{-4\beta_i}{m_2(i)} \left[ FX\delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' 1} \delta_{\beta' 1} - \delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' 0} \delta_{\beta' 2} \right] \\
 &\quad - \frac{-4\beta_i}{m_1(i)} \left[ FX^* \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} \delta_{l_3' 0} \delta_{\beta' 2} - \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} \delta_{l_3' 1} \delta_{\beta' 1} \right] \\
 &\quad - \frac{-4\beta_i}{m_2(i)} \left[ FX\delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' L+1} \delta_{\beta' 1} - \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{l_3' L} \delta_{\beta' 2} \right] \\
 &\quad - \frac{-4\beta_i}{m_1(i)} \left[ FX^* \delta_{l_3 L} \delta_{\beta' 2} \delta_{l_3' L+1} \delta_{\beta 1} - \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta 1} \delta_{l_3' L+1} \delta_{\beta' 2} \right]
 \end{aligned}$$

. (169)

Les éléments matriciels de l'opérateur réponse sont

$$\begin{aligned}
 A_{oi}(\ell_3\beta, \ell'_3\beta') &= \frac{-4\beta_i}{m_1(i)} \delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta_1} \left[ F X^* \cdot G_{oi}(02, \ell'_3\beta') - G_{oi}(11, \ell'_3\beta') \right] \\
 &\quad - \frac{4\beta_i}{m_2(i)} \delta_{\ell_3 0} \delta_{\beta_2} \left[ F X \cdot G_{oi}(11, \ell'_3\beta') - G_{oi}(02, \ell'_3\beta') \right] \\
 &\quad - \frac{4\beta_i}{m_1(i)} \delta_{\ell_3 L+1} \delta_{\beta_1} \left[ F X^* \cdot G_{oi}(L2, \ell'_3\beta') - G_{oi}(L+11, \ell'_3\beta') \right] \\
 &\quad - \frac{4\beta_i}{m_2(i)} \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta_2} \left[ F X \cdot G_{oi}(L+11, \ell'_3\beta') - G_{oi}(L2, \ell'_3\beta') \right]
 \end{aligned}$$

. (170)

L'opérateur réponse de surface est obtenu à partir de la relation (170) en imposant la condition  $1 \leq \ell_3 \leq L$

$$\begin{aligned}
 A_{oi}(\ell_3\beta, \ell'_3\beta') &= \frac{-4\beta_i}{m_1(i)} \delta_{\ell_3 1} \delta_{\beta_1} \left[ F X^* \cdot G_{oi}(02, \ell'_3\beta') - G_{oi}(11, \ell'_3\beta') \right] \\
 &\quad - \frac{4\beta_i}{m_2(i)} \delta_{\ell_3 L} \delta_{\beta_2} \left[ F X \cdot G_{oi}(L+11, \ell'_3\beta') - G_{oi}(L2, \ell'_3\beta') \right]
 \end{aligned}$$

. (171)

Les éléments matriciels de la fonction réponse sont donnés par les relations (155 - 158) .

#### IV - PHONONS DE SANDWICH

On considère un système composite formé de deux cristaux semi-infins ( $i = 1$  et  $i = 3$ ) et d'une lame mince ( $i = 2$ ).  $\beta_1$ ,  $\beta_2$  et  $\beta_3$  sont respectivement les constantes de force dans le cristal  $i = 1$ ,  $i = 2$  et  $i = 3$ . A l'interface l'interaction entre le cristal  $i = 1$  et le cristal  $i = 2$  (respectivement  $i = 2$  et  $i = 3$ ) est représentée par  $\beta_I$  (respectivement  $\beta_{II}$ ).

$$\beta_I = \frac{\beta_1 + \beta_2}{2}, \quad \beta_{II} = \frac{\beta_3 + \beta_2}{2}.$$

L'opérateur réponse de surface du système composite, dans les plans des surfaces, est donné par la matrice

$$\overleftrightarrow{A}_s = \begin{vmatrix} A_{s1}(02,02) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{s1}(11,11) & A_{s1}(11,L2) & 0 \\ 0 & A_{s1}(L2,11) & A_{s1}(L2,L2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{s1}(L+11,L+11) \end{vmatrix}$$

, (172)

où les expressions des divers éléments matriciels sont donnés par les équations (167), (168) et (171).

L'opérateur de couplage  $\overleftrightarrow{V}_I$  du système dans les plans des surfaces est

$$\begin{aligned}
 V_I(l_3\beta, l'_3\beta') &= \frac{4\beta_I}{m_2(1)} \left[ FX\delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{l'_3 1} \delta_{\beta' 1} \quad \delta_{l_3 0} \delta_{\beta 2} \delta_{l'_3 0} \delta_{\beta' 2} \right] \\
 &+ \frac{4\beta_I}{m_1(2)} \left[ FX^* \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} \delta_{l'_3 0} \delta_{\beta' 2} \quad \delta_{l_3 1} \delta_{\beta 1} \delta_{l'_3 1} \delta_{\beta' 1} \right] \\
 &+ \frac{4\beta_{II}}{m_2(2)} \left[ FX\delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{l'_3 L+1} \delta_{\beta' 1} \quad \delta_{l_3 L} \delta_{\beta 2} \delta_{l'_3 L} \delta_{\beta' 2} \right] \\
 &+ \frac{4\beta_{II}}{m_1(3)} \left[ FX^* \delta_{l_3 L} \delta_{\beta' 2} \delta_{l'_3 L+1} \delta_{\beta 1} \quad \delta_{l_3 L+1} \delta_{\beta 1} \delta_{l'_3 L+1} \delta_{\beta' 2} \right]
 \end{aligned}$$

. (173)

La connaissance de l'opérateur réponse d'interface (éq.142) permet de former la matrice  $\overleftrightarrow{\Delta} = \overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}$ , où  $\overleftrightarrow{I}$  est la matrice identité. Les modes localisés de phonons sont donnés par les nouveaux pôles de la fonction réponse, i.e les valeurs de  $\omega$  qui annulent le déterminant de  $\overleftrightarrow{\Delta}$ .

## CONCLUSION GENERALE

A l'aide de la théorie de réponse d'interface et en utilisant un modèle atomique on peut traiter différents systèmes composites du point de vue électronique et vibrationnel bien que la structure cristalline des semiconducteurs III-V soit du type zinc-blende ou cubique diamant .

Comme dans le présent travail on s'est intéressé aux comportements qualitatifs des systèmes composites il n'apparaissait pas nécessaire d'utiliser des modèles réalistes .

Par contre si on veut obtenir des résultats quantitatifs il faut faire appel à des modèles plus élaborés :

- pour l'étude des hétérojonctions semiconducteur / semiconducteur on peut , par exemple , partir d'un modèle à deux bandes s et introduire des paramètres supplémentaires que l'on ajuste pour simuler les semiconducteurs réels ou encore utiliser des modèles tenant compte des structures réelles des semiconducteurs III-V . Une étude utilisant un modèle intermédiaire est en cours (une orbitale s pour le cation et une orbitale p triplement dégénérée pour l'anion ).

Quoi qu'il en soit un modèle qui a l'ambition d'expliquer les résultats expérimentaux doit tenir compte , pour les hétérojonctions semiconducteur/semiconducteur , de la différence entre le haut des bandes de valence des semiconducteurs qui forment l'interface et de la différence entre les paramètres de mailles , et pour la jonction métal/semiconducteur , de la



différence des paramètres de mailles et de la position du milieu du gap du semiconducteur par rapport à l'énergie de fermi du métal .

- pour l'étude des phonons de sandwichon peut partir du modèle précédemment utilisé [42] en étendant les interactions aux seconds voisins et en tenant compte de l'orientation relative des forces qui s'exercent entre trois atomes et du fait que les constantes de forces ne sont plus les mêmes à l'interface qu'en volume . Une étude fondée sur ces améliorations est en cours pour déterminer les phonons de sandwich pour des cristaux cubiques à faces centrées . Une étude de même nature a été réalisée pour un film de tungstène adsorbé au bout d'un métal semi-infini (Fe(001)) [43] .



## BIBLIOGRAPHIE

- [1] : L.Dobrzynski , Surface Science Reports 6 , 119 (1986).
- [2] : R.Lassing , J.Smoliner , W.Boxleitner and E.Gornik , Surface Science 196 , 367 (1988) .
- [3] : R.Houdré , C.Hermann and G.Lampel Surface Science 168 , 538 (1986).
- [4] : G.Bastard , Surface Science 170 , 426 (1986) .
- [5] : P.Gies and R.R.Gerhardts , Surface Science 178 , 149 (1986) .
- [6] : N.V.Dandekar , A.Madhukar and D.N.Lowy , Phys.Rev. B21 , 5687 (1980)
- [7] : W.Ho , S.L.Cunningham , W.H.Weinberg and L.Dobrzynski , Phys.Rev.B12 , 3027 (1975) .
- [8] : P.Masri , L.Dobrzynski , B.Djafari-Rouhani and J.O.A.Idiodi , Surface Science 166 , 301 (1986) .
- [9] : M.D.Rahmani , P.Masri and L.Dobrzynski , J.Phys.C : Solid State Phys. 21 , 4761 (1988) .
- [10] : J.M.Ziman , Principles of the theories of solids (Cambridge U.P , Cambridge , England ) .
- [11] : J.Tersoff , Phys.Rev. B30 , 4874 (1984) .
- [12] : G.A.Sai-Halasz , L.Esaki and W.A.Harrison , Phys.Rev. B18 , 2812 (1978) .

- [13] : J.N.Schulman and Yia-Chung Chang , Phys.Rev. B31 , 2056 (1985) and B24 ,4445 (1981) .
- [14] : Gyungock Kim and G.B.Arnold , Phys.Rev. B38 , 3241 (1988) .
- [15] : J.Y.Marzin , Heterojunctions and Semiconductor Supperlattices ed. G.Allan , G.Bastard , N.Boccaro , M.Lannoo and M.Voos (Berlin : Springer ) 161 , (1986) .
- [16] : A.Akjouj , L.Dobrzynski and C.Olesky , Surface Science 213 , 630 (1989) .
- [17] : L.Dobrzynski , Surface Science 180 , 489 (1987) .
- [18] : J.Menendez , Phys.Rev. B38 , 6305 (1988) .
- [19] : A.McKinley , R.H.Williams and A.W.Park , J.Phys.C ,12 , 2447 (1979) .
- [20] : R.Ludeke ,T.C.Chiang and T.Miller , J.Vac.Sci.Technol. B1 , 581 (1983) .
- [21] : P.S.Ho , T.Y.Tan , J.E.Lewis and G.W.Rubloff , J.Vac.Sci.Technol 17 , 924 (1978) .
- [22] : E.H.Roderick , Metal-semiconductor contacts , Oxford Univ. Press (1978) .
- [23] : L.M.Brillson , Phys.Rev.Lett. 40 , 260 (1978) .
- [24] : J.M.Andrews and J.C.Philips , Phys.Rev. Lett. 35 , 56 (1975) .
- [25] : G.Ottaviani , K.N.Tu and J.W.Mayer , Phys.fev.Lett. 44 , 284 (1980) .

- [26] : R.H.Williams , V.Montgomery and R.R.Varma , J.Phys.C 11 ,  
L735 (1978) .
- [27] : L.J.Brillson , C.F.Brucker , N.G.Staffet A.D.Katnani and  
G.Margaritondo , Phys.Rev.Lett. 46 , 838 (1981) .
- [28] : F.Flores and N.H.March , Surface Science 124 , 329 (1983) .
- [29] : R.E.Allen and J.D.Dow , Phys.Rev. B25 , 1423 (1982) .
- [30] : J.D.Dow , D.F.Sankey and R.E.Allen , Appl.Surf.Sci. 22/23 ,  
937 (1985) .
- [31] : I.Lindau and T.Kendelewicz , Crit.Rev. in Solid State and  
Material Sci. 13 , 27 (1986) .
- [32] : F.Flores and C.Tejedor , J.Phys.C 20 , 145 (1987) .
- [33] : J.Tersoff , Phys.Rev.Lett. 52 , 465 (1984) .
- [34] : J.Sanchez-Dehesa , F.Flores and F.Guinea , J.Phys.C 17 ,  
2039 (1984) .
- [35] : A.Akjouj , P.Zielinski and L.Dobrzynski , J.Phys.C : Solid  
State Phys. 20 , 6201 (1987) .
- [36] : D.Bolmont , P.Chen , F.Proix and C.A.Sebenne , J.Phys.C :  
Solid State Phys. 15 , 3639 (1982) .
- [37] : J.Barner and S.Ruggiero , IEEE Trans.Magn. MAG-23 , 854  
(1987) .

- [38] : A.Yaniv , Phys.Rev. B17 , 3904 (1978) .
- [39] : B.Sylla , M.More and L.Dobrzynski , Surface Science 213 ,  
588 (1988) .
- [40] : A.Akjouj , B.Sylla , P.Zielinski and L.Dobrzynski ,  
J.Phys.C : Solid State Phys. 20 , 6137 (1987) .
- [41] : E.N.Montroll and R.B.Potts , Phys.Rev. 102 , 72 (1956) .
- [42] : A.Jbara , A.Akjouj ,B.Sylla and L.Dobrzynski , Proceedings  
of the third International Conference on Phonon Physics ,  
Heidelberg , R.F.A , August 21-25 , 1989 , World Scientific  
Publishing .
- [43] : P.Zielinski and L.Dobrzynski ,Phys.Rev. B41 , 10377 (1990) .

## APPENDICE

Fonction réponse du puits quantique de semiconducteurs :

Les éléments matriciels de la fonction réponse sont donnés par la relation (61). On obtient

$$\text{ii) } G^0(p_3, p'_3, k_{||}, \epsilon) = 2\omega_3 p_3 t_3^{l_3 - p'_3 + 1}$$

$$\text{i) } l_3, l'_3 \leq 0 : G(p_3, p'_3, k_{||}, \epsilon) = \frac{-\omega_1 t_1^{l_1 - p'_1 + 1}}{f_1^{l_1} (t_1^2 - 1)} - \frac{f_I \omega_1 t_1^{l_1 - l'_1 - p'_1} \chi}{f_1^2 (t_1 + 1)^2 W(k_{||}, \epsilon)} \left[ \frac{f_I f_{II}^2 t_2 t_3 \omega_3}{f_2^2 f_3^2 (t_3 + 1)} - \frac{f_I t_2 \omega_2}{f_2^2 (t_2 + 1)} \right. \\ \left. + \frac{f_I f_{II}^2 t_2^{2L} t_3 \omega_3}{f_2^2 f_3^2 (t_3 + 1)} - \frac{f_I t_2^{2L+1} \omega_2}{f_2^2 (t_2 + 1)} \right]$$

ii)  $1 \leq p_3, p'_3 \leq L$

$$G(p_3, p'_3, k_{||}, \epsilon) = \frac{-\omega_2 t_2^{l_2 - p'_2 + 1}}{f_2^{l_2} (t_2^2 - 1)} - \frac{\omega_2 t_2^{l_3 + p'_3}}{f_2^2 (t_2 + 1) W(k_{||}, \epsilon)} \left[ \frac{f_{II}^2 t_2 t_3 d_2 \omega_3}{f_2^2 f_3^2 (t_2 - 1)(t_3 + 1)} - \frac{1}{t_2 - 1} \right] \\ - \frac{\omega_2 t_2^{2L - l_3 + p'_3 + 1} \chi}{f_2^2 (t_2^2 - 1) W(k_{||}, \epsilon)} \left[ \frac{t_2 \omega_2}{t_2 + 1} - \frac{f_{II}^2 t_3 \omega_3}{f_3^2 (t_3 + 1)} \right] + \frac{f_{II}^2 t_3 \omega_3 t_2^{2L - p'_3 + l_3 + 1}}{f_2^2 f_3^2 (t_2 - 1)(t_3 + 1) W(k_{||}, \epsilon)} \left[ \frac{\omega_2 f_{II}^2 d_1 t_1}{f_2^2 f_3^2 (t_1 + 1)(t_2 + 1)} - 1 \right] \\ + \frac{f_{II}^2 t_3 \omega_3 \chi t_2^{2L - l_3 - l'_3 + 2}}{f_2^2 (t_2^2 - 1)(t_3 + 1) W(k_{||}, \epsilon)} \left[ \frac{f_{II}^2 t_2 \omega_2 t_1 d_1}{f_2^2 f_3^2 (t_1 + 1)(t_2 + 1)} - 1 \right]$$

iii)  $l_3, l'_3 \geq L+1$

$$G(p_3, p'_3, k_{||}, \epsilon) = \frac{-\omega_3 t_3^{l_3 - l'_3 + 1}}{f_3^{l_3} (t_3^2 - 1)} - \frac{\omega_3 t_3^{l_3 + l'_3 - 2L}}{f_3^2 (t_3^2 - 1) W(k_{||}, \epsilon)} \left[ \frac{f_{II}^2 t_2 \omega_2 t_1 d_1}{f_2^2 f_3^2 (t_1 + 1)(t_2 + 1)} - \frac{t_2^{2L+1} \omega_2 f_{II}^2 t_1 d_1}{f_2^2 f_3^2 (t_2 + 1)(t_1 + 1)} \right. \\ \left. + t_2^{2L+1} - 1 \right]$$

(v)  $l_3 \leq 0, 1 \leq l'_3 \leq L$

$$g(l_3, l'_3, k_{III}, \epsilon) = \frac{\omega_1 t_1^{l'_3+1}}{f_2^2 (t_1+1) \omega (k_{III}, \epsilon)} \left\{ - \frac{f_I t_2^{l'_3+1} \chi}{f_2^2 (t_2-1)} \left[ \frac{-\omega_2}{t_2+1} + \frac{f_{II}^2 t_3 \omega_3}{f_3^2 (t_3+1)} + \frac{f_{II}^2 t_2^{L-1} t_3 \omega_3}{f_3^2 (t_3-1)} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{t_2^L \omega_2}{t_2+1} \right] + \frac{f_{II}^2 f_I t_3 \omega_3 \chi t_2^{L-l'_3+1}}{f_2^2 f_3^2 (t_2-1)} \left[ \frac{1-t_2}{t_3+1} \right] \right\}$$

pour  $1 \leq l_3 \leq L, l'_3 \leq 0$  il suffit d'interchanger  $l_3$  et  $l'_3$  dans l'expression

ci-dessus

v -  $l_3 \leq 0, l'_3 \geq L+1$

$$g(l_3, l'_3, k_{III}, \epsilon) = \frac{-\omega_1 t_1^{l'_3+1} t_3^{l'_3-L+1} f_I f_{II} \chi t_2^L}{f_1^2 f_2^2 f_3^2 (t_1+1) (t_3-1)} (1-t_2)$$

pour  $l_3 \geq L+1$  et  $l'_3 \leq 0$  il suffit d'interchanger  $l_3$  et  $l'_3$ .

vii)  $1 \leq l_3 \leq L, l'_3 \geq L+1$

$$g(l_3, l'_3, k_{III}, \epsilon) = \frac{-\omega_2 t_2^{l'_3-L+1} f_{II} \omega_3}{f_2^2 f_3^2 (t_3-1) \omega} \left[ \frac{t_2^L f_I^2 t_1 d_1}{f_1^2 f_2 (t_1+1)} \left( t_2^L + \frac{t_2^{L-l_3} \omega_2}{f_2 (t_2+1)} \right) - t_2^{L-1} \left( \frac{d_2 t_2^{l_3}}{f_2 (t_2+1)} + t_2^{-l_3} \right) \right]$$

pour  $l_3 \geq L+1$  et  $1 \leq l'_3 \leq L$  il suffit d'interchanger  $l_3$  et  $l'_3$

II -  $Q^{(0)}(l_3, l'_3, k_{III}, \epsilon) = 2 d_1 P_1 t_1^{l_3-l'_3+1} + 2$

i)  $l_3, l'_3 \leq 0$

$$g(l_3, l'_3, k_{III}, \epsilon) = \frac{-d_1 t_1^{l_3-l'_3+1}}{f_1^2 (t_1-1)} + \frac{d_1 t_1^{3-l_3-l'_3}}{f_1^2 (t_1-1) \omega (k_{III}, \epsilon)} \left[ t_2^{L+1} - 1 + \frac{f_{II}^2 t_1 t_3 d_2 \omega_3}{f_2^2 f_3^2 (t_2+1) (t_3+1)} (1-t_2^L) \right]$$

ii)  $1 \leq l_3, l'_3 \leq L$

$$g(l_3, l'_3, k_{III}, \epsilon) = \frac{-d_2 t_2^{l_3-l'_3+1}}{f_2^2 (t_2-1)} + \frac{d_2 t_2^L}{\omega f_2^2 (t_2+1)} \left[ \frac{f_I^2 t_2^{l'_3} t_1 d_1 \chi}{f_3^2 f_1^2 (t_2-1) (t_1+1)} \left( \frac{f_{II}^2 t_2 t_3 d_2 \omega_3}{f_2^2 f_3^2 (t_2+1) (t_3+1)} - 1 \right) \right.$$

$$\left. - \frac{t_2^{L-l'_3+1} \chi}{f_2 (t_2-1)} \left( \frac{f_I^2 t_1 d_1}{f_1^2 (t_1+1)} - \frac{d_2 t_2}{t_2+1} \right) \right] + \frac{d_2 t_2^{L-l_3+1}}{\omega f_2^2 (t_2+1)} \left[ \frac{t_2^{L-l_3+1}}{t_2-1} \left( 1 - \frac{f_{II}^2 t_2 \omega_2 t_1 d_1}{(t_1+1) (t_2+1) f_1^2 f_2^2} \right) \right.$$

$$\left. + \frac{f_I^2 t_1 d_1 t_2^{L+l_3}}{f_2^2 f_1^2 (t_1+1) (t_2-1)} \left( \frac{\omega_2 t_2}{t_2+1} - \frac{f_{II}^2 \omega_3 t_3}{f_3^2 (t_3+1)} \right) \right]$$

iv)  $l_3, l'_3 \geq L+1$

$$q(l_3, l'_3, l_3, l'_3, t_{III}, \epsilon) = \frac{-d_3 t_3^{l_3 - l'_3} + 1}{f_3^2 (t_3^2 - 1)}$$

v)  $l_3 \leq 0, 1 \leq l'_3 \leq L$

$$q(l_3, l'_3, l_3, l'_3, t_{III}, \epsilon) = \frac{d_1 t_1^{1-l_3}}{f_1^2 f_2 (t_1+1)(t_2-1) \omega(t_{III}, \epsilon)} \left[ t_2^{2L-l_3+1} f_I (t_2-1) + \frac{f_{II} \omega_2 t_2^{l'_3}}{f_2 (t_2+1)} (-1) \right. \\ \left. + \frac{f_{II}^2 t_2 t_3 d_2 \omega_3}{f_2^2 f_3 (t_2+1)(t_3-1)} + t_2^{2L+1} - \frac{\omega_3 t_3 d_2 f_{II}^2 t_2^{2L+1}}{f_2^2 f_3 (t_2+1)(t_3+1)} \right]$$

pour  $l_3 \leq 0, 1 \leq l'_3 \leq L$  il suffit d'interchanger  $l_3$  en  $l'_3$

v)  $l_3 \leq 0, l'_3 \geq L+1$

$$q(l_3, l'_3, l_3, l'_3, t_{III}, \epsilon) = \frac{f_{II} d_1 t_1^{1-l_3} t_3^{l'_3-L} f_I t_2^L}{f_1^2 f_2 f_3 (t_1+1)(t_3-1) \omega} (1-t_2)$$

pour  $l_3 \leq 0, l'_3 \geq L+1$  il suffit d'interchanger  $l_3$  et  $l'_3$ .

vi)  $1 \leq l_3 \leq L, l'_3 \geq L+1$

$$q(l_3, l'_3, l_3, l'_3, t_{III}, \epsilon) = \frac{f_{II} d_2 t_2^{l_3-L} t_3^{l'_3-L}}{f_3 f_2^3 (t_2+1)(t_3-1) \omega} \left( \frac{f_I^2 t_1 d_1}{f_1^2 (t_1+1)} - \frac{d_2 t_2}{t_2+1} \right) + \frac{f_{II} t_2^{L-l_3+1} t_3^{l'_3-L}}{f_3 f_2^2 (t_3-1) \omega} \left( \frac{-d_2}{t_2+1} + \frac{f_I^2 t_1 d_1}{f_1^2 (t_1+1)} \right)$$

pour  $1 \leq l_3 \leq L, l'_3 \geq L+1$  il suffit d'interchanger  $l_3$  et  $l'_3$ .

III -  $Q^{(1)}(l_3, l'_3, l_3, l'_3, t_{III}, \epsilon) = 2 f_I P_i t_i [t_i^{l_3-l'_3} + t_i^{l_3-l'_3-1}] \chi^*$

i)  $l_3, l'_3 \leq 0$

$$q(l_3, l'_3, l_3, l'_3, t_{III}, \epsilon) = -\frac{\chi^* t_i [t_i^{l_3-l'_3} + t_i^{l_3-l'_3-1}]}{f_1 (t_1^2 - 1)} + \frac{f_I^2 t_2 d_1 t_2^{2-l_3-l'_3}}{f_1^3 (t_2^2 - 1) f_2^2 \omega} \left[ -\frac{\omega_2}{t_2+1} + \frac{f_{II}^2 t_3 \omega_3}{f_3^2 (t_3+1)} \right. \\ \left. + \frac{f_{II}^2 t_2^{2L-1} \omega_3 t_3}{f_3^2 (t_3+1)} - \frac{t_2^{2L} \omega_3}{t_2+1} \right]$$

ii)  $1 \leq l_3, l'_3 \leq L$

$$g(l_3, l'_3, 2, b_{III}, \varepsilon) = -\frac{\chi^* t_2 [t_2^{l_3 - l'_3} + t_2^{l'_3 - l_3 - 1}]}{f_2 (t_2^l - 1)} + \frac{\chi^* t_2 [t_2^{l_3 - 1} + t_2^{l'_3 - 2}]}{f_2 (t_2^l - 1) w(b_{III}, \varepsilon)} \left[ \frac{\chi^* d_2 t_2^{l'_3 + 1}}{f_2 (t_2^l - 1)} (1 - \frac{f_2^2 t_2 t_3 d_2 \omega_3}{f_2^2 f_3^2 (t_2 + 1)(t_3 + 1)}) \right. \\ \left. + \frac{f_2^2 t_3 \omega_3 t_2^{2L - l'_3 - 1} d_2 \chi^*}{f_2^2 f_3^2 (t_2^2 - 1)(t_3 + 1)} \left( \frac{f_2^2 t_2 d_1}{f_2^2 (t_2 + 1)} - \frac{d_2 t_2}{t_2 + 1} \right) \right] \\ + \frac{\chi^* t_2^{2L - l_3 + 1} d_2}{f_2^2 (t_2 + 1) w(b_{III}, \varepsilon)} \left[ \frac{t_2^{l'_3 + 1}}{f_2 (t_2 - 1)} \left( \frac{f_2^2 t_3 \omega_3}{f_2^2 (t_3 + 1)} - \frac{t_3 d_2}{t_2 + 1} \right) + \frac{f_2^2 t_2^{1 - l'_3} t_3 \omega_3}{f_2 (t_2 - 1)(t_3 + 1) f_3^2} \left( \frac{f_2^2 \omega_2 t_2 t_1 d_1}{f_2^2 f_3^2 (t_2 + 1)(t_3 + 1)} - 1 \right) \right]$$

iii)  $l_3, l'_3 \geq L + 1$

$$g(l_3, l'_3, 2, b_{III}, \varepsilon) = -\frac{\chi^* t_3 [t_3^{l_3 - l'_3} + t_3^{l'_3 - l_3 - 1}]}{f_3 (t_3^l - 1)} - \frac{(\chi^*)^2 [t_3^{l_3 - L + 1} + t_3^{l'_3 - L - 2}] t_3^{l'_3 - L + 1}}{(t_3 - 1) w(b_{III}, \varepsilon)} \left[ -1 + t_2^{2L + 1} + \frac{f_2^2 t_2 \omega_2 t_1 d_1}{f_2^2 f_3^2 (t_2 + 1)(t_3 + 1)} (1 - t_2^{2L}) \right]$$

iv)  $l_3 \leq 0, 1 \leq l'_3 \leq L$

$$g(l_3, l'_3, 2, b_{III}, \varepsilon) = \frac{t_1^{1 - l_3} d_2 \chi^*}{f_1 f_2 (t_2 + 1) w} \left[ \frac{t_2^{l'_3 + 1} f_I t_2}{f_2^2 (t_2 - 1)} \left( \frac{-\omega_2}{t_2 + 1} + \frac{f_2^2 t_3 \omega_3}{f_3^2 (t_3 + 1)} + \frac{f_2^2 t_2^{2L - 1} t_3 \omega_3}{f_3^2 (t_3 + 1)} \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\omega_2 t_2^{2L}}{t_2 + 1} \right) + \frac{f_2^2 t_2^{2L - l'_3 + 1} t_3 \omega_3 f_I}{f_2^2 f_3^2 (t_3 + 1)(t_2 - 1)} (1 - t_2^{L + 1}) \right]$$

pour  $l'_3 \leq 0, 1 \leq l_3 \leq L$  il suffit d'interchanger  $l_3$  et  $l'_3$ .

v)  $l_3 \leq 0, l'_3 \geq L + 1$

$$g(l_3, l'_3, 2, b_{III}, \varepsilon) = \frac{-\chi^* t_1^{1 - l_3} t_3^{l'_3 - L + 2} f_{II} f_I t_2^L}{f_1 f_2 f_3 (t_3 - 1)} (1 - t_2)$$

pour  $l'_3 \leq 0, l_3 \geq L + 1$  il suffit d'interchanger  $l_3$  et  $l'_3$



$$vi) 1 \leq \rho_3 \leq L \quad \rho_3 \geq L+1$$

$$q(\rho_3, 2, \rho_3, 1, b_{III}, \varepsilon) = \frac{f_{II} t_2^{L+1} (x^*)^2 [t_2^{\rho_3-1} - t_2^{L-\rho_3+1}] t_3^{\rho_3-L+1}}{f_2^2 (t_2+1)(t_3-1) \mathcal{W}(b_{III}, \varepsilon)} \left( \frac{f_1^2 t_2 d_1}{f_1^2 (t_2+1)} - \frac{d_2 t_3}{t_2-1} \right) - \frac{x^* t_2^{L-\rho_3+1} t_3^{\rho_3-L+1} f_{II}}{f_3 f_2 \mathcal{W}(b_{III}, \varepsilon) (t_3-1)} \left( -1 + \frac{f_1^2 t_2 d_2 t_1 d_1}{f_1^2 f_2^2 (t_2+1)(t_3+1)} \right)$$

pour  $1 \leq \rho_3 \leq L \quad \rho_3 \geq L+1$  il suffit d'interchanger  $\rho_3$  et  $\rho_3'$

$$IV. \quad q_{0i}(\rho_3, 2, \rho_3', 1, b_{III}, \varepsilon) = 2 f_1 P_i t_i [t_i^{\rho_3-\rho_3'} + t_i^{L_3-\rho_3'+1}] x$$

$$i) \quad \rho_3, \rho_3' \leq 0$$

$$q(\rho_3, 2, \rho_3', 1, b_{III}, \varepsilon) = \frac{-x t_1 [t_1^{|\rho_3-\rho_3'|} + t_1^{L_3-\rho_3'+1}]}{f_1 (t_1^2 - 1)} - \frac{x^2 d_1 t_1^{3-\rho_3} [t_1^{\rho_3} + t_1^{L_3+1}]}{f_1^2 (t_1^2 - 1)(t_1+1) \mathcal{W}} [t_2^{2L+1} - 1] + \frac{f_{II}^2 d_2 d_3 t_3 t_2}{f_2^2 f_3^2 (t_2+1)(t_3+1)} (1 - t_2^L)$$

$$ii) \quad 1 \leq \rho_3, \rho_3' \leq L$$

$$q(\rho_3, 2, \rho_3', 1, b_{III}, \varepsilon) = \frac{-x t_2 [t_2^{|\rho_3-\rho_3'|} + t_2^{L-\rho_3'+1}]}{f_2 (t_2^2 - 1)} + \frac{x t_2 [t_2^{\rho_3-1} - t_2^{L-\rho_3'+1}]}{f_2 (t_2+1) \mathcal{W}(b_{III}, \varepsilon)} x \left[ \frac{(t_1-1) f_{II} x d_2 t_2^{\rho_3'}}{f_2^2 (t_2+1)} \left( \frac{-1 + t_2^{2L+1}}{(t_2-1)^2} + \frac{f_{II}^2 t_2 t_3 d_2 d_3}{f_2^2 f_3^2 (t_2-1)(t_2+1)(t_3+1)} (1 - t_2^{2L}) \right) - \frac{(t_1-1) d_3 x t_2^{2L-\rho_3'+2} f_I}{f_2^2 (t_2-1)^2} (1 - t_2) \right] + \frac{x t_2 [t_2^{L-\rho_3} + t_2^{L_3-L+1}]}{f_2 (t_2+1) \mathcal{W}(b_{III}, \varepsilon)} \left[ \frac{f_I x d_2 t_2^{\rho_3-L} t_1 d_1 x}{f_1^2 f_2^2 (t_2^2-1)(t_2+1)} \right] \left\{ \frac{-f_{II}^2 d_3 t_3}{f_3^2 (t_3+1)} + \frac{d_2 t_2}{t_2+1} \right\} - \frac{d_2 x t_2^{L-\rho_3'+2}}{f_2 (t_2^2-1)} \left\{ -1 + \frac{f_I^2 t_2 d_2 t_1 d_1}{(t_1+1)(t_2+1) f_1^2 f_2^2} \right\}$$

iii)  $\rho_3, \rho'_3 \geq L+1$

$$q(\rho_3, \rho'_3, 1, b_{III}, \varepsilon) = \frac{-\alpha t_3 [t_3^{\rho_3 - \rho'_3} + t_3^{\rho_3 - \rho'_3 + 1}]}{f_3 (t_3^2 - 1)} + \frac{\alpha f_{II}^2 \omega_3 t_3^{\rho_3 + \rho'_3 - 2L}}{f_3^2 (t_3^2 - 1) f_2^2 \omega} \left[ \frac{(t_2^{2L+1} - t_2) d_2}{t_2 + 1} \right. \\ \left. + \frac{f_{II}^2 t_2 t_1 d_1}{f_1 (t_1 + 1)} \left( \frac{1}{f_1^2} + \frac{t_2^{2L-1}}{f_2^2} \right) \right]$$

iv)  $\rho_3 \leq 0, 1 \leq \rho'_3 \leq L$

$$q(\rho_3, \rho'_3, 1, b_{III}, \varepsilon) = \frac{\alpha t_1 [t_1^{-\rho_3} + t_1^{\rho_3 + 1}] \omega_2}{f_1^2 f_2 (t_1 + 1) \omega (t_2^2 - 1)} \left[ f_{II}^2 t_2^{\rho'_3} \left( -1 + \frac{f_{II}^2 t_2 t_3 d_2 \omega_3}{(t_2 + 1)(t_3 + 1) f_2^2 f_3^2} \right. \right. \\ \left. \left. + t_2^{2L+1} - \frac{\omega_3 t_3 d_2 f_{II}^2 t_2^{2L+1}}{f_2^2 f_3^2 (t_2 + 1)(t_3 + 1)} \right) + f_{II}^2 t_2^{2L+2-\rho'_3} (1 - t_2) \right]$$

pour  $\rho'_3 \leq 0, 1 \leq \rho_3 \leq L$  il suffit d'interchanger  $\rho_3$  et  $\rho'_3$ .

v)  $\rho_3 \leq 0, \rho'_3 \geq L+1$

$$q(\rho_3, \rho'_3, 1, b_{III}, \varepsilon) = \frac{\alpha^2 t_1 [t_1^{-\rho_3} + t_1^{\rho_3 + 1}] f_{II} \omega_3 t_3^{\rho'_3 - L} f_{II}^2 t_2^L}{f_1 f_2 (t_1 + 1) (t_3^2 - 1) f_3^2 \omega (b_{III}, \varepsilon)} (1 - t_2)$$

pour  $\rho'_3 \leq 0, \rho_3 \geq L+1$  il suffit d'interchanger  $\rho_3$  et  $\rho'_3$

vi)  $1 \leq \rho_3 \leq L, \rho'_3 \geq L+1$

$$q(\rho_3, \rho'_3, 1, b_{III}, \varepsilon) = \frac{\alpha t_2^{\rho_3 + L} f_{II} \omega_3 t_3^{\rho'_3 - L}}{f_1^2 (t_3^2 - 1) \omega (b_{III}, \varepsilon)} \left( \frac{f_{II}^2 t_1 d_1}{f_1^2 (t_1 + 1)} - \frac{d_2 t_2}{t_2 + 1} \right) \\ + \frac{\alpha^2 t_2 [t_2^{L - \rho_3} + t_2^{\rho_3 - L + 1}] f_{II} \omega_3 t_3^{\rho'_3 - L}}{f_3^2 f_2 (t_2 + 1) (t_3^2 - 1) \omega (b_{III}, \varepsilon)} \left( \frac{f_{II}^2 t_2 \omega_2 t_1 d_1}{(t_1 + 1)(t_2 + 1) f_1^2 f_2^2} - 1 \right)$$



## RESUME

Cette thèse étudie les propriétés électroniques et vibratinnelles de quelques structures lamellaires . A l'aide de la théorie de réponse d'interface on obtient les fonctions réponse , les états électroniques localisés de puits quantiques à semiconducteurs , des structures , semiconducteur/vide et des structures métal/semiconducteur . On obtient , d'autre part , les modes de phonons localisés acoustiques et optiques pour des sandwichs de cristaux cubiques centrés monoatomiques et biatomiques .

## MOTS-CLES :

Etats électroniques localisés

Surface

Interface

Puits quantique

Jonction métal/semiconducteur

Phonons de sandwichs