

50376
1994
161

(Co gen 20102368

50376
1994
161

N° d'ordre: 1325

THESE



présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE
LILLE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

en

SCIENCES DES MATERIAUX

par

El Houssaine EL BOUDOUTI

Sujet de la thèse

**MODES ACOUSTIQUES LOCALISES ET RESONNANTS DANS LES
SUPER-RESEAUX SEMI-INFINIS ET FINIS. EXTENSION AUX ETATS
ELECTRONIQUES**

Soutenue le 03 juin 1994 devant la Commission d'Examen

Président: J. LEFEBVRE, Professeur, Université de Lille I
Rapporteurs: H. DREYFUSE, Professeur, Université de Strasbourg
P. MASRI, Chargé de recherches, Doct. Etat, Univ. de Montpellier
Examineurs: L. DOBRZYNSKI, Directeur de Recherches, Université de Lille I
M. MORE, Professeur, Université de Lille I
H. PUSZKARSKI, Professeur, Université de Poznan (Pologne)
Directeur de Thèse: B. DJAFARI-ROUHANI, Professeur, Université de Lille I

**A la mémoire de ma mère
A mon père
A mes frères et soeurs
A Driss**

Remerciements

Ce travail a été réalisé à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, dans le laboratoire de Dynamique et Structure des Matériaux Moléculaires dirigé par Monsieur le Professeur J. Lefebvre. Pour avoir bien voulu accepter de présider le jury de cette thèse, je lui adresse ma profonde gratitude. Je remercie également Monsieur le Professeur H. Fontaine qui m'a accueilli dans le laboratoire.

J'adresse mes plus sincères remerciements au Professeur B. Djafari-Rouhani, sous la direction duquel j'ai accompli ce travail. Les discussions quotidiennes avec lui m'ont beaucoup aidé à faire progresser cette thèse. Son attention constante à mon travail et son humanisme m'ont beaucoup encouragé. Ce travail n'aurait pu voir le jour sans son soutien et sa disponibilité.

Je reste reconnaissant à M. H. Dreyssé, Professeur à l'I.P.C.M de Strasbourg et à M. P. Masri Chargé de Recherches au CNRS qui ont bien voulu s'intéresser à ce travail et d'en être les rapporteurs.

Je suis très sensible à l'intérêt que M. L. Dobrzynski Directeur de Recherches au CNRS, a porté à ce travail en acceptant d'être un de ses examinateurs, et le remercie pour ses conseils et encouragements.

Messieurs M. More, Professeur à l'Université de Lille I et H. Puzkarski, Professeur à l'Institut de Physique, Poznan (Pologne) ont accepté de faire partie du jury chargé d'examiner ce travail. Je les remercie infiniment.

J'adresse aussi mes remerciements à A. Akjouj, Maître de conférences à l'Université de Lille I, au Professeur M. Steslicka et au Docteur R. Kucharczyk de l'Université de Wroclaw (Pologne). Une partie de ce travail a bénéficié de leur collaboration.

Je tiens aussi à remercier tous mes camarades de l'équipe de Dynamique des Interfaces pour leur collaboration et leur aide.

Que tous ceux qui ont contribué à la réalisation matérielle de ce mémoire, en particulier Mesdames C. Reynaud et M. Buckowski pour la frappe, J.M. Raffaud pour les dessins et S. Fauquemberg pour les tirages, reçoivent mes remerciements les plus sincères.

Résumé

Dans ce travail nous avons étudié l'existence et le comportement des modes localisés et résonnants de surface et d'interface, dans les super-réseaux semi-infinis ainsi que dans des structures plus complexes telles que celle d'un super-réseau fini déposé sur un substrat et recouvert d'une couche d'encapsulation. Ces modes apparaissent comme des pics de densités d'états soit à l'intérieur des minigaps soit à l'intérieur des bandes de volume du super-réseau. Les densités d'états locales et totales sont obtenues à partir d'une détermination analytique des fonctions réponses (de Green) dans ces hétérostructures.

Dans le cas des modes acoustiques transverses, nous avons montré analytiquement que la création de la surface libre d'un super-réseau semi-infini ou de son interface avec un substrat donne lieu, dans la variation de la densité d'états totale, à des pics δ de poids $-1/4$ aux limites des bandes de volume du super-réseau et du substrat. Une conséquence de cette propriété est la nécessaire existence de modes localisés de surface et de modes résonnants d'interface, afin de respecter la règle de conservation du nombre total d'états.

Nous avons aussi abordé l'étude des modes acoustiques de polarisation sagittale et, en particulier, montré numériquement la nécessaire existence de modes localisés de surface à l'intérieur des gaps du super-réseau, mais aussi de modes "semi-localisés" (sans analogue pour les modes transverses) qui apparaissent comme des résonances bien marquées à l'intérieur des bandes de volume du super-réseau.

Un chapitre de ce mémoire est consacré à l'étude des états vibrationnels d'une couche adsorbée sur un substrat. Notre intérêt a, en particulier, porté sur les ondes quasi-longitudinales dont la possibilité d'existence a été montrée dans quelques travaux récents. Ce problème peut aussi représenter une approche pour décrire un super-réseau fini traité dans l'approximation d'un milieu effectif.

Finalement, nous avons examiné les états électroniques associés à l'interface d'un super-réseau semi-conducteur avec un substrat. Pour ce faire, nous avons utilisé un modèle simple de Kronig-Penney caractérisé par la modulation de la masse effective et du potentiel.

Mots clés:

Ondes acoustiques
Etats électroniques
Modes localisés et résonnants
Densité d'états
Surface et interface
Couche adsorbée
Super-réseau
Hétérostructure

Sommaire

SOMMAIRE

	page
INTRODUCTION GENERALE.....	4
Bibliographie.....	7

Chapitre I : THEORIE DE REPONSE D' INTERFACE DES MATERIAUX COMPOSITES ELASTIQUES

I-1 Introduction.....	11
I-2 Formalisme de la fonction de Green.....	12
I-2-1 Equations générales pour un matériau avec surfaces libres.....	12
I-2-2 Equations générales pour un matériau composite.....	15
I-3 Théorie générale pour un matériau composite élastique.....	16
I-3-1 Equations de volume et de surface.....	16
I-3-2 Systèmes composites lamellaires.....	19
A- Fonction réponse de volume d'un cristal hexagonal.....	19
B- Cristal hexagonal semi-infini.....	23
C- Lamé mince d'un cristal hexagonal.....	24
I-4 Conclusion.....	27
Appendice A.....	29
Bibliographie	45

Chapitre II : LES ONDES LOCALISEES ET RESONNANTES DANS UNE COUCHE ADSORBEE SUR UN SUBSTRAT

II-1 Introduction.....	46
II-2 Densité d'états d'une lame mince adsorbée sur un substrat.....	47
II-3 Modèle élastique de la couche adsorbée.....	51
II-4 Applications et discussions des résultats.....	54
II-5 Conclusion.....	69
Bibliographie.....	70

Chapitre III : ONDES ACOUSTIQUES DE SURFACE ET D'INTERFACE DANS LES SUPER-RESEAUX SEMI-INFINIS

III-1 Introduction.....	72
III-2 Modes localisés et résonnants de polarisation transverse.....	75
III-2-1 Fonctions de Green d'un super-réseau infini et semi-infini....	75
A- Equations générales.....	75
B- Fonction de Green d'un super-réseau infini.....	78
C- Fonction de Green d'un super-réseau semi-infini.....	80
III-2-2 Densités d'états.....	82
A- Densités d'états locales.....	83
B- Densités d'états totales.....	83
C- Etats localisés.....	85
D- Limite d'un super-réseau semi-infini sans la couche d'encapsulage.....	85
E- Limite d'un super-réseau semi-infini en contact avec un substrat homogène.....	86
F- Récapitulation des règles générales sur l'existence des états l localisés et résonnants.....	88
III-2-3 Applications et discussions des résultats.....	89
A- Super-réseau semi-infini.....	89
B- Super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage....	94
C- Super-réseau semi-infini en contact avec un substrat homogène.....	98
III-3 Modes localisés et résonnants de polarisation sagittale.....	108
III-3-1 Fonctions de Green d'un super-réseau	108
A- Fonction de Green d'un super-réseau infini.....	108
B- Fonction de Green d'un super-réseau semi-infini.....	111
C- Etats localisés et densités d'états locales.....	113
D- Densité d'états totale.....	113
E- Nécessité d'existence des états localisés et résonnants.....	114
III-3-2 Quelques applications.....	114
III-4 Conclusion.....	119
Appendice B.....	122
Bibliographie.....	142

Chapitre IV : ONDES ACOUSTIQUES TRANSVERSES DANS UN SUPER-RESEAU FINI

IV-1 Introduction.....	145
IV-2 Fonction de Green d'un super-réseau fini déposé sur un substrat.....	146
IV-3 Densités d'états.....	149
IV-3-1 Densités d'états locales.....	149
IV-3-2 Densités d'états totales.....	150
IV-3-3 Cas particuliers.....	151
IV-4 Illustrations et discussions des résultats.....	152
IV-4-1 Super-réseau fini sans la couche d'encapsulage.....	152
IV-4-2 Super-réseau fini avec une couche d'encapsulage à la surface	158
IV-4-3 Super-réseau fini placé entre deux substrats homogènes.....	162
IV-5 Conclusion.....	166
Appendice C.....	167
Bibliographie.....	170

Chapitre V : ETATS ELECTRONIQUES DE SURFACE DANS LES SUPER-RESEAUX SEMICONDUCTEURS

V-1 Introduction.....	172
V-2 Modèle de Kronig-Penney appliqué à des super-réseaux semi-conducteurs.....	174
V-3 Quelques applications et discussions des résultats.....	177
V-3-1 Effets des paramètres de composition du super-réseau et du substrat sur les états électroniques de surface.....	177
V-3-2 Effets d'une couche à l'interface super-réseau-substrat sur les états électroniques de surface.....	183
V-4 Conclusion.....	191
Bibliographie.....	193
CONCLUSION GENERALE.....	195

Introduction Générale

INTRODUCTION GENERALE

L'étude des phonons acoustiques dans les super-réseaux a fait l'objet de nombreux travaux ces dernières années [1-7], essentiellement depuis la première observation [8], en 1980, des doublets associés aux modes repliés dans la première minizone de Brillouin du super-réseau. La diffusion Raman est le moyen approprié pour l'observation de ces modes. L'étude des fréquences des phonons ainsi que des intensités et profils des raies Raman présente, au-delà d'un intérêt fondamental, un moyen de caractérisation de ces hétérostructures [9] (périodes, propriétés élastiques et photoélastiques, qualité des interfaces).

Les états propagatifs dans le super-réseau forment les bandes de volume qui sont séparées par des bandes interdites (minigaps) où peuvent exister des états localisés associés à une perturbation du super-réseau parfait telle que défauts [10], surface libre [11], interface avec le substrat [12]... Quelques travaux par diffusion Brillouin ou autres techniques acoustiques ont étudié dans les super-réseaux métalliques [13-21] et semi-conducteurs [22-23], les ondes de surface de type usuel (Rayleigh, Sezawa, Love) qui apparaissent au-dessous des bandes de volume. Les modes de surface pouvant exister dans les minigaps ne sont pratiquement pas étudiés car ils sont davantage sensibles à la nature de la couche superficielle du super-réseau, alors que l'information sur celle-ci n'est en général pas disponible de façon exacte. Aussi, les auteurs qui ont observé des modes dans les minigaps par diffusion Raman n'ont pas essayé en général de les attribuer de façon argumentée. Une étude de Trodhal et al [24] a cependant montré sur un super-réseau Ge-SiO biseauté l'existence de modes dans les minigaps, sensibles à l'épaisseur de la couche de surface à l'endroit étudié.

De même, il n'existe que quelques travaux prenant en compte l'effet de la taille finie du super-réseau ou son interaction avec un substrat. Ainsi, des pics Raman observés [25] sur des super-réseaux ultraminces $\text{Si-Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ont été interprétés à l'aide d'un modèle de chaîne linéaire comme des résonances induites par le substrat et par la couche d'encapsulage. D'autres expériences récentes sur des super-réseaux à plus grande période [26] ont révélé l'existence d'un grand nombre de petits pics Raman résultant de la taille finie du super-réseau.

Sur le plan théorique, les modes de surface d'un super-réseau ont été étudiés depuis plusieurs années dans le cadre de la théorie de l'élasticité, souvent

par la méthode de la matrice de transfert [10-12,27] et quelques fois à l'aide du formalisme de fonction de Green [28]. Notre travail, dont la plus grande partie concerne les états vibrationnels des surfaces et interfaces dans les super-réseaux, était guidé par deux objectifs au départ. D'une part, aborder non seulement le cas d'un super-réseau semi-infini, avec une surface libre ou en contact avec un substrat, mais aussi des géométries plus complexes telles que celle d'un super-réseau fini déposé sur un substrat et recouvert d'une couche d'encapsulation. D'autre part, au-delà de la détermination des états localisés de surface, calculer la distribution complète des états, c'est-à-dire les densités d'états locales et totales dans ces hétérostructures. Ceci permet en particulier d'obtenir les états résonnants associés aux surfaces et interfaces. La méthode de fonction de Green est adaptée pour cette étude; de plus, elle peut être utilisée dans les problèmes de diffusion, non abordés dans ce travail.

Nous avons en premier lieu calculé analytiquement les fonctions de Green dans ces hétérostructures pour les modes de vibration de polarisation transverse, qui sont à caractère scalaire car n'impliquant qu'un seul degré de vibration (cependant ces résultats s'appliquent aussi aux modes purement longitudinaux se propageant le long de l'axe du super-réseau). Nous discutons ainsi en détail les relations de dispersion des modes localisés et résonnants dans les super-réseaux semi-infinis [29] (avec une surface libre recouverte ou non d'une couche d'encapsulation, ou en contact avec un substrat) ainsi que dans les super-réseaux finis [30]. De plus, au-delà des conditions d'existence de ces états, nos calculs analytiques nous ont permis d'aboutir à quelques règles générales sur la nécessité d'existence de modes de surface et d'interface [29].

Nous avons également abordé l'étude des ondes de polarisation sagittale, pour lesquelles les calculs des fonctions réponses deviennent beaucoup plus compliqués en raison du couplage de deux degrés de vibration. Ainsi, nous sommes-nous limités pour l'instant au cas de super-réseaux semi-infinis avec une surface libre.

Un chapitre de ce mémoire est consacré à l'étude des états vibrationnels d'une couche mince adsorbée sur un substrat [31]. Ce problème peut simplement représenter une introduction à l'étude des hétérostructures citées plus haut, voire constituer une approche réaliste pour décrire un super-réseau fini traité dans l'approximation d'un milieu effectif [32-33] (c'est-à-dire dans l'approximation où les longueurs d'ondes élastiques sont grandes par rapport à la

période du super-réseau pour que ce dernier puisse être traité comme un milieu homogène effectif). Cependant, notre intérêt pour cette étude a plutôt été motivé par quelques travaux expérimentaux et théoriques récents montrant la possibilité d'existence d'ondes résonnantes ayant un caractère quasi-longitudinal guidés dans la couche adsorbée [34-37]. Notre approche en fonction de Green nous permet aisément d'obtenir et de discuter ces résonances.

Enfin, nous avons mis à profit l'analogie entre les équations de mouvement en élasticité et l'équation de Schrodinger dans l'approximation de la masse effective pour transposer nos calculs précédents à l'étude des modes électroniques de surface et d'interface des super-réseaux semiconducteurs [38-40].

Une motivation pour ces calculs est venue des expériences récentes d'Ohno et al [41-42] qui ont mis en évidence par des mesures optiques (spectres de photoluminescences, spectres de photocourant sous un champ électrique) des états localisés du genre Tamm [43] associés à "la surface interne" du super-réseau (c'est-à-dire l'interface super-réseau-substrat) ainsi que leur interaction avec les états propagatifs du super-réseau [44]. Ces études présentent au-delà d'un intérêt fondamental, un moyen d'observer la qualité des surfaces et interfaces dans ces matériaux. Nous avons effectué ce travail en collaboration avec l'équipe de M. Steslicka (Université de Wroclaw, Pologne) qui utilise pour ses calculs une technique d'adaptation directe des fonction d'ondes [45] (direct matching procedure). Dans la pratique, notre approche s'avère beaucoup plus rapide pour le calcul des densités d'états partielles et permet en plus d'obtenir les densités d'états totales dans ces hétérostructures.

Ce travail est structuré de la façon suivante. Dans le chapitre I, nous rappelons les ingrédients pour le calcul des fonctions réponses et nous dérivons ces quantités pour les éléments individuels (substrat semi-infini, lame mince) à partir desquels on peut fabriquer les hétérostructures décrites précédemment. Dans le chapitre II, nous présentons une première application pour l'étude des modes localisés et résonnants d'une couche adsorbée sur un substrat. Le chapitre III sera consacré aux ondes acoustiques de surface et d'interface dans les super-réseaux semi-infinis. Nous abordons de façon détaillée les modes de polarisation transverse, puis nous présentons une étude plus succincte dans le cas des modes de polarisation sagittale. Dans le chapitre IV, nous traiterons les ondes acoustiques transverses dans un superréseau fini. Le chapitre V porte sur les états électroniques à l'interface entre un super-réseau semiconducteur et un substrat.

Bibliographie de l'introduction

1. M.V. Klein, I.E.E.E. J. Quant. Elec. QE-22, 1760 (1986).
2. J. Sapriel and B. Djafari-Rouhani, Surface Science Reports 10, 189 (1989).
3. B. Jusserand and M. Cardona, in "Light Scattering in Solids", V, ed. M. Cardona and G. Güntherodt (Springer, Berlin, 1989) p. 49.
4. M. Cardona, in : Proc. Nato ARW on Spectroscopy of Semiconductor Microstructures, ed. G. Fasol, A. Fasolino and P. Lugli (Plenum, New York, 1990).
5. M. Cardona, Superlattices and Microstructures 4, 27 (1989).
6. A. Huber, T. Egeler, W. Etmüller, H. Rothfritz, G. Tränkle and G. Abstreiter, Superlattices and Microstructures 9, 309 (1991).
7. Voir aussi : "Light Scattering in Semiconductor Structures and Superlattices", Ed. D.J. Lockwood and J.F. Young, Plenum Press, New York, 1991.
8. L.Colvard, R.Merlin, M.V.Klein, and A.C.Gossard. Phys. Rev. Lett. 45, 298 (1980)
9. J.He Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI, (1989).
- 10 E.M. Khourdifi and B. Djafari-Rouhani, J. Phys. (Condensed Matter) 1, 7543 (1989).
S. Tamura, Phys. Rev. B 39, 1261 (1989).
- 11 R.E. Camley, B. Djafari-Rouhani L. Dobrzynski, and A.A. Maradudin, Phys. Rev. B 27, 7318 (1983).
J. Sapriel, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, Surface Science 126, 197 (1983).
- 12 E.M. Khourdifi and B. Djafari-Rouhani, Surface Science, 211/212, 361 (1989).
B. Djafari-Rouhani and E.M. Khourdifi dans la référence III.7, page 139.
13. A. Kueny, M. Grimsditch, K. Miyano, I. Banerjee, Charles M. Falco, and Ivan K. Schuller. Phys. Rev. Letters 48, 166 (1982)

- 14 M.R. Khan, C.S.L. Chun, G. Felcher, M. Grimsditch, A. Kueny, C.M. Falco and I.K. Schuller, *Phys. Rev. B* 27, 718 (1983).
- 15 R. Danner, R.P. Huebener, C.S.L. Chun, M. Grimsditch, and Ivan K. Schuller, *Phys. Rev. B* 33, 3696 (1986).
- 16 P. Bisanti, M.B. Brodsky, G.P. Felcher, M. Grimsditch, and L.R. Sill, *Phys. Rev. B* 35, 7813 (1987).
- 17 J.A. Bell, W.R. Bennett, R. Zanoni, G.I. Stegeman, C.M. Falco and C.T. Seaton, *Solid State Communications* 64, 1339 (1987).
- 18 J.A. Bell, W.R. Bennett, R. Zanoni, G.I. Stegeman, C.M. Falco, and F. Nizzoli, *Phys. Rev. B* 35, 4127 (1987).
- 19 P. Baumgart, B. Hillebrands, R. Mock, G. Güntherodt, A. Boufelfel and C.M. Falco, *Phys. Rev. B* 34, 9004 (1986).
- 20 Sudha Kumar, R. Bhadra, A. Fartash, M. Grimsditch, C. Kim, S.B. Qadri and A.S. Edelstein, *Phys. Rev. B* 44, 5905 (1991)
- 21 J.A. Bell, R.J. Zanoni, C.T. Seaton, G.I. Stegeman, W.R. Bennett and C.M. Falco, *Appl. Phys. Lett.* 51, 652 (1987).
- 22 J. Sapriel, J.C. Michel, J.C. Tolédano, R. Vacher, J. Kervarec and A. Regreny, *Phys. Rev. B* 28, 2007 (1983).
- 23 M. Grimsditch, R. Bhadra, Ivan K. Shuller, F. Chambers and G. Devane, *Phys. Rev. B* 42, 2923 (1990).
- 24 H.J. Trodahl, P.V. Santos, G.V.M. Williams and A. Bittar, *Phys. Rev. B* 40, 8577 (1989).
- 25 D.J. Lockwood, M.W.C. Dharma - Wardona, G.C. Aers and J.M. Baribeau, *Appl. Phys. Lett.* 52, 2040 (1988).
- 26 P.X. Zhang, D.J. Lockwood, J.M. Baribeau, *Can. J. Phys.* 70, 843 (1992) ; *Appl. Phys. Lett.* 62, 267, (1993) ;
P.X. Zhang, D.J. Lockwood, H.J. Labbé and J.M. Baribeau, *Phys. Rev. B* 46, 9881 (1992) ; M.W.C. Dharma Wardana, P.X. Zhang, and D.J. Lockwood, *Phys. Rev. B* 48, (1993).

27. B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, O. Hardouin Duparc, R.E. Camley and A.A. Maradudin, Phys. Rev. B 28, 1711 (1983).
A. Nougououi and B. Djafari-Rouhani, Surface Science 185, 125 (1987).
- 28 R.A. Brito -Orta, V.R. Velasco and F. Garcia-Moliner Surf. Sci. 187, 223 (1987)
29. E.H. El Boudouti, B. Djafari Rouhani, E.M. Khourdifi and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 48, 10987 (1993).
B. Djafari-Rouhani, E.H. El Boudouti and E.M. Khourdifi, Vacuum 45, 341 (1994).
30. E.H. El Boudouti and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. B 49, 4586 (1994).
31. A. Akjouj, E.H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, J. Phys.: Condensed Matter 6, 1089 (1993).
32. B. Djafari-Rouhani, J. Sapriel, A. Nougououi, L. Dobrzynski, M. Proc. 2nd Int. Conf. on Phonon Physics, Budapest (World Scientific, Singapore) P. 555 (1985).
33. M. Grimsditch and F. Nizzoli, Phys. Rev. B 31, 6818 (1985); B 33, 5891 (1986)
- 34 B. Hillebrands, S. Lee, G.I. Stegman, H. Cheng, J.E. Potts and F. Nizzoli, Phys. Rev. Lett. 60, 832 (1988) and Surf. Sci. 211/212, 387 (1989).
S. Lee, B. Hillebrands, G.I. Stegman, H. Cheng, J. E. Potts and F. Nizzoli, J. Appl. Phys. 63, 1914 (1988).
35. F. Nizzoli, B. Hillebrands, S. Lee, G.I. Stegman, G. Duda, G. Wegner and W. Knoll, Phys. Rev. B 40, 3323 (1989).
36. V. Bortolani, A.M. Marvin, F. Nizzoli and G. Santoro. J. Phys. C. 16, 1757 (1983).
37. G. Benedek, J. Ellis, A. Reichmuth, P. Ruggerone, H. Schief and J.P. Toennies, Phys. Rev. Lett. 69, 2951 (1992).

- 38 E.H. El Boudouti, R. Kucharczyk and M. Steslicka, VIth Symposium on Surface Physics, Chlum Castle, Czech Republic, 24-28 May 1993. Czech. J. of Phys. 43, 89 (1993).
- 39 M. Steslicka, R. Kucharczyk, L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani, E.H. El Boudouti and W. Jaskolski, Prog. in Surf. Sci. (à paraître).
- 40 M. Steslicka, R. Kucharczyk, E.H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani, and L. Dobrzynski : ECOOS - 13, Warwick 30 août - 4 Septembre 1993 (Grande Bretagne).
M. Steslicka et al (à paraître).
- 41 - H. Ohno, E.E. Mendez, J.A. Brum, J.M. Hong, F. Agullo-Rueda, L.L. Chang and L. Esaki, Phys. Rev. Lett 64, 2555 (1990).
- 42 - H. Ohno, E.E. Mendez, A. Alexandrou and J.M. Hong, Surf. Sci 267, 161 (1992).
- 43 - I. Tamm, Phys. Z. Sowjetunion 1, 733 (1932).
- 44 - F. Agullo-Rueda, E.E. Mendez, H. Ohno, and J.M. Hong, Phys. Rev. B 42, 1470 (1990).
- 45 - M. Steslicka, R. Kucharczyk and M.L. Glasser, Phys. Rev. B 42, 1458 (1990).

Chapitre I

CHAPITRE I

THEORIE DE REPONSE D'INTERFACE DES MATERIAUX COMPOSITES ELASTIQUES

I - 1. INTRODUCTION

Afin d'étudier les propriétés physiques des surfaces et interfaces dans les systèmes continus (élasticité, structure électronique, électromagnétisme), des méthodes de calcul basées sur le formalisme de la fonction de Green ont été proposées [1,5]. Dans ce cadre, une nouvelle méthode de calcul a été développée récemment [6,7] pour l'étude des systèmes composites quelconques comportant un grand nombre de surfaces et interfaces, intitulée théorie de réponse d'interfaces [6,7]. Cette méthode permet d'obtenir les fonctions réponses (de Green) et, par voie de conséquence, les relations de dispersion des modes localisés ainsi que les densités d'états (locales et totales) dans n'importe quel type de systèmes composites, à condition de connaître au départ les fonctions de Green de volume des constituants. Son principe est d'établir, dans un premier temps, les fonctions réponses dans l'espace plus limité des interfaces séparant les différents constituants avant d'étendre le calcul à l'espace complet. Dans le cas des matériaux multicouches élastiques auxquels nous nous sommes intéressés dans ce travail, une grande partie des calculs a même pu être effectuée de façon analytique.

Pour aborder l'étude des systèmes composites lamellaires élastiques, il est nécessaire de considérer d'abord chacune de leurs composantes (lames minces, milieux homogènes semi-infinis: substrats) prise indépendamment. Le calcul des fonctions de Green de ces systèmes élémentaires a déjà été effectué auparavant [3-6,8-10] pour les matériaux élastiques isotropes ou à symétrie hexagonale. Ce chapitre contient ces résultats de base, que nous établissons ici dans le cadre de la théorie des réponses d'interface, pour les matériaux à symétrie hexagonale ayant des surfaces (0001). Nous indiquerons dans la conclusion comment ces résultats

peuvent aussi dans certains cas s'appliquer par simple transposition à des cristaux cubiques.

Dans le paragraphe I-3. nous présentons l'ensemble des résultats utiles pour tous les chapitres qui suivent. Auparavant, nous décrivons (paragraphe I-2) le formalisme de la fonction de Green que nous avons utilisé dans ce travail.

I - 2. FORMALISME DE LA FONCTION DE GREEN

Parmi les formalismes les plus utilisés pour l'étude des surfaces et interfaces des matériaux (surface d'un solide [3], lame mince d'un solide [5, 8], interface entre deux solides [1,2,4], super-réseaux [11]...), on trouve la méthode de la fonction de Green. Ce formalisme nous permet, en plus de la détermination de la relation de dispersion dans ces matériaux, d'obtenir les densités d'états locales et totales ainsi que d'autres propriétés vibrationnelles. Cependant, l'application de cette approche aux problèmes d'interfaces exige auparavant la connaissance des propriétés des surfaces libres des constituants du matériau composite. La théorie des réponses d'interface [6, 7] traite de façon unifiée des problèmes formulés dans un espace discret (vibration des réseaux...) ou continu (théorie de l'élasticité, équation de Schrodinger...).

Nous allons rappeler brièvement, ici, les démarches utilisées pour le calcul de ces fonctions réponses (de Green) dans le cas des systèmes continus [6] qui nous intéressent ici.

I - 2 -1. Equations générales pour un matériau avec surfaces libres

Soit un matériau homogène infini i (Fig. I-1a) défini dans un espace $D_\infty^{(i)}$ auquel on associe un opérateur $\overset{\leftrightarrow}{H}_i$. La fonction réponse $\overset{\leftrightarrow}{G}_i$ de ce matériau n'est autre que l'inverse de l'opérateur $\overset{\leftrightarrow}{H}_i$ et est définie par :

$$\overset{\leftrightarrow}{H}_i \overset{\leftrightarrow}{G}_i = I, \quad \text{dans } D_\infty^{(i)} \quad (I.1)$$

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

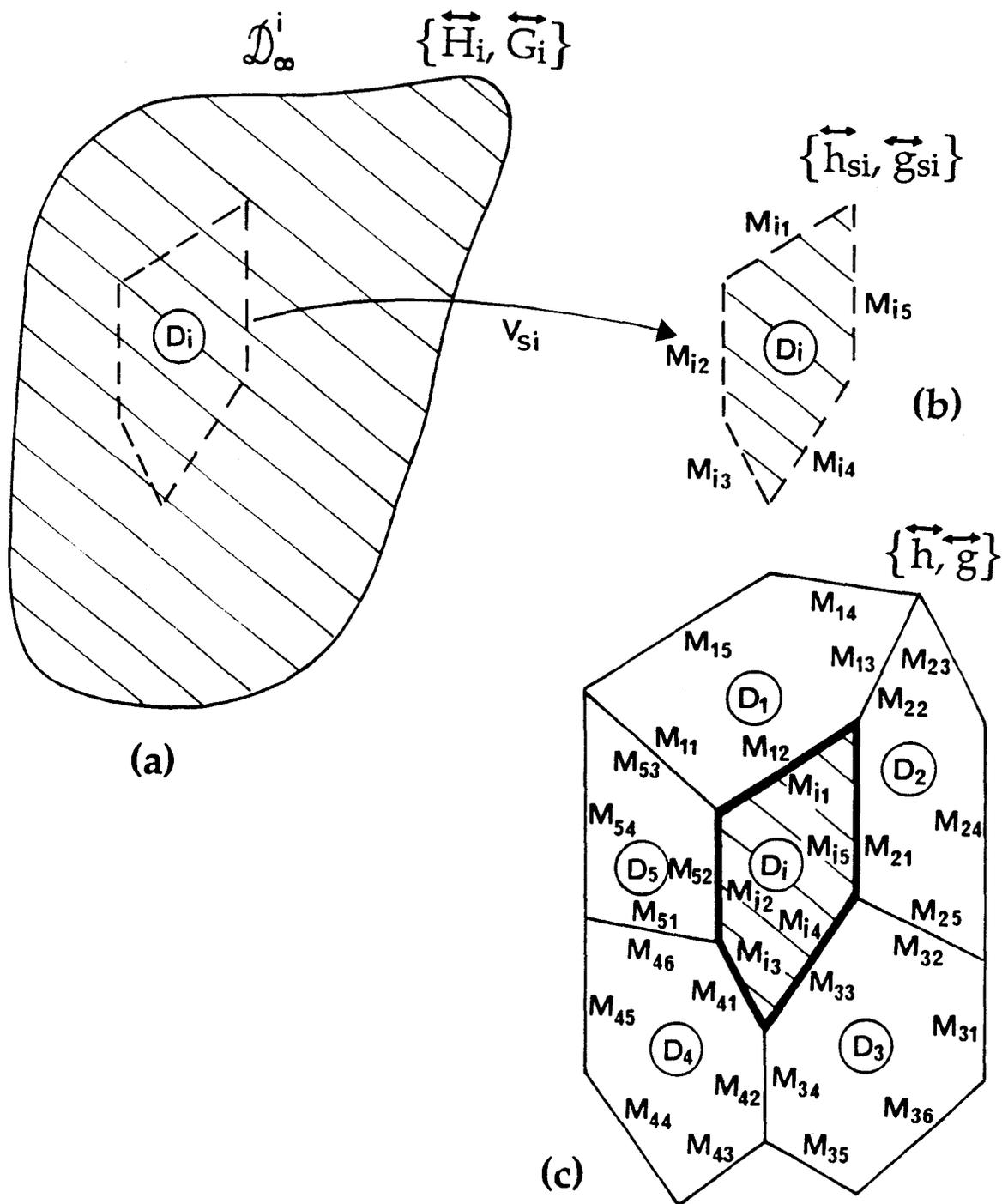


Figure I-1 Formation d'un matériau composite (c), défini dans l'espace $D \equiv UD_i$, à partir de ses composantes définies dans leurs espaces d'existence D_i (b). Chacune de ces dernières est découplée de son système de référence infini, défini par l'espace $D_{\infty}^{(i)}$ (a).

A partir de ce matériau infini, on crée à l'aide de l'opérateur de clivage $\overleftrightarrow{V}_{si}$, un matériau occupant l'espace D_i (Fig. I-1b), et délimité par des surfaces libres M_{ij} ($j = 1,5$ sur la fig. I-1b). On lui associe l'opérateur $\overleftrightarrow{h}_{si}$, tel que

$$\overleftrightarrow{h}_{si} = \overleftrightarrow{H}_i + \overleftrightarrow{V}_{si}, \quad \text{dans } D_i \quad (I.2)$$

la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}_{si}$ correspondante est définie par

$$\overleftrightarrow{h}_{si} \overleftrightarrow{g}_{si} = \overleftrightarrow{I}. \quad (I.3)$$

\overleftrightarrow{H}_i et $\overleftrightarrow{h}_{si}$ peuvent être selon les propriétés à étudier, une matrice dynamique, un hamiltonien...

On définit l'opérateur réponse de surface par

$$\overleftrightarrow{A}_{si} = \overleftrightarrow{V}_{si} \overleftrightarrow{G}_i. \quad \text{dans } D_i \quad (I.4)$$

Les éléments $A_{si}(n, n')$ de cet opérateur sont nuls si $n \notin M_i$, où $M_i \equiv \cup M_{ij}$ est l'espace des interfaces.

La connaissance de la fonction réponse de volume \overleftrightarrow{G}_i et de l'opérateur réponse de surface $\overleftrightarrow{A}_{si}$, nous permet de déduire la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}_{si}$ d'un matériau homogène avec surfaces libres

$$\overleftrightarrow{g}_{si} (\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{si}) = \overleftrightarrow{G}_i. \quad \text{dans } D_i \quad (I.5)$$

D'autre part, en considérant des matrices rectangulaires $\overleftrightarrow{A}_{si}(M_i D_i)$, l'équation précédente s'écrit

$$\overleftrightarrow{g}_{si}(D_i D_i) = \overleftrightarrow{G}_i(D_i D_i) - \overleftrightarrow{G}_i(D_i M_i) \overleftrightarrow{\Lambda}_{M_i}^{-1}(M_i M_i) \overleftrightarrow{A}_{si}(M_i D_i) \quad \text{dans } D_i \quad (I.6)$$

avec

$$\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{si} (M_i M_i) = \overset{\leftrightarrow}{I} (M_i M_i) + \overset{\leftrightarrow}{A}_{si} (M_i M_i) . \quad \text{dans } M_i \quad (I.7)$$

Une forme particulière de l'équation (I.6) est

$$\overset{\leftrightarrow}{g}_{si}^{-1} (M_i M_i) = \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{si} (M_i M_i) G_i^{-1} (M_i M_i) , \quad \text{dans } M_i \quad (I.8)$$

où $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{si}^{-1} (M_i M_i)$, $\overset{\leftrightarrow}{g}_{si}^{-1} (M_i M_i)$ et $\overset{\leftrightarrow}{G}_i^{-1} (M_i M_i)$ sont respectivement les

inverses des matrices $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{si} (M_i M_i)$, $\overset{\leftrightarrow}{g}_{si} (M_i M_i)$ et $\overset{\leftrightarrow}{G}_i (M_i M_i)$

I - 2 - 2. Equations générales pour un matériau composite

Soit un système composite défini dans l'espace D et formé de sous systèmes définis respectivement dans leurs espaces d'existence D_i ($D \equiv \cup D_i$) (Fig. I-1c). Ces sous-systèmes sont assemblés par leurs domaines d'interfaces $M_i \in D_i$. Chaque sous-système i est en général en interaction avec J autres sous-systèmes. Ainsi, l'espace de l'interface M_i est en général composé de J sous-interfaces M_{ij} , $1 \leq j \leq J$; et l'ensemble de tous les espaces M_i est appelé espace d'interface M du matériau composite ($M \equiv \cup M_i$).

La fonction réponse d'un tel système s'écrit [6,7]

$$\overset{\leftrightarrow}{g}(DD) = \overset{\leftrightarrow}{G}(DD) - \overset{\leftrightarrow}{G}(DM) \overset{\leftrightarrow}{G}^{-1}(MM) \overset{\leftrightarrow}{G}(MD) + \overset{\leftrightarrow}{G}(DM) \overset{\leftrightarrow}{G}^{-1}(MM) \overset{\leftrightarrow}{g}(MM) \overset{\leftrightarrow}{G}^{-1}(MM) \overset{\leftrightarrow}{G}(MD) . \quad (I.9)$$

Cette équation permet le calcul de tous les éléments de la fonction réponse $\overset{\leftrightarrow}{g}(DD)$ une fois connus ceux dans l'espace des interfaces $\overset{\leftrightarrow}{g}(MM)$. Or ces derniers s'obtiennent par une superposition des différentes $\overset{\leftrightarrow}{g}_{si}^{-1}(M_{ij}, M_{i'j'})$ (éq.(I.8))

associées aux différents sous-systèmes i constituant le système composite [6] :

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(M_{ij}, M_{i'j'}) = 0 ; \quad M_{i'j'} \notin M_i \quad (\text{I.10a})$$

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(M_{ij}, M_{i'j'}) = \overleftrightarrow{g}_{si}^{-1}(M_{ij}, M_{i'j'}) ; \quad j' \neq j \quad (\text{I.10b})$$

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(M_{ij}, M_{ij}) = \sum_{i'} \overleftrightarrow{g}_{si}^{-1}(M_{ij}, M_{i'j'}) \quad M_{i'j'} = M_{ij} \quad (\text{I.10c})$$

Toutes les conditions aux limites aux interfaces sont satisfaites à travers les équations (I.10, a, b, c).

Les nouveaux modes associés aux interfaces du système composite sont donnés par l'équation :

$$\det [\overleftrightarrow{g}^{-1} (MM)] = 0 \quad (\text{I.11})$$

I - 3. THEORIE GENERALE POUR UN MATERIAU COMPOSITE ELASTIQUE

I - 3 - 1. Equations de volume et de surface

L'équation de mouvement pour le déplacement u_α , $\alpha = 1, 2, 3$ d'un point d'un matériau élastique tridimensionnel est

$$-\rho\omega^2 u_\alpha = \sum_{\beta} \frac{\partial T_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} , \quad (\text{I.12})$$

où ρ est la densité, ω la fréquence de vibration, $T_{\alpha\beta}$ les éléments du tenseur des contraintes définis par l'équation:

$$T_{\alpha\beta} = \sum_{\mu\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \eta_{\mu\nu} \quad (\text{I.13})$$

$C_{\alpha\beta\mu\nu}$ sont les constantes élastiques et $\eta_{\mu\nu}$ les éléments du tenseur des déformations

$$\eta_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial u_\nu}{\partial x_\mu} \right) . \quad (\text{I.14})$$

L'équation de mouvement (I.12) devient alors

$$-\rho\omega^2 u_\alpha = \sum_{\beta\mu\nu} \frac{\partial C_{\alpha\beta\mu\nu}}{\partial x_\beta} \frac{\partial u_\mu}{\partial x_\nu} + \sum_{\beta\mu\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2 u_\mu}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \quad (\text{I.15})$$

Pour un milieu infini homogène et uniforme, les $C_{\alpha\beta\mu\nu}$ ne dépendent pas du vecteur position \vec{x} , et l'équation (I.15) devient

$$\left[\rho\omega^2 \delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \right] u_\mu = 0, \quad (\text{I.16})$$

qu'on peut écrire formellement

$$H_{\alpha\mu}(\vec{x}) u_\mu(\vec{x}) = 0 \quad (\text{I.17})$$

avec

$$H_{\alpha\mu}(\vec{x}) = \rho\omega^2 \delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \text{ l'opérateur de volume. } (\text{I.18})$$

La fonction réponse de volume \overleftrightarrow{G} (éq. (I.1)) est définie par

$$\sum_{\mu} H_{\alpha\mu}(\vec{x}) G_{\mu\nu}(\vec{x}, \vec{x}') = \delta_{\alpha\nu} \delta(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (\text{I.19})$$

Supposons maintenant que le matériau élastique soit limité par une surface quelconque dont la position dans l'espace tridimensionnel infini est donnée par

$$x_3 = f(x_1, x_2), \quad (\text{I.20})$$

les constantes élastiques deviennent alors

$$C_{\alpha\beta\mu\nu}(\vec{x}) = \theta [x_3 - f(x_1, x_2)] C_{\alpha\beta\mu\nu}, \quad (\text{I.21})$$

où la fonction d'Heaviside θ est telle que

$$\theta [x_3 - f(x_1, x_2)] = \begin{cases} 1 & \text{si } x_3 \geq f(x_1, x_2) \\ 0 & \text{si } x_3 < f(x_1, x_2) \end{cases}.$$

L'équation (I.15) devient

$$\left\{ \theta [x_3 - f(x_1, x_2)] \left[\rho\omega^2 \delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \right] + \sum_{\beta\nu} \frac{\partial C_{\alpha\beta\mu\nu}(\vec{x})}{\partial x_\beta} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \right\} u_\mu = 0, \quad (I.22)$$

soit formellement

$$h_{\alpha\mu}(\vec{x}) u_\mu(\vec{x}) = 0 \quad (I.23)$$

$$\text{où } h_{\alpha\mu}(\vec{x}) = H_{\alpha\mu}(\vec{x}) + V_{\alpha\mu}(\vec{x}). \quad (I.24)$$

On distingue alors l'opérateur de volume (éqs. (I.2) et (I.18))

$$H_{\alpha\mu}(\vec{x}) = \theta [x_3 - f(x_1, x_2)] \left(\rho\omega^2 \delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \right) \quad (I.25)$$

et l'opérateur de clivage (éq. (I.2))

$$V_{\alpha\mu}(\vec{x}) = \sum_{\beta\nu} \frac{\partial C_{\alpha\beta\mu\nu}(\vec{x})}{\partial x_\beta} \frac{\partial}{\partial x_\nu}. \quad (I.26)$$

Après dérivation, la partie droite de l'équation (I.26) devient

$$V_{\alpha\mu}(\vec{x}) = \delta [x_3 - f(x_1, x_2)] \sum_{\nu} \left[-C_{\alpha 1 \mu \nu} \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} - C_{\alpha 2 \mu \nu} \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} + C_{\alpha 3 \mu \nu} \right] \frac{\partial}{\partial x_\nu}. \quad (I.27)$$

Les éléments de l'opérateur réponse de surface \overleftrightarrow{A} (éq. (I.4)) sont définis par

$$A_{\alpha\gamma}(\vec{x}, \vec{x}') = \sum_{\mu} V_{\alpha\mu}(\vec{x}) G_{\mu\gamma}(\vec{x}, \vec{x}'). \quad (I.28)$$

La connaissance de la fonction réponse \overleftrightarrow{G} et celle de l'opérateur réponse de surface \overleftrightarrow{A} nous permettent d'obtenir la fonction réponse \overleftrightarrow{g}_s du système composite avec surfaces libres (éqs. (I.6) et (I.7)).

I - 3 - 2. Systèmes composites lamellaires

Un système lamellaire quelconque peut être construit à partir de milieux semi-infinis et/ou de lames minces. Par conséquent, nous allons d'abord montrer comment on peut obtenir à partir des équations (I.4), (I.7) et (I.8), les éléments $\overleftrightarrow{g}_s^{-1} (M_i, M_j)$ correspondant soit à un cristal hexagonal semi-infini, soit à une lame mince d'un cristal hexagonal. Les surfaces de ces cristaux ont une orientation (0001).

Dans ce qui suit, nous supposons que les interfaces sont perpendiculaires à l'axe x_3 . La fonction $f(x_1, x_2)$ (éq. (I.20)) devient alors une constante. On tient compte, par la suite, de l'invariance par translation dans les directions parallèles aux interfaces et on applique la transformée de Fourier aux équations de mouvement ainsi qu'à tous les opérateurs correspondants. Soit par exemple:

$$G_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{x}') = \int \frac{d^2 k_{//}}{(2\pi)^2} G_{\alpha\beta}(\vec{k}_{//} | x_3, x'_3) e^{i \vec{k}_{//} (\vec{x}_{//} - \vec{x}'_{//})}, \quad (I.29)$$

où $\vec{k}_{//} \equiv (k_1, k_2)$ et $\vec{x}_{//} \equiv (x_1, x_2)$ sont les composantes, parallèles aux interfaces, des vecteurs d'onde \vec{k} et de position \vec{x} . On trouve alors que la transformée de Fourier $G_{\alpha\beta}(\vec{k}_{//} | x_3, x'_3)$ de la fonction réponse $G_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{x}')$ est solution du système d'équations différentielles suivant

$$\sum_{\mu} \left\{ \rho \omega^2 \delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha 3 \mu \nu} \left[(1 - \delta_{\beta 3}) i k_{\beta} + \delta_{\beta 3} \frac{d}{dx_3} \right] \right\} \times \quad (I.30)$$

$$\left[(1 - \delta_{\nu 3}) i k_{\nu} + \delta_{\nu 3} \frac{d}{dx_3} \right] \left. \right\} G_{\mu\gamma}(\vec{k}_{//} | x_3, x'_3) = \delta_{\alpha\gamma} \delta(x_3 - x'_3)$$

A - Fonction réponse de volume d'un cristal hexagonal

Un cristal hexagonal est défini [12] par sa densité ρ et ses constantes élastiques $C_{11}, C_{33}, C_{13}, C_{12}, C_{44}$. Nous nous intéressons ici aux interfaces (0001). L'isotropie de ces plans nous permet de choisir $\vec{k}_{//}$ parallèle à ces plans, dans une direction quelconque que nous appellerons \vec{x}_1 . Dans ce cas $|\vec{k}_{//}| = k_{//} = k_1$, et les résultats obtenus pour $G(k_1 | x_3, x'_3)$ peuvent être utilisés pour n'importe

quelle direction de $k_{//}$, après une rotation des axes \vec{x}_1 et \vec{x}_2 tel que $\vec{k}_{//}$ reste toujours suivant \vec{x}_1 . Nous les écrivons par la suite en fonction de $\vec{k}_{//}$ plutôt que k_1 .

Une autre propriété intéressante due à l'isotropie du cristal dans le plan (\vec{x}_1, \vec{x}_2) est le découplage des vibrations transverses (polarisées suivant \vec{x}_2) de celles polarisées dans le plan sagittal (\vec{x}_1, \vec{x}_3) [9,10]. Ceci nous permet d'étudier séparément ces deux types de vibrations.

Par conséquent, l'équation (I.30) peut s'écrire dans le cas des cristaux hexagonaux, sous la forme matricielle suivante [10] :

$$\begin{bmatrix} \rho\omega^2 + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} - C_{11} k_{//}^2 & 0 & i(C_{13} + C_{44}) k_{//} \frac{d}{dx_3} \\ 0 & \rho\omega^2 + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} - \frac{(C_{11}-C_{12})}{2} k_{//}^2 & 0 \\ i(C_{13} + C_{44}) k_{//} \frac{d}{dx_3} & 0 & \rho\omega^2 + C_{33} \frac{d^2}{dx_3^2} - C_{44} k_{//}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} & G_{13} \\ G_{21} & G_{22} & G_{23} \\ G_{31} & G_{32} & G_{33} \end{bmatrix} = \delta(x_3 - x'_3) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (I.31)$$

On obtient ainsi un système de neuf équations à neuf inconnues, dont la résolution (voir Appendice A) nous permet de déduire les éléments de la fonction de Green de volume $G_{\mu\gamma}$.

Considérons par exemple le cas simple de la composante G_{22} décrivant la vibration transverse. L'équation déduite de (I.31) s'écrit

$$\left(\rho\omega^2 + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} - \frac{(C_{11}-C_{12})}{2} k_{//}^2 \right) G_{22} = \delta(x_3 - x'_3) , \quad (I.32)$$

dont la solution est

$$G_{22}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = - \frac{1}{2 \alpha_2 C_{44}} e^{-\alpha_2 |x_3 - x'_3|} , \quad (I.33)$$

avec

$$\alpha_2^2 = k_{//}^2 \left(\frac{C_{11} - C_{12}}{2 C_{44}} \right) - \rho \frac{\omega^2}{C_{44}}. \quad (I.34)$$

De plus on démontre aisément que les composantes $G_{\alpha 2}$ et $G_{2\alpha}$ ($\alpha = 1, 3$) sont nulles.

Les quantités G_{11} , G_{31} , G_{13} et G_{33} décrivent la polarisation sagittale. Prenons à titre d'exemple le couple $\{ G_{11}, G_{31} \}$. Les équations déduites de (I.31) deviennent [9,10] :

$$(\rho\omega^2 - C_{11} k_{//}^2 + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2}) G_{11} + i (C_{13} + C_{44}) k_{//} \frac{d}{dx_3} G_{31} = \delta (x_3 - x'_3), \quad (I.35)$$

$$i (C_{13} + C_{44}) k_{//} \frac{d}{dx_3} G_{11} + (\rho\omega^2 - C_{44} k_{//}^2 + C_{33} \frac{d^2}{dx_3^2}) G_{31} = 0, \quad (I.36)$$

Après élimination de G_{31} entre (I.35) et (I.36), la nouvelle équation différentielle pour G_{11} s'écrit :

$$\left(\frac{d^2}{dx_3^2} - \alpha_1^2 \right) \left(\frac{d^2}{dx_3^2} - \alpha_3^2 \right) G_{11} = \frac{1}{C_{44}} \left[\frac{d^2}{dx_3^2} + \frac{1}{C_{33}} (-C_{44} k_{//}^2 + \rho\omega^2) \right] \delta (x_3 - x'_3) \quad (I.37)$$

où α_1 et α_3 sont définis par

$$\alpha_1^2 = 1/2 \left[x + (x^2 - 4 y^2)^{1/2} \right], \quad (I.38)$$

$$\alpha_3^2 = 1/2 \left[x - (x^2 - 4 y^2)^{1/2} \right], \quad (I.39)$$

avec

$$x = -\delta_1^2 - \delta_3^2 - \left[(C_{13} + C_{44})^2 / C_{33} C_{44} \right] k_{//}^2, \quad (I.40)$$

$$y^2 = \delta_1^2 \delta_3^2, \quad (I.41)$$

$$\delta_1^2 = (\rho\omega^2 - C_{11} k_{//}^2) / C_{44}, \quad (I.42)$$

$$\delta_3^2 = (\rho\omega^2 - C_{44} k_{//}^2) / C_{33}. \quad (\text{I.43})$$

La solution de l'équation (I.37) s'écrit

$$G_{11}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \frac{k_{//} (C_{44} + C_{13})}{2 C_{44} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{33} \xi_1} \left[-e^{-\alpha_1 |x_3 - x'_3|} + \xi e^{-\alpha_3 |x_3 - x'_3|} \right] \quad (\text{I.44})$$

$$\text{où } \xi = \frac{\xi_1}{\xi_3} \quad (\text{I.45})$$

$$\text{et } \xi_i = \frac{C_{11} k_{//}^2 - C_{44} \alpha_i^2 - \rho\omega^2}{(C_{13} + C_{44}) k_{//} \alpha_i} = \frac{(C_{13} + C_{44}) k_{//} \alpha_i}{\rho\omega^2 - C_{44} k_{//}^2 + C_{33} \alpha_i^2}, \quad i = 1, 3 \quad (\text{I.46})$$

En suivant le même raisonnement pour G_{13} , G_{31} , G_{33} , on trouve les solutions suivantes respectivement

$$G_{13}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \frac{i k_{//} (C_{44} + C_{13})}{2 C_{33} C_{44} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \operatorname{sgn}(x_3 - x'_3) \left[-e^{-\alpha_1 |x_3 - x'_3|} + e^{-\alpha_3 |x_3 - x'_3|} \right], \quad (\text{I.47})$$

$$G_{31}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \frac{i k_{//} (C_{44} + C_{13})}{2 C_{33} C_{44} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \operatorname{sgn}(x_3 - x'_3) \left[-e^{-\alpha_1 |x_3 - x'_3|} + e^{-\alpha_3 |x_3 - x'_3|} \right], \quad (\text{I.48})$$

$$G_{33}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \frac{k_{//} (C_{44} + C_{13}) \xi_3}{2 C_{33} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{44}} \left[\xi e^{-\alpha_1 |x_3 - x'_3|} - e^{-\alpha_3 |x_3 - x'_3|} \right] \quad (\text{I.49})$$

Remarquons que dans le cas des milieux isotropes, α_1^2 et α_3^2 deviennent respectivement

$$\alpha_{\ell}^2 = k_{//}^2 - \frac{\omega^2}{C_{\ell}^2} \quad (I.50)$$

$$\alpha_t^2 = k_{//}^2 - \frac{\omega^2}{C_t^2} \quad (I.51)$$

où C_{ℓ} et C_t sont respectivement les vitesses longitudinale et transverse du son dans le matériau définies par

$$C_{\ell}^2 = \frac{C_{11}}{\rho}, \quad (I.52)$$

et

$$C_t^2 = \frac{C_{44}}{\rho}. \quad (I.53)$$

B - Cristal hexagonal semi-infini

Considérons maintenant un cristal hexagonal semi-infini tel que $x_3 \geq f(x_1, x_2) = h$ (Fig. I-2)

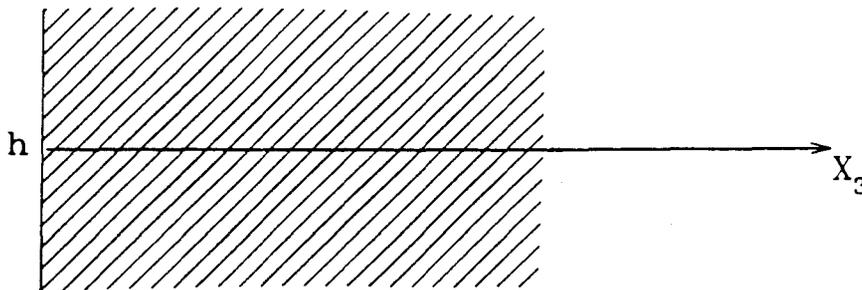


Figure I-2

L'opérateur de clivage nous permettant d'obtenir ce système, s'écrit sous la forme matricielle suivante (éq. (I.27))

$$\vec{\nabla}(k_{//}, x_3) = \begin{pmatrix} C_{44} \frac{d}{dx_3} & 0 & i C_{44} k_{//} \\ 0 & C_{44} \frac{d}{dx_3} & 0 \\ i C_{13} k_{//} & 0 & C_{33} \frac{d}{dx_3} \end{pmatrix} \delta(x_3 - h) \quad (I.54)$$

A partir des équations (I.4),(I.7) et (I.8) (voir Appendice A) on obtient

$$\overset{\leftrightarrow}{g}_S^{-1}(h, h) = \begin{bmatrix} \frac{C_{44} C_{33} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2) \xi_1}{(C_{13} + C_{44}) k_{//} (1 - \xi)} & 0 & -i C_{44} \left[\frac{\alpha_1 - \alpha_3}{\xi_3 (1 - \xi)} - k_{//} \right] \\ 0 & -\alpha_2 C_{44} & 0 \\ i C_{44} \left[\frac{\alpha_1 - \alpha_3}{\xi_3 (1 - \xi)} - k_{//} \right] & 0 & -\frac{C_{44} C_{33} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2)}{(C_{13} + C_{44}) k_{//} \xi_3 (1 - \xi)} \end{bmatrix} \quad (I.55)$$

Notons que si le cristal occupe le demi-espace $x_3 \leq h$, $\overset{\leftrightarrow}{g}_S^{-1}(h, h)$ a la même

expression que (I.55), mais avec un changement de signe des termes non diagonaux qui couplent les composantes x_1 et x_3 . Notons aussi que

$$\det [\overset{\leftrightarrow}{g}_S^{-1}(h, h)] = -\alpha_2 C_{44}^2 \left[C_{33} \alpha_1 \alpha_3 + C_{13} k_{//}^2 - \frac{(\alpha_1 - \alpha_3) k_{//}}{1 - \xi} \left(C_{33} \xi_1 + \frac{C_{13}}{\xi_3} \right) \right]. \quad (I.56)$$

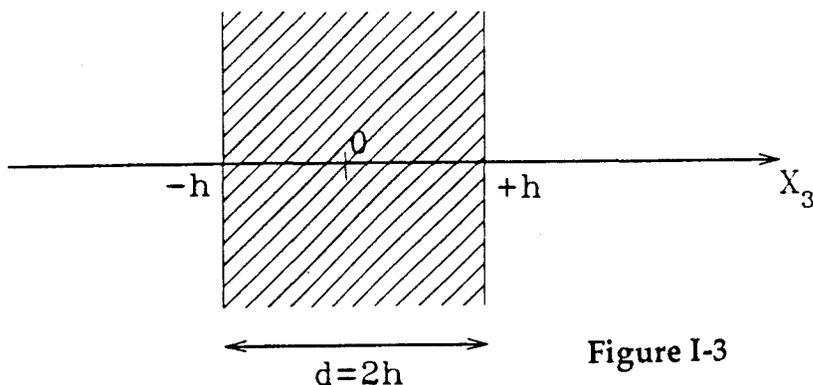
La résolution de l'équation (I.11) c'est-à-dire $\det [\overset{\leftrightarrow}{g}_S^{-1}(h, h)] = 0$ conduit à la

relation de dispersion bien connue de l'onde de Rayleigh.

Enfin, à l'aide de l'équation (I.6), on peut obtenir aussi l'expression complète de la fonction réponse du cristal semi-infini.

C - Lame mince d'un cristal hexagonal

Considérons maintenant une lame mince élastique d'un cristal hexagonal d'épaisseur $d = 2h$, tel que $-h \leq x_3 \leq h$ (Fig. I-3)



L'espace des interfaces M est formé maintenant des deux surfaces $x_3 = \pm h$. L'opérateur de clivage a la même expression que précédemment (éq. (I.54)) en remplaçant $\delta(x_3 - h)$ par $[\delta(x_3 - h) - \delta(h - x_3)]$. On peut calculer donc (voir Appendice A) de façon similaire le $g_s^{-1}(MM)$ correspondant.

Compte tenu de la forme des matrices que l'on obtient, il est convenable de traiter séparément les vibrations de polarisation transverse et celles de polarisation sagittale. Pour les premières, on trouve

$$\overset{\leftrightarrow-1}{g}_{s22}(M, M) = -\frac{\alpha_2 C_{44}}{\text{sh}(2\alpha_2 h)} \begin{pmatrix} \text{ch}(2\alpha_2 h) & -1 \\ -1 & \text{ch}(2\alpha_2 h) \end{pmatrix} \quad (\text{I.57})$$

Concernant la polarisation sagittale, on peut simplifier le calcul de $\overset{\leftrightarrow-1}{g}_s(MM)$ en utilisant le fait que le plan $x_3 = 0$ soit un plan miroir pour la lame mince. Ceci a pour conséquence de réduire la matrice 4×4 à deux matrices 2×2 , notées respectivement, $\overset{\leftrightarrow-1}{g}_{SS}(MM)$ dans la base symétrique

$$\left(\frac{|-h, x_1\rangle + |h, x_1\rangle}{\sqrt{2}} \right), \quad \left(\frac{|-h, x_3\rangle - |h, x_3\rangle}{\sqrt{2}} \right)$$

et $\overset{\leftrightarrow-1}{g}_{SAS}(MM)$ dans la base antisymétrique

$$\left(\frac{|-h, x_1\rangle - |h, x_1\rangle}{\sqrt{2}} \right), \quad \left(\frac{|-h, x_3\rangle + |h, x_3\rangle}{\sqrt{2}} \right).$$

Leurs expressions sont données par

$$\overset{\leftrightarrow-1}{g}_{SS}(MM) = \frac{1}{W_s} \begin{bmatrix} \frac{(\alpha_1 - \xi \alpha_3)}{k_{//}} \text{sh}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) & i \left[\xi \left(1 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1} \right) \text{Ch}(\alpha_3 h) \text{sh}(\alpha_1 h) \right. \\ & \left. - \left(1 + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3} \right) \text{Ch}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) \right] \\ -i \frac{C_{33}}{C_{44}} \left[\xi \left(\frac{\alpha_3 \xi_3}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \text{Ch}(\alpha_3 h) \text{sh}(\alpha_1 h) \right. & \frac{C_{33}}{C_{44}} \left(\frac{\alpha_3 - \xi \alpha_1}{k_{//}} \right) \text{Ch}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) \\ \left. - \left(\frac{\alpha_1 \xi_1}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \text{Ch}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) \right] & \end{bmatrix} \quad (\text{I.58})$$

$$\text{où } W_S = - \frac{1}{k_{//} C_{44}} (\text{Ch}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) - \xi \text{Ch}(\alpha_3 h) \text{sh}(\alpha_1 h)) \quad (\text{I.59})$$

et

$$\begin{aligned} \leftrightarrow^{-1} g_{SAS}^{(MM)} = \frac{1}{W_{AS}} & \left[\begin{array}{cc} \frac{(\alpha_1 - \xi \alpha_3)}{k_{//}} \text{Ch}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) & i \left[\xi \left(1 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1} \right) \text{sh}(\alpha_3 h) \text{Ch}(\alpha_1 h) \right. \\ & \left. - \left(1 + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3} \right) \text{sh}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) \right] \\ -i \frac{C_{33}}{C_{44}} \left[\xi \left(\frac{\alpha_3 \xi_3}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \text{sh}(\alpha_3 h) \text{Ch}(\alpha_1 h) & \frac{C_{33}}{C_{44}} \left(\frac{\alpha_3 - \xi \alpha_1}{k_{//}} \right) \text{sh}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) \right. \\ & \left. - \left(\frac{\alpha_1 \xi_1}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \text{sh}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) \right] \end{array} \right] \end{aligned} \quad (\text{I.60})$$

$$\text{où } W_{AS} = - \frac{1}{k_{//} C_{44}} (\text{sh}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) - \xi \text{sh}(\alpha_3 h) \text{Ch}(\alpha_1 h)). \quad (\text{I.61})$$

En revenant à la base de départ ($| -h, x_1 \rangle, | -h, x_3 \rangle, | h, x_1 \rangle, | h, x_3 \rangle$),

l'expression de $\leftrightarrow^{-1} g_S^{(MM)}$, correspondant à la lame mince hexagonale, s'obtient à

partir des équations (I.58) et (I.60) (voir Appendice A)

$$\leftrightarrow^{-1} g_S^{(MM)} = \begin{pmatrix} a & iq & d & if \\ -iq & b & if & e \\ d & -if & a & -iq \\ -if & e & iq & b \end{pmatrix} \quad (\text{I.62})$$

où

$$a = F C_{44} (\alpha_1 - \xi \alpha_3) (S_3 C_1 - \xi S_1 C_3), \quad (\text{I.63a})$$

$$b = F C_{33} (\alpha_3 - \xi \alpha_1) (S_1 C_3 - \xi S_3 C_1), \quad (\text{I.63b})$$

$$q = F k_{//} C_{44} \left\{ \xi \left(2 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1} + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3} \right) (C_1 C_3 - 1) - \left[1 + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3} + \xi^2 \left(1 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1} \right) \right] S_1 S_3 \right\}, \quad (I.63c)$$

$$d = -F C_{44} (\alpha_1 - \xi \alpha_3) (S_3 - \xi S_1), \quad (I.63d)$$

$$e = -F C_{33} (\alpha_3 - \xi \alpha_1) (S_1 - \xi S_3), \quad (I.63e)$$

$$f = -F \frac{C_{44}}{\xi_3} (\alpha_1 - \xi \alpha_3) (C_1 - C_3), \quad (I.63f)$$

avec

$$F = - \left[S_1 S_3 (1 + \xi^2) - 2 \xi (C_1 C_3 - 1) \right]^{-1}, \quad (I.63g)$$

$$S_i = \sinh (\alpha_i d) \quad i = 1,3 \quad (I.64)$$

et

$$C_i = \cosh (\alpha_i d) \quad i = 1,3 \quad (I.65)$$

A l'aide de l'équation (I.6), on peut obtenir aussi l'expression complète de la fonction réponse de la lame mince.

I - 4. CONCLUSION

En appliquant la théorie de réponse d'interface aux milieux élastiques à structure hexagonale, nous avons calculé les éléments de la fonction réponse d'un milieu semi-infini et ceux d'une lame mince.

Nous sommes alors en mesure d'aborder l'étude des systèmes composites lamellaires à structure hexagonale avec des interfaces (0001) en couplant entre eux plusieurs lames minces et/ou substrats. Nos résultats peuvent bien sûr s'appliquer aussi à des systèmes composites constitués de matériaux isotropes (éqs. (I.50) - (I.53)). Cependant une simple transposition indiquée ci-dessous nous permet aussi de considérer les matériaux lamellaires constitués de cristaux cubiques avec des interfaces (001) à condition que $\vec{k}_{//}$ soit dirigé suivant les directions [110] ou [100]. Cette transposition est possible car dans les cas considérés, aussi bien la matrice dynamique de volume que les conditions de passage aux interfaces ont exactement les mêmes formes. Ainsi lorsque $\vec{k}_{//}$ est

dirigé suivant [110], on peut associer à chaque milieu cubique un cristal hexagonal fictif avec des constantes élastiques notées \mathcal{C}_{ij} [13], telles que

$$\mathcal{C}_{11} = \frac{(C_{11} + C_{12} + 2 C_{44})}{2}, \mathcal{C}_{13} = C_{12}, \mathcal{C}_{33} = C_{11}, \mathcal{C}_{44} = C_{44}, \mathcal{C}_{66} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}, \quad (\text{I.66})$$

tandis que lorsque $\vec{k}_{//}$ est dirigé suivant [100], les \mathcal{C}_{ij} s'écrivent [13]

$$\mathcal{C}_{11} = C_{11}, \mathcal{C}_{13} = C_{12}, \mathcal{C}_{33} = C_{11}, \mathcal{C}_{44} = C_{44}, \mathcal{C}_{66} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} = C_{44}. \quad (\text{I.67})$$

Dans le chapitre suivant nous donnons une première application de ces calculs analytiques pour l'examen des états localisés et résonnants d'une couche isotrope adsorbée sur un substrat isotrope.

APPENDICE A

Dans cet appendice, nous présentons les détails de calcul des fonctions réponses (de Green) respectives, d'un cristal hexagonal infini ou semi-infini et d'une lame mince d'un cristal hexagonal.

A - 1 Fonction réponse de volume d'un cristal hexagonal

A partir de l'équation (I. 31), on peut obtenir les neuf équations à neuf inconnues suivantes:

$$\left[\rho\omega^2 - k_{//}^2 C_{11} + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} \right] G_{11} + i (C_{13} + C_{44}) k_{//} \frac{d}{dx_3} G_{31} = \delta(x_3 - x'_3), \quad (A.1)$$

$$\left[\rho\omega^2 - k_{//}^2 C_{11} + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} \right] G_{12} + i (C_{13} + C_{44}) k_{//} \frac{d}{dx_3} G_{32} = 0, \quad (A.2)$$

$$\left[\rho\omega^2 - k_{//}^2 C_{11} + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} \right] G_{13} + i (C_{13} + C_{44}) k_{//} \frac{d}{dx_3} G_{33} = 0, \quad (A.3)$$

$$\left[\rho\omega^2 - \frac{C_{11} - C_{12}}{2} k_{//}^2 + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} \right] G_{21} = 0, \quad (A.4)$$

$$\left[\rho\omega^2 - \frac{C_{11} - C_{12}}{2} k_{//}^2 + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} \right] G_{22} = \delta(x_3 - x'_3), \quad (A.5)$$

$$\left[\rho\omega^2 - \frac{C_{11} - C_{12}}{2} k_{//}^2 + C_{44} \frac{d^2}{dx_3^2} \right] G_{23} = 0, \quad (A.6)$$

$$\left[\rho\omega^2 - C_{44} k_{//}^2 + C_{33} \frac{d^2}{dx_3^2} \right] G_{31} + i k_{//} (C_{44} + C_{13}) \frac{d}{dx_3} G_{11} = 0, \quad (A.7)$$

$$\left[\rho\omega^2 - C_{44} k_{//}^2 + C_{33} \frac{d^2}{dx_3^2} \right] G_{32} + i k_{//} (C_{44} + C_{13}) \frac{d}{dx_3} G_{12} = 0, \quad (\text{A.8})$$

$$\left[\rho\omega^2 - C_{44} k_{//}^2 + C_{33} \frac{d^2}{dx_3^2} \right] G_{33} + i k_{//} (C_{44} + C_{13}) \frac{d}{dx_3} G_{13} = \delta(x_3 - x'_3). \quad (\text{A.9})$$

G_{21} et G_{23} satisfont aux équations homogènes découplées ((A.4) et (A.6)). G_{12} et G_{32} satisfont à une paire d'équations homogènes (éqs. (A.2) et (A.8)). Nous pouvons poser ces fonctions comme étant identiquement nulles. Il reste cinq équations pour cinq inconnues (éqs. (A.1), (A.3), (A.5), (A.7) et (A.9)).

i) Calcul de G_{22}

En posant $\alpha_2^2 = k_{//}^2 \left(\frac{C_{11} - C_{12}}{2 C_{44}} \right) - \rho \frac{\omega^2}{C_{44}}$, l'équation (A.5) s'écrit

$$\left(\frac{d^2}{dx_3^2} - \alpha_2^2 \right) G_{22} = \frac{1}{C_{44}} \delta(x_3 - x'_3). \quad (\text{A.10})$$

Equation dont la solution est:

$$G_{22}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = - \frac{1}{2 \alpha_2 C_{44}} e^{-\alpha_2 |x_3 - x'_3|}. \quad (\text{A.11})$$

ii) Calcul de G_{11} et G_{31}

G_{11} et G_{31} satisfont aux équations (A.1) et (A.7). En éliminant G_{31} entre ces deux équations, la nouvelle équation pour G_{11} s'écrit

$$\left(\frac{d^2}{dx_3^2} - \alpha_1^2 \right) \left(\frac{d^2}{dx_3^2} - \alpha_3^2 \right) G_{11} = \frac{1}{C_{44}} \left[\frac{d^2}{dx_3^2} + \frac{1}{C_{33}} (-C_{44} k_{//}^2 + \rho\omega^2) \right] \delta(x_3 - x'_3), \quad (\text{I.37})$$

où α_1^2 et α_3^2 sont définis respectivement par les équations (I.38) et (I.39).

Or on a :

$$\left(\frac{d^2}{dx_3^2} - \alpha^2\right) \frac{e^{-\alpha|x_3 - x'_3|}}{-2\alpha} = \delta(x_3 - x'_3).$$

Une solution particulière de l'équation (A.12) peut alors s'écrire alors sous la forme

$$G_{11} = A \frac{e^{-\alpha_1|x_3 - x'_3|}}{-2\alpha_1} + B \frac{e^{-\alpha_3|x_3 - x'_3|}}{-2\alpha_3}. \quad (\text{A.13})$$

En réinjectant cette solution dans l'équation (A.12), on obtient

$$\left\{ (A + B) \frac{d^2}{dx_3^2} - (A\alpha_3^2 + B\alpha_1^2) \right\} \delta(x_3 - x'_3) = \frac{1}{C_{44}} \left[\frac{d^2}{dx_3^2} + \left(\frac{\rho\omega^2 - C_{44}k_{//}^2}{C_{33}} \right) \right] \delta(x_3 - x'_3). \quad (\text{A.14})$$

En comparant les membres de l'équation (A.14), on obtient

$$A = -B = \frac{1}{C_{44}} \frac{[\alpha_1^2 + (\rho\omega^2 - C_{44}k_{//}^2)/C_{33}]}{\alpha_1^2 - \alpha_3^2}.$$

Par conséquent, l'équation (A.13) s'écrit

$$G_{11}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \frac{k_{//}(C_{44} + C_{13})}{2C_{44}(\alpha_1^2 - \alpha_3^2)C_{33}\xi_1} \left[-e^{-\alpha_1|x_3 - x'_3|} + \xi e^{-\alpha_3|x_3 - x'_3|} \right]$$

où ξ_1 , ξ_3 et $\xi = \frac{\xi_1}{\xi_3}$ sont définis respectivement à partir des équations (I.46) et (I.45).

Si on élimine Maintenant G_{11} entre les équations (A.1) et (A.7), la nouvelle équation pour G_{31} s'écrit

$$\left(\frac{d^2}{dx_3^2} - \alpha_1^2\right) \left(\frac{d^2}{dx_3^2} - \alpha_3^2\right) G_{31} = -\frac{i k_{//}}{C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}}\right) \frac{d}{dx_3} \delta(x_3 - x'_3). \quad (\text{A.16})$$

Or on a

$$\left(\frac{d^2}{dx_3^2} - \alpha^2\right) \left\{ \frac{1}{\alpha^2} \theta(x'_3 - x_3) + \frac{e^{-\alpha|x_3 - x'_3|}}{2\alpha^2} \operatorname{sgn}(x_3 - x'_3) \right\} = -\theta(x'_3 - x_3), \quad (\text{A.17})$$

où θ désigne la distribution de Heaviside, et

$$\operatorname{sgn}(x_3) = \begin{cases} 1 & \text{si } x_3 > 0 \\ -1 & \text{si } x_3 < 0 \end{cases}.$$

Une solution particulière de l'équation (A.16) s'écrit sous la forme

$$G_{31} = \frac{A}{\alpha_1} \left\{ \theta(x'_3 - x_3) + \frac{1}{2} e^{-\alpha_1|x_3 - x'_3|} \operatorname{sgn}(x_3 - x'_3) \right\} + \frac{B}{\alpha_3} \left\{ \theta(x'_3 - x_3) + \frac{1}{2} e^{-\alpha_3|x_3 - x'_3|} \operatorname{sgn}(x_3 - x'_3) \right\}. \quad (\text{A.18})$$

En réinjectant cette solution dans l'équation (A.17), on obtient

$$(A \alpha_3^2 + B \alpha_1^2) \theta(x'_3 - x_3) - (A + B) \frac{d^2}{dx_3^2} \theta(x'_3 - x_3) = -\frac{i k_{//}}{C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}}\right) \frac{d}{dx_3} \delta(x_3 - x'_3) \quad (\text{A.19})$$

En comparant les deux membres de l'équation (A.19), on obtient

$$A = -i \frac{\alpha_1^2 k_{//}}{(\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}}\right) \quad (\text{A. 20a})$$

$$B = i \frac{\alpha_3^2 k_{//}}{(\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}}\right). \quad (\text{A. 20b})$$

Par conséquent, l'équation (A.18) s'écrit

$$G_{31}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \frac{i k_{//} (C_{44} + C_{13})}{2 C_{33} C_{44} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \operatorname{sgn}(x_3 - x'_3) \left[-e^{-\alpha_1 |x_3 - x'_3|} + e^{-\alpha_3 |x_3 - x'_3|} \right], \quad (\text{A.21})$$

iii) Calcul de G_{33} et G_{13}

G_{33} et G_{13} satisfont aux équations (A.3) et (A.9). Le calcul de ces fonctions se fait exactement de la même façon que pour G_{11} et G_{31} . Après calculs il vient

$$G_{13}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \frac{i k_{//} (C_{44} + C_{13})}{2 C_{33} C_{44} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \operatorname{sgn}(x_3 - x'_3) \left[-e^{-\alpha_1 |x_3 - x'_3|} + e^{-\alpha_3 |x_3 - x'_3|} \right], \quad (\text{A. 22})$$

$$G_{33}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \frac{k_{//} (C_{44} + C_{13}) \xi_3}{2 C_{33} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{44}} \left[\xi e^{-\alpha_1 |x_3 - x'_3|} - e^{-\alpha_3 |x_3 - x'_3|} \right]. \quad (\text{A. 23})$$

A - 2 Fonction réponse d'un cristal hexagonal semi-infini

Le calcul de la fonction réponse dans l'espace des interfaces d'un cristal hexagonal semi-infini nécessite, en plus de la fonction réponse de volume \overleftrightarrow{G} , le calcul de l'opérateur réponse de surface \overleftrightarrow{A} (éqs. (I.7), (I.8)).

La transformée de Fourier $A_{\alpha\mu}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3)$ de l'opérateur réponse de surface $A_{\alpha\mu}(\vec{x}, \vec{x}')$ (éq. (I.28)) s'écrit

$$A_{\alpha\mu}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) = \sum_{\mu} V_{\alpha\mu}(k_{//} | x_3) G_{\mu\gamma}(k_{//}, \omega | x_3, x'_3) \quad (\text{A.23})$$

Les éléments de cet opérateur s'obtiennent à partir de ceux de l'opérateur de clivage (éq. (I.54)) et de ceux de la fonction de Green de volume donnés dans le paragraphe A.1

$$A_{22}(k_{//}, \omega | h, x'_3) = -\frac{1}{2} e^{-\alpha_2(x'_3 - h)}, \quad (\text{A.24})$$

$$A_{13}(k_{//}, \omega | h, x'_3) = \frac{i k_{//}}{2(\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{33}} \left\{ \left(\alpha_1 C_{13} - \frac{C_{44}}{\alpha_1} \delta_1^2 \right) e^{-\alpha_1(x'_3 - h)} - \left(\alpha_3 C_{13} - \frac{C_{44}}{\alpha_3} \delta_1^2 \right) e^{-\alpha_3(x'_3 - h)} \right\}, \quad (\text{A.25})$$

$$A_{11}(k_{//}, \omega | h, x'_3) = \frac{1}{2(\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \left\{ - \left[\alpha_1^2 + \delta_3^2 + \frac{(C_{44} + C_{13})}{C_{33}} k_{//}^2 \right] e^{-\alpha_1(x'_3 - h)} + \left[\alpha_3^2 + \delta_3^2 + \frac{(C_{44} + C_{13})}{C_{33}} k_{//}^2 \right] e^{-\alpha_3(x'_3 - h)} \right\}, \quad (\text{A.26})$$

$$A_{31}(k_{//}, \omega | h, x'_3) = \frac{i k_{//}}{2 C_{44}(\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \left\{ \left(\alpha_1 C_{44} - \frac{C_{13}}{\alpha_1} \delta_3^2 \right) e^{-\alpha_1(x'_3 - h)} - \left(\alpha_3 C_{44} - \frac{C_{13}}{\alpha_3} \delta_3^2 \right) e^{-\alpha_3(x'_3 - h)} \right\}, \quad (\text{A.27})$$

$$A_{33}(k_{//}, \omega | h, x'_3) = \frac{1}{2(\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \left\{ - \left[\alpha_1^2 + \delta_1^2 + \frac{C_{13}}{C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}} \right) k_{//}^2 \right] e^{-\alpha_1(x'_3 - h)} + \left[\alpha_3^2 + \delta_1^2 + \frac{C_{13}}{C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}} \right) k_{//}^2 \right] e^{-\alpha_3(x'_3 - h)} \right\}. \quad (\text{A.28})$$

δ_1^2 et δ_3^2 sont définis respectivement à partir des équations (I.42) et (I.43).

Passons maintenant au calcul des éléments de l'opérateur $\overleftrightarrow{\Delta}$ (MM) (éq. I.7),

$$\overleftrightarrow{\Delta} (MM) = \overleftrightarrow{I} (MM) + \overleftrightarrow{A} (MM) \text{ où } M \equiv \{h\}. \quad (\text{A.29})$$

A partir des équations (A.24) - (A.28), on obtient

$$\overleftrightarrow{\Delta} (MM) = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & \frac{i k_{//}}{2(\alpha_1 + \alpha_3) C_{33}} (C_{13} + \frac{C_{44}}{\alpha_1 \alpha_3} \delta_1^2) \\ 0 & 1/2 & 0 \\ \frac{i k_{//}}{2(\alpha_1 + \alpha_3) C_{44}} (C_{44} + \frac{C_{13}}{\alpha_1 \alpha_3} \delta_3^2) & 0 & 1/2 \end{bmatrix} \quad (\text{A.30})$$

L'inverse de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}_s (MM)$ à la surface du cristal hexagonal semi-infini, s'obtient à partir de l'équation (I.8)

$$\overleftrightarrow{g}_s^{-1} (MM) = \overleftrightarrow{\Delta} (MM) \overleftrightarrow{G}^{-1} (MM). \quad (\text{A.31})$$

A partir des éléments de la fonction réponse de volume donnés dans le paragraphe A-1, on obtient

$$\overleftrightarrow{G}^{-1} (MM) = \begin{bmatrix} \frac{2 C_{44} (\alpha_1 + \alpha_3) \alpha_1 \alpha_3}{\delta_3^2 - \alpha_1 \alpha_3} & 0 & 0 \\ 0 & -2 \alpha_2 C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2 C_{33} (\alpha_1 + \alpha_3) \alpha_1 \alpha_3}{\delta_1^2 - \alpha_1 \alpha_3} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.32})$$

Finalement, à partir des équations (A.30), (A.31) et (A.32), on aboutit à

$$\overleftrightarrow{g}_s^{-1}(h, h) = \begin{bmatrix} \frac{C_{44} C_{33} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2) \xi_1}{(C_{13} + C_{44}) k_{//} (1 - \xi)} & 0 & -i C_{44} \left[\frac{\alpha_1 - \alpha_3}{\xi_3 (1 - \xi)} - k_{//} \right] \\ 0 & -\alpha_2 C_{44} & 0 \\ i C_{44} \left[\frac{\alpha_1 - \alpha_3}{\xi_3 (1 - \xi)} - k_{//} \right] & 0 & -\frac{C_{44} C_{33} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2)}{(C_{13} + C_{44}) k_{//} \xi_3 (1 - \xi)} \end{bmatrix} \quad (A.33)$$

Si le cristal occupe le demi-espace $x_3 \leq h$, $\overleftrightarrow{g}_s^{-1}(h, h)$ a la même expression que (A.33), mais avec un changement de signe des termes non diagonaux qui couplent les composantes x_1 et x_3 .

A - 3 Fonction réponse d'une lame mince d'un cristal hexagonal

En suivant le même raisonnement que pour le cristal hexagonal semi-infini, les éléments de l'opérateur réponse de surface (éq. (A.23)) s'écrivent

$$A_{22}(k_{//}, \omega | \mp h, x'_3) = -\frac{1}{2} e^{-\alpha_2(x'_3 \pm h)}, \quad (A.34)$$

$$A_{13}(k_{//}, \omega | \mp h, x'_3) = \frac{i k_{//}}{2 (\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{33}} \left\{ \left(\alpha_1 C_{13} - \frac{C_{44}}{\alpha_1} \delta_1^2 \right) e^{-\alpha_1(x'_3 \pm h)} - \left(\alpha_3 C_{13} - \frac{C_{44}}{\alpha_3} \delta_1^2 \right) e^{-\alpha_3(x'_3 \pm h)} \right\}, \quad (A.35)$$

$$A_{11}(k_{//}, \omega | \mp h, x'_3) = \frac{1}{2 (\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \left\{ - \left[\alpha_1^2 + \delta_3^2 + \left(\frac{C_{44} + C_{13}}{C_{33}} \right) k_{//}^2 \right] e^{-\alpha_1(h \pm x'_3)} + \left[\alpha_3^2 + \delta_3^2 + \left(\frac{C_{44} + C_{13}}{C_{33}} \right) k_{//}^2 \right] e^{-\alpha_3(h \pm x'_3)} \right\}, \quad (A.36)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{31}(k_{//}, \omega | \mp h, x'_3) = & \frac{i k_{//}}{2 C_{44}(\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \left\{ \left(\alpha_1 C_{44} - \frac{C_{13}}{\alpha_1} \delta_3^2 \right) e^{-\alpha_1(h \pm x'_3)} \right. \\ & \left. - \left(\alpha_3 C_{44} - \frac{C_{13}}{\alpha_3} \delta_3^2 \right) e^{-\alpha_3(h \pm x'_3)} \right\}, \quad (\text{A.37}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta_{33}(k_{//}, \omega | \mp h, x'_3) = & \frac{1}{2(\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \left\{ - \left[\alpha_1^2 + \delta_1^2 + \frac{C_{13}}{C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}} \right) k_{//}^2 \right] e^{-\alpha_1(h \pm x'_3)} \right. \\ & \left. + \left[\alpha_3^2 + \delta_1^2 + \frac{C_{13}}{C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}} \right) k_{//}^2 \right] e^{-\alpha_3(h \pm x'_3)} \right\}. \quad (\text{A.38}) \end{aligned}$$

A partir des équations (A.34) - (A.38), on obtient les éléments de l'opérateur $\overleftrightarrow{\Delta}$ (MM) (éq. (A.29)) où $M \equiv \{-h, h\}$

$$\Delta_{11}(-h, -h) = \Delta_{11}(h, h) = \frac{1}{2}, \quad (\text{A.39 a})$$

$$\begin{aligned} \Delta_{11}(-h, h) = \Delta_{11}(h, -h) = & \frac{1}{2(\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \left\{ - \left[\alpha_1^2 + \delta_3^2 + \frac{C_{44} + C_{13}}{C_{33}} k_{//}^2 \right] e^{-2\alpha_1 h} \right. \\ & \left. + \left[\alpha_3^2 + \delta_3^2 + \frac{C_{44} + C_{13}}{C_{33}} k_{//}^2 \right] e^{-2\alpha_3 h} \right\}, \quad (\text{A.39 b}) \end{aligned}$$

$$\Delta_{22}(-h, -h) = \Delta_{22}(h, h) = \frac{1}{2}, \quad (\text{A.39 c})$$

$$\Delta_{22}(-h, h) = \Delta_{22}(h, -h) = -\frac{1}{2} e^{-2\alpha_2 h}, \quad (\text{A.39 d})$$

$$\Delta_{33}(-h, -h) = \Delta_{33}(h, h) = \frac{1}{2}, \quad (\text{A.39 e})$$

$$\begin{aligned} \Delta_{33}(-h, h) = \Delta_{33}(h, -h) = & \frac{1}{2(\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \left\{ - \left[\alpha_1^2 + \delta_1^2 + \frac{C_{13}}{C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}} \right) k_{//}^2 \right] e^{-2\alpha_1 h} \right. \\ & \left. + \left[\alpha_3^2 + \delta_1^2 + \frac{C_{13}}{C_{33}} \left(1 + \frac{C_{13}}{C_{44}} \right) k_{//}^2 \right] e^{-2\alpha_3 h} \right\}, \quad (\text{A.39 f}) \end{aligned}$$

$$\Delta_{13}(-h, -h) = -\Delta_{13}(h, h) = \frac{i k_{//}}{2(\alpha_1 + \alpha_3) C_{33}} \left(C_{13} + \frac{C_{44}}{\alpha_1 \alpha_3} \delta_1^2 \right), \quad (\text{A.39 g})$$

$$\Delta_{13}(-h, h) = -\Delta_{13}(h, -h) = \frac{i k_{//}}{2(\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{33}} \left\{ \left(\alpha_1 C_{13} - \frac{C_{44}}{\alpha_1} \delta_1^2 \right) e^{-2\alpha_1 h} - \left(\alpha_3 C_{13} - \frac{C_{44}}{\alpha_3} \delta_1^2 \right) e^{-2\alpha_3 h} \right\}, \quad (\text{A.39 h})$$

$$\Delta_{31}(-h, -h) = -\Delta_{31}(h, h) = \frac{i k_{//}}{2(\alpha_1 + \alpha_3) C_{44}} \left(C_{44} + \frac{C_{13}}{\alpha_1 \alpha_3} \delta_3^2 \right), \quad (\text{A.39 i})$$

$$\Delta_{31}(-h, h) = -\Delta_{31}(h, -h) = \frac{i k_{//}}{2 C_{44} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2)} \left\{ \left(\alpha_1 C_{44} - \frac{C_{13}}{\alpha_1} \delta_3^2 \right) e^{-2\alpha_1 h} - \left(\alpha_2 C_{44} - \frac{C_{13}}{\alpha_3} \delta_3^2 \right) e^{-2\alpha_3 h} \right\}. \quad (\text{A.39 j})$$

Compte tenu du découplage des modes transverses et sagittaux, on peut scinder les calculs en deux parties : une partie transverse et une partie sagittale.

A - 3 - 1 Partie transverse

L'inverse de la fonction réponse $\overset{\leftrightarrow}{g}_s$ (MM) dans l'espace des interfaces de la lame mince (éq. (I.8)) s'écrit

$$\overset{\leftrightarrow-1}{g}_{s22}(\text{MM}) = \overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{22}(\text{MM}) \overset{\leftrightarrow-1}{G}_{22}(\text{MM})$$

avec

$$\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{22}(\text{MM}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -e^{-2\alpha_2 h} \\ -e^{-2\alpha_2 h} & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{éqs. (A.39 c) et (A.39 d)})$$

et

$$\overset{\leftrightarrow}{G}_{22}(\text{MM}) = -\frac{1}{2\alpha_2 C_{44}} \begin{pmatrix} 1 & e^{-2\alpha_2 h} \\ e^{-2\alpha_2 h} & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{éq. (A.11)})$$

d'où

$$\overset{\leftrightarrow}{g}_{s22}(M, M) = -\frac{\alpha_2 C_{44}}{\text{sh}(2\alpha_2 h)} \begin{pmatrix} \text{ch}(2\alpha_2 h) & -1 \\ -1 & \text{ch}(2\alpha_2 h) \end{pmatrix} \quad (\text{A.40})$$

A - 3 - 2 Partie sagittale

Compte tenu de la symétrie de réflexion par rapport au plan miroir $x_3 = 0$, nous allons effectuer un changement de base et réécrire la matrice $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}(MM)$ dans les coordonnées symétriques et antisymétriques. Ceci aura pour conséquence principale de réduire la matrice 4×4 à deux matrices 2×2 , notées respectivement $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{sS}(MM)$ dans la base symétrique

$$\frac{(|-h, x_1\rangle + |h, x_1\rangle)}{\sqrt{2}}, \quad \frac{(|-h, x_3\rangle - |h, x_3\rangle)}{\sqrt{2}},$$

et $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_{sAS}(MM)$ dans la base antisymétrique

$$\frac{(|-h, x_1\rangle - |h, x_1\rangle)}{\sqrt{2}}, \quad \frac{(|-h, x_3\rangle + |h, x_3\rangle)}{\sqrt{2}}.$$

Dans la base symétrique, on a:

$$\Delta_{s11} = \frac{1}{2} \{ \Delta_{11}(-h, -h) + \Delta_{11}(-h, h) + \Delta_{11}(h, -h) + \Delta_{11}(h, h) \}, \quad (\text{A.41 a})$$

$$\Delta_{s12} = \frac{1}{2} \{ \Delta_{13}(-h, -h) - \Delta_{13}(-h, h) + \Delta_{13}(h, -h) - \Delta_{13}(h, h) \}, \quad (\text{A.41 b})$$

$$\Delta_{s21} = \frac{1}{2} \{ \Delta_{31}(-h, -h) + \Delta_{31}(-h, h) - \Delta_{31}(h, -h) - \Delta_{31}(h, h) \}, \quad (\text{A.41 c})$$

$$\Delta_{s22} = \frac{1}{2} \{ \Delta_{33}(-h, -h) - \Delta_{33}(-h, h) - \Delta_{33}(h, -h) + \Delta_{33}(h, h) \}. \quad (\text{A.41 d})$$

A partir des équations (A.39), $\overset{\leftrightarrow}{\Delta}_s(MM)$ peut s'écrire matriciellement sous la forme

$$\overleftrightarrow{\Delta}_s (MM) = \frac{(C_{44} + C_{33}) k_{//}^2}{2(\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{33}} \begin{bmatrix} (1 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1}) \beta_1^- & i \{ (\frac{\alpha_1}{k_{//}} + \xi_1) \beta_1^- \\ - (1 + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3}) \beta_3^- & - (\frac{\alpha_3}{k_{//}} + \xi_3) \beta_3^- \} \\ i \frac{C_{33}}{C_{44}} \{ \frac{1}{\xi_1} (\frac{\alpha_1 \xi_1}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}}) \beta_1^+ & - \frac{C_{33}}{C_{44}} \{ (\frac{\alpha_1 \xi_1}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}}) \beta_1^+ \\ - \frac{1}{\xi_3} (\frac{\alpha_3 \xi_3}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}}) \beta_3^+ \} & - (\frac{\alpha_3 \xi_3}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}}) \beta_3^+ \} \end{bmatrix} \quad (A.42)$$

avec $\beta_1^\pm = (1 \pm e^{-2\alpha_1 h})$, $\beta_3^\pm = (1 \pm e^{-2\alpha_3 h})$.

De la même manière on trouve pour l'inverse de la fonction de Green de volume $G_s (MM)$ dans la base symétrique

$$\overleftrightarrow{G}_s^{-1} (MM) = \frac{2 C_{44} C_{33} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2) \xi}{(C_{44} + C_{13}) k_{//} (1 - \xi) D_s} \begin{bmatrix} \xi_3 (\beta_3^- - \xi \beta_1^-) & i (\beta_3^+ - \beta_1^+) \\ i (\beta_3^- - \beta_1^-) & \frac{\beta_1^+ - \xi \beta_3^+}{\xi_1} \end{bmatrix} \quad (A.43)$$

où $D_s = \beta_1^+ \beta_3^- - \xi \beta_3^+ \beta_1^-$.

Finalement, l'inverse de la fonction réponse de la lame mince dans la base symétrique, s'obtient à partir de l'équation (I.8)

$$\overleftrightarrow{g}_s^{-1}(MM) = \overleftrightarrow{\Delta}_s (MM) \overleftrightarrow{G}_s^{-1} (MM)$$

soit

$$\xi_{SS}^{-1}(\text{MM}) = \frac{1}{W_s} \begin{bmatrix} \frac{(\alpha_1 - \xi \alpha_3)}{k_{//}} \text{sh}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) & i \left[\xi \left(1 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1} \right) \text{Ch}(\alpha_3 h) \text{sh}(\alpha_1 h) \right. \\ & \left. - \left(1 + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3} \right) \text{Ch}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) \right] \\ -i \frac{C_{33}}{C_{44}} \left[\xi \left(\frac{\alpha_3 \xi_3}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \text{Ch}(\alpha_3 h) \text{sh}(\alpha_1 h) \right. & \frac{C_{33}}{C_{44}} \left(\frac{\alpha_3 - \xi \alpha_1}{k_{//}} \right) \text{Ch}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) \\ \left. - \left(\frac{\alpha_1 \xi_1}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \text{Ch}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) \right] & \end{bmatrix} \quad (\text{A.44})$$

$$\text{où } W_s = - \frac{1}{k_{//} C_{44}} \left(\text{Ch}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) - \xi \text{Ch}(\alpha_3 h) \text{sh}(\alpha_1 h) \right).$$

Dans la base antisymétrique, on a

$$\Delta_{AS11} = \frac{1}{2} \{ \Delta_{11}(-h, -h) - \Delta_{11}(-h, h) - \Delta_{11}(h, -h) + \Delta_{11}(h, h) \}, \quad (\text{A.45 a})$$

$$\Delta_{AS12} = \frac{1}{2} \{ \Delta_{13}(-h, -h) + \Delta_{13}(-h, h) - \Delta_{13}(h, -h) - \Delta_{13}(h, h) \}, \quad (\text{A.45 b})$$

$$\Delta_{AS21} = \frac{1}{2} \{ \Delta_{31}(-h, -h) - \Delta_{31}(-h, h) + \Delta_{31}(h, -h) - \Delta_{31}(h, h) \}, \quad (\text{A.45 c})$$

$$\Delta_{AS22} = \frac{1}{2} \{ \Delta_{33}(-h, -h) + \Delta_{33}(-h, h) + \Delta_{33}(h, -h) + \Delta_{33}(h, h) \}. \quad (\text{A.45 d})$$

A partir des équations (A.39), $\overleftrightarrow{\Delta}_{AS}(\text{MM})$ peut s'écrire matriciellement sous la forme

$$\overleftrightarrow{\Delta}_{AS}(\text{MM}) = \frac{(C_{44} + C_{33}) k_{//}^2}{2(\alpha_1^2 - \alpha_3^2) C_{33}} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1} \right) \beta_1^+ & i \left[\left(\frac{\alpha_1}{k_{//}} + \xi_1 \right) \beta_1^+ \right. \\ \left. - \left(1 + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3} \right) \beta_3^+ & \left. - \left(\frac{\alpha_3}{k_{//}} + \xi_3 \right) \beta_3^+ \right] \\ i \frac{C_{33}}{C_{44}} \left[\left(\frac{\alpha_1}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33} \xi_1} \right) \beta_1^- & - \frac{C_{13}}{C_{33}} \left[\left(\frac{\alpha_1 \xi_1}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \beta_1^- \right. \right. \\ \left. \left. - \left(\frac{\alpha_2}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33} \xi_3} \right) \beta_3^- \right] & \left. - \left(\frac{\alpha_3 \xi_3}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \beta_3^- \right] \end{bmatrix} \quad (\text{A.46})$$

De la même manière on trouve pour l'inverse de la fonction de Green de volume $\overleftrightarrow{G}_{AS}$ (MM) dans la base antisymétrique

$$\overleftrightarrow{G}_{AS}^{-1} \text{ (MM)} = \frac{2 C_{44} C_{33} (\alpha_1^2 - \alpha_3^2) \xi}{(C_{44} + C_{13}) k_{//} (1 - \xi) D_{AS}} \begin{bmatrix} \xi_3 (\beta_3^+ - \xi \beta_1^+) & i (\beta_3^- - \beta_1^-) \\ i (\beta_3^+ - \beta_1^+) & \frac{\beta_1^- - \xi \beta_3^-}{\xi_1} \end{bmatrix} \quad (\text{A.47})$$

où $D_{AS} = \beta_1^- \beta_3^+ - \xi \beta_3^- \beta_1^+$.

On remarque que $\overleftrightarrow{\Delta}_{AS}$ (MM) et $\overleftrightarrow{G}_{AS}^{-1}$ (MM) s'obtiennent respectivement à partir de $\overleftrightarrow{\Delta}_S$ (MM) et $\overleftrightarrow{G}_S^{-1}$ (MM), en intervertissant les termes β_i^- et β_i^+ ($i = 1, 3$).

Finalement, l'inverse de la fonction réponse de la lame mince dans la base antisymétrique, s'obtient à partir de l'équation (I.8)

$$\overleftrightarrow{g}_{sAS}^{-1} \text{ (MM)} = \overleftrightarrow{\Delta}_{AS} \text{ (MM)} \overleftrightarrow{G}_{AS}^{-1} \text{ (MM)}$$

soit

$$\overleftrightarrow{g}_{sAS}^{-1} \text{ (MM)} = \frac{1}{W_{AS}} \begin{bmatrix} \frac{(\alpha_1 - \xi \alpha_3)}{k_{//}} \text{Ch}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) & i \left[\xi \left(1 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1} \right) \text{sh}(\alpha_3 h) \text{Ch}(\alpha_1 h) \right. \\ & \left. - \left(1 + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3} \right) \text{sh}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) \right] \\ -i \frac{C_{33}}{C_{44}} \left[\xi \left(\frac{\alpha_3 \xi_3}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \text{sh}(\alpha_3 h) \text{Ch}(\alpha_1 h) & \frac{C_{33}}{C_{44}} \left(\frac{\alpha_3 - \xi \alpha_1}{k_{//}} \right) \text{sh}(\alpha_1 h) \text{sh}(\alpha_3 h) \right. \\ & \left. - \left(\frac{\alpha_1 \xi_1}{k_{//}} - \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \text{sh}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) \right] \end{bmatrix} \quad (\text{A.48})$$

où $W_{AS} = - \frac{1}{k_{//} C_{44}} (\text{sh}(\alpha_1 h) \text{Ch}(\alpha_3 h) - \xi \text{sh}(\alpha_3 h) \text{Ch}(\alpha_1 h))$.

En revenant à la base de départ ($| -h, x_1 \rangle, | -h, x_3 \rangle, | h, x_1 \rangle, | h, x_3 \rangle$), les éléments de l'inverse de la fonction de Green de la lame mince $\overset{\leftrightarrow}{g}_s$ (MM) s'obtiennent à partir des équations

$$g_{s11}^{-1}(-h, -h) = g_{s11}^{-1}(h, h) = \frac{1}{2} (g_{sS11}^{-1} + g_{sAS11}^{-1}), \quad (\text{A.49 a})$$

$$g_{s11}^{-1}(-h, h) = g_{s11}^{-1}(h, -h) = \frac{1}{2} (g_{sS11}^{-1} - g_{sAS11}^{-1}), \quad (\text{A.49 b})$$

$$g_{s13}^{-1}(-h, -h) = -g_{s13}^{-1}(h, -h) = \frac{1}{2} (g_{sS12}^{-1} + g_{sAS12}^{-1}), \quad (\text{A.49 c})$$

$$g_{s13}^{-1}(-h, h) = -g_{s13}^{-1}(h, h) = -\frac{1}{2} (g_{sS12}^{-1} - g_{sAS12}^{-1}), \quad (\text{A.49 d})$$

$$g_{s31}^{-1}(-h, -h) = -g_{s31}^{-1}(h, h) = \frac{1}{2} (g_{sS21}^{-1} + g_{sAS21}^{-1}), \quad (\text{A.49 e})$$

$$g_{s31}^{-1}(-h, h) = -g_{s31}^{-1}(h, -h) = \frac{1}{2} (g_{sS21}^{-1} - g_{sAS21}^{-1}), \quad (\text{A.49 f})$$

$$g_{s33}^{-1}(-h, -h) = g_{s33}^{-1}(h, h) = \frac{1}{2} (g_{sS22}^{-1} + g_{sAS22}^{-1}), \quad (\text{A.49 g})$$

$$g_{s33}^{-1}(-h, h) = g_{s33}^{-1}(h, -h) = -\frac{1}{2} (g_{sS22}^{-1} - g_{sAS22}^{-1}). \quad (\text{A.49 h})$$

A partir des équations (A.44) et (A.48), $\overset{\leftrightarrow}{g}_s^{-1}$ (MM) peut s'écrire sous forme

matricielle:

$$\overset{\leftrightarrow}{g}_s^{-1}(\text{MM}) = \begin{pmatrix} a & iq & d & if \\ -iq & b & if & e \\ d & -if & a & -iq \\ -if & e & iq & b \end{pmatrix} \quad (\text{A.50})$$

où

$$a = F C_{44} (\alpha_1 - \xi \alpha_3) (S_3 C_1 - \xi S_1 C_3), \quad (\text{A.51a})$$

$$b = F C_{33} (\alpha_3 - \xi \alpha_1) (S_1 C_3 - \xi S_3 C_1), \quad (\text{A.51b})$$

$$q = F k_{//} C_{44} \left\{ \xi \left(2 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1} + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3} \right) (C_1 C_3 - 1) - \left[1 + \frac{\alpha_3}{k_{//} \xi_3} + \xi^2 \left(1 + \frac{\alpha_1}{k_{//} \xi_1} \right) \right] S_1 S_3 \right\}, \quad (\text{A.51c})$$

$$d = -F C_{44} (\alpha_1 - \xi \alpha_3) (S_3 - \xi S_1), \quad (\text{A.51d})$$

$$e = -F C_{33} (\alpha_3 - \xi \alpha_1) (S_1 - \xi S_3), \quad (\text{A.51e})$$

$$f = -F \frac{C_{44}}{\xi_3} (\alpha_1 - \xi \alpha_3) (C_1 - C_3), \quad (\text{A.51f})$$

avec

$$F = - \left[S_1 S_3 (1 + \xi^2) - 2 \xi (C_1 C_3 - 1) \right]^{-1}, \quad (\text{A.51g})$$

$$S_i = \sinh (\alpha_i d), \quad i = 1,3 \quad (\text{A.52})$$

et

$$C_i = \cosh (\alpha_i d). \quad i = 1,3 \quad (\text{A.53})$$

Bibliographie du chapitre I

1. F.Garcia-Moliner and J.Rubio, J.Phys. C 2, 1789 (1969); Proc. R. Soc. London . Ser.A 234, 257 (1971)
2. J.E. Inglesfield, J.Phys. C 4, L14 (1971)
3. A. A. Maradudin and D.L. Mills Ann. Phys. 100, 262 (1976)
4. B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 14, 2296 (1976)
B. Djafari-Rouhani, Thèse d'état, Orsay, (1978)
5. M. G. Cottam and A. A. Maradudin Surface Excitations (Moderne Problems in Condensed Matter Sciences 9), Amsterdam : North-Holland 1986.
6. L. Dobrzynski Surf. Sci. Rept. 11, 139 (1990) ; Surf. Sci 180, 489 (1987)
L. Dobrzynski, J. Mendiadua, A. Rodriguez, S. Bolibo and M. More J. Phys. France 50, 2563 (1989)
7. L. Dobrzynski Surf. Sci. Rept. 6, 119 (1986) ; surf. Sci 182, 362 (1987)
8. K. Portz, Ph. D. Thesis University of California, Irvine (1979)
9. B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, Surf. Sci. 61, 521 (1976)
10. L. Dobrzynski and A. A. Maradudin Phys. Rev. 14, 2200 (1976) ; B 15, 2432 (1977)
11. R. E. Camely, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B 27, 7318 (1983)
12. E. Dieulesaint and D. Royer, Ondes élastiques dans les solides ; application au traitement du signal (Masson, Paris, 1974)
13. A. Nougaooui and B. Djafari-Rouhani Surf. Sci. 185, 125 (1987) ; 185, 154 (1987)
199, 638 (1988) ; J. Electron Spectroscopy and related Phenomena 45, 197 (1987).

Chapitre II

CHAPITRE II

LES ONDES LOCALISEES ET RESONNANTES DANS UNE COUCHE ADSORBEE SUR UN SUBSTRAT.

II - 1. INTRODUCTION

Les modes vibrationnels d'une couche isotrope adsorbée sur un substrat isotrope comprennent les ondes de Love [1] et de Sezawa [2]. Ces modes [3] sont respectivement de polarisation transverse et sagittale, c'est à dire une polarisation perpendiculaire ou parallèle au plan sagittal défini par la normale à la surface et le vecteur d'onde $\vec{k}_{//}$ parallèle à la surface.

Ces ondes sont localisées dans la couche adsorbée lorsque leur vitesse C est située au-dessous de la vitesse C_{t2} du son transverse dans le substrat; lorsque C dépasse C_{t2} l'onde devient résonnante (leaky wave) avec les modes de volume du substrat. Ces ondes ont été étudiées depuis longtemps, mais plus spécialement lorsque C reste au-dessous ou légèrement au-dessus de C_{t2} . Cependant c'est seulement récemment qu'il a été montré qu'il est possible d'avoir des résonances intenses dans le domaine de la vitesse longitudinale C_{l2} du son dans le substrat: il s'agit alors d'ondes quasi-longitudinales, guidées dans la couche adsorbée. Ce type d'onde a d'abord été observé par diffusion Brillouin dans les films de ZnSe sur GaAs [4] et dans un film de polymère de Blodgett Langmuir sur Molybdène [5]. Ces résultats expérimentaux se sont trouvés en accord avec ceux de la théorie de la diffusion Brillouin dans ces échantillons [6]. De telles ondes résonnantes longitudinales sont aussi observées par diffusion inélastique d'atomes d'hélium sur une couche de quelques plans atomiques de Na déposée sur Cu (001) ; leurs fréquences ont été interprétées avec un modèle simple d'une couche de Na adsorbée sur un substrat rigide [7].

Cependant la densité d'états vibrationnelle totale correspondant à l'adsorption d'une couche sur un substrat n'avait été étudiée auparavant [8] que

pour un modèle atomique simple où il n'y a pas de couplage entre les ondes transverses et longitudinales. L'objet de ce chapitre est d'établir d'abord une expression générale de la densité d'états de la couche adsorbée [9] qui sera ensuite utilisée dans le cadre de la théorie de l'élasticité. Ceci permettra d'illustrer et de discuter le comportement des modes localisés et résonnants associés à la présence de la couche adsorbée, notamment les ondes guidées à caractère quasi-longitudinal. Le paragraphe II-2 décrit l'obtention de l'expression générale de la densité d'état et le paragraphe II-3 son application aux ondes élastiques. Des applications aux cas d'une couche d'Al sur un substrat de W et vice versa, ainsi qu'à une couche de ZnSe sur GaAs sont présentées au paragraphe II-4.

II - 2 . DENSITE D'ETATS D'UNE LAME MINCE ADSORBEE SUR UN SUBSTRAT

Considérons une lame mince d'un matériau $i = 1$, adsorbée sur un substrat semi-infini d'un matériau différent $i = 2$ (Fig.II-1a). Les propriétés vibrationnelles d'un tel système peuvent être décrites soit par des matrices dans l'approche de dynamique de réseau, soit par des équations différentielles dans la théorie de l'élasticité (par simplicité la figure II-1 est dessinée pour ce dernier cas). Dans les deux cas on peut associer à ce système une fonction de Green $g(\omega)$ (où ω est la fréquence) qui peut être construite à partir de deux parties déconnectées : la fonction de Green $\overset{\leftrightarrow}{g}_{L1}(\omega^2)$ d'une couche libre d'un matériau 1 et la fonction de Green $\overset{\leftrightarrow}{g}_{S2}(\omega^2)$ du substrat semi-infini du matériau 2 (voir Fig. II-1b). Elle peut être obtenue de la même façon que dans les équations (I.5, I.6, et I.7), soit :

$$\overset{\leftrightarrow}{g}(DD) = \overset{\leftrightarrow}{g}_s(DD) - \overset{\leftrightarrow}{g}_s(DM) \overset{\leftrightarrow}{\Delta}^{-1} (MM) \overset{\leftrightarrow}{A} (MD) \quad (II. 1)$$

où $\overset{\leftrightarrow}{g}_s$ se réfère aux matériaux avec surfaces libres (éq.(I.6)) qui constituent le matériau composite (lame mince libre, substrat) (voir Fig. II-1b).

D représente l'espace total du système et M l'espace d'interface. Dans le modèle élastique, M est limité tout simplement au plan $x_3 = 2h$ (voir Fig. II-1) où on couple la lame mince libre et le substrat.

$$\overset{\leftrightarrow}{\Delta} (MM) = \overset{\leftrightarrow}{I} (MM) + \overset{\leftrightarrow}{A} (MM)$$

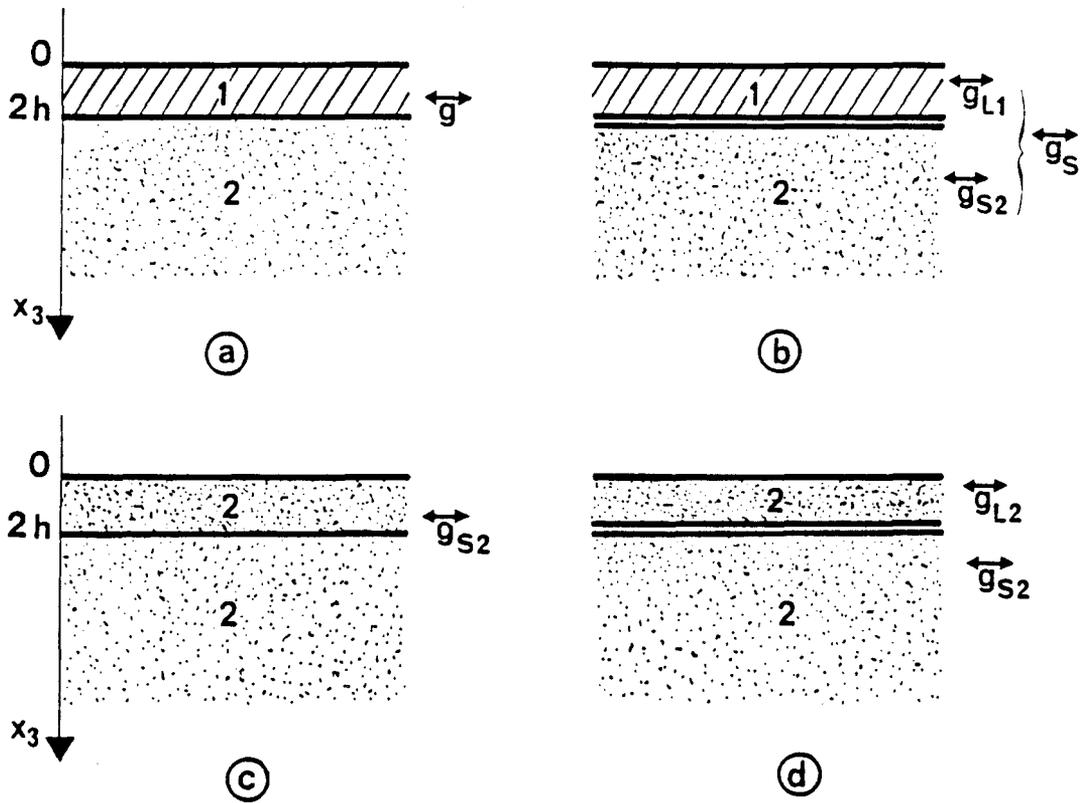


Figure II-1 La couche adsorbée (a) et le système de référence à partir duquel elle est construite (b); les fonctions de Green correspondantes sont données sur le côté droit de ces figures. (c) représente le substrat semi-infini et (d) le système de référence comme utilisés dans la démonstration de l'éq.(II.9).

\overleftrightarrow{I} (MM) est la matrice identité et \overleftrightarrow{A} (MM) est l'opérateur réponse d'interface défini comme dans l' éq. (I.4), en remplaçant l'opérateur de clivage $\overleftrightarrow{V}_{si}$ par un opérateur de couplage \overleftrightarrow{V}_I permettant de coupler entre eux le substrat et la lame mince. A partir de l'équation (II. 1) On peut déduire :

$$\overleftrightarrow{\Delta}^{-1} (MM) \overleftrightarrow{A} (MD) = \overleftrightarrow{g}_s^{-1} (MM) [\overleftrightarrow{g}_s (MD) - \overleftrightarrow{g} (MD)]. \quad (II. 2)$$

En réinjectant cette expression dans l'équation (II. 1) on obtient ^[10]

$$\overleftrightarrow{g} (DD) = \overleftrightarrow{g}_s (DD) - \overleftrightarrow{g}_s (DM) \overleftrightarrow{g}_s^{-1} (MM) \overleftrightarrow{g}_s (MD) + \overleftrightarrow{g} (DM) \overleftrightarrow{g}^{-1} (MM) \overleftrightarrow{g} (MD). \quad (II. 3)$$

La densité d'états totale $n(\omega)$ pour la couche adsorbée peut être obtenue à partir de la trace de la partie imaginaire de $g(\omega)$. Elle peut être reliée à la densité d'états $n_s(\omega)$ du système de référence (i.e. le substrat et la lame libre pris indépendamment (Fig. II-1b)) par :

$$n(\omega) - n_s(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im tr} [g^+(\omega) - g_s^+(\omega)] \quad (II. 4)$$

qu'on peut écrire, d'après l'équation (II.3) :

$$n(\omega) - n_s(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im tr} [\overleftrightarrow{g} (DM) \overleftrightarrow{g}^{-1} (MM) \overleftrightarrow{g} (MD) - \overleftrightarrow{g}_s (DM) \overleftrightarrow{g}_s^{-1} (MM) \overleftrightarrow{g}_s (MD)] \quad (II. 5)$$

En utilisant l'invariance cyclique de la trace, on obtient :

$$n(\omega) - n_s(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im tr} [\overleftrightarrow{g}^{-1} (MM) \overleftrightarrow{g} (MD) \overleftrightarrow{g} (DM) - \overleftrightarrow{g}_s^{-1} (MM) \overleftrightarrow{g}_s (MD) \overleftrightarrow{g}_s (DM)] \quad (II. 6)$$

Or, comme \overleftrightarrow{g} et \overleftrightarrow{g}_s sont des matrices complètes, on peut écrire :

$$\frac{d\overleftrightarrow{g} (MM)}{d\omega} = -\overleftrightarrow{g} (MD) \overleftrightarrow{g} (DM) \quad (II. 7)$$

et l'équation (II. 6) devient :

$$n(\omega) - n_s(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im tr} \left[\overset{\leftrightarrow}{g}^{-1}(\text{MM}) \frac{d \overset{\leftrightarrow}{g}(\text{MM})}{d\omega} - \overset{\leftrightarrow}{g}_s^{-1}(\text{MM}) \frac{d \overset{\leftrightarrow}{g}_s(\text{MM})}{d\omega} \right]. \quad (\text{II. 8})$$

De plus, pour n'importe quel matrice $\overset{\leftrightarrow}{B}$, on a

$$\text{tr} \overset{\leftrightarrow}{B}^{-1} \frac{d \overset{\leftrightarrow}{B}}{d\omega} = \frac{d}{d\omega} [\ln(\det \overset{\leftrightarrow}{B})],$$

Ceci nous permet d'écrire l'équation (II. 8) sous la forme^[10]

$$n(\omega) - n_s(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{d}{d\omega} \left[\ln \det \left(\frac{\overset{\leftrightarrow}{g}(\text{MM})}{\overset{\leftrightarrow}{g}_s(\text{MM})} \right) \right]. \quad (\text{II. 9})$$

Ainsi pour calculer la différence entre la densité de la couche adsorbée et le système de référence (i.e une couche libre d'un matériau 1 et le substrat semi-infini d'un matériau 2), nous avons besoin de connaître les fonctions de Green d'interface $\overset{\leftrightarrow}{g}$, $\overset{\leftrightarrow}{g}_{L1}$ et $\overset{\leftrightarrow}{g}_{s2}$ où $\overset{\leftrightarrow}{g}$ est la fonction de Green à l'interface substrat-couche adsorbée (voir Fig. II-1a).

Nous pouvons aussi considérer la différence entre les densités d'états d'une couche adsorbée (Fig. II-1a) et le substrat seul (Fig. II-1b), on obtient alors :

$$\Delta n(\omega) = n_a(\omega) - n_b(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{d}{d\omega} \ln \det \left[\frac{\overset{\leftrightarrow}{g}(2h, 2h)}{\overset{\leftrightarrow}{g}_{L1}(2h, 2h) \overset{\leftrightarrow}{g}_{s2}(0,0)} \right]. \quad (\text{II. 10})$$

Dans ce cas nous avons à soustraire dans le calcul numérique la densité d'états de la couche libre, qui ne contient que des pics deltas situés aux fréquences propres $\omega^2(k_{//})$ d'une couche libre, pour chaque valeur de $k_{//}$.

L'inconvénient dans cette dernière procédure est qu'on compare deux systèmes n'ayant pas le même nombre de degrés de liberté (voir Figs. II-1a et

II-1b). Il serait alors intéressant de comparer la densité d'états de la couche adsorbée (Fig. II-1a) avec celle d'un substrat semi-infini ayant la surface libre située à $x_3 = 0$ plutôt qu'à $x_3 = 2h$ (Fig. II-1c). Cette différence peut être obtenue en utilisant deux fois l'équation (II. 9), à savoir une première fois pour obtenir la variation de densité d'états entre les systèmes représentés dans les figures II-1a et II-1b (éq. (II.10)) et une seconde fois pour la comparaison des systèmes représentés dans les figures II-1c et II-1d. Nous obtenons alors :

$$\Delta n(\omega) = n_a(\omega) - n_c(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{d}{d\omega} \ln \det \left[\frac{\overleftrightarrow{g}(2h, 2h) \overleftrightarrow{g}_{L2}(2h, 2h)}{\overleftrightarrow{g}_{L1}(2h, 2h) \overleftrightarrow{g}_{s2}(2h, 2h)} \right]$$

+ densité d'états de la lame L1 - densité d'états de la lame L2. (II. 11)

où L1 et L2 se réfèrent à des couches d'épaisseur $2h$ formées respectivement des matériaux 1 et 2.

Avec une petite modification des notations pour décrire l'espace d'interface, cette relation reste également valable pour les modèles de dynamique de réseau. Notons que les densités d'états des couches L1 et L2 contiennent seulement des pics δ situés aux fréquences propres $\omega(k_{//})$ des couches L1 et L2 avec surfaces libres.

Dans le paragraphe suivant, nous appliquons ces résultats généraux à un modèle élastique pour lequel les éléments de la fonction de Green qui apparaissent dans l'équation (II.11), peuvent être obtenus sous une forme compacte.

II - 3 . MODELE ELASTIQUE DE LA COUCHE ADSORBEE

Nous choisissons maintenant des milieux élastiques isotropes pour décrire les matériaux formant la couche adsorbée et le substrat. Chaque milieu est caractérisé par sa densité ρ et ses constantes élastiques C_{11} et C_{44} . Les vitesses longitudinales et transverses dans ces milieux sont données respectivement par

$$C_{\ell}^2 = \frac{C_{11}}{\rho}, \quad (\text{II.12})$$

et

$$C_t^2 = \frac{C_{44}}{\rho}. \quad (\text{II.13})$$

Un tel matériau est aussi isotrope dans le plan (x_1, x_2) . Ceci nous permet, pour une valeur donnée du vecteur de propagation $\vec{k}_{//}$, de découpler les vibrations transverses de celles polarisées dans le plan sagittal. Les fonctions de Green correspondantes ont déjà été obtenues sous une forme compacte pour un solide semi-infini [11], pour une couche isolée [12,13], ainsi que pour la composante transverse d'une couche adsorbée [13].

La fonction de Green d'une couche adsorbée correspondant aux modes polarisés dans le plan sagittal, n'a pas été calculée jusqu'à présent. Cependant dans le calcul de densité d'états, nous avons besoin seulement de sa partie tronquée dans l'espace d'interface i.e. $\overleftrightarrow{g}(2h, 2h)$. Or celle-ci peut être obtenue facilement à partir de la relation (I. 10c), soit :

$$[\overleftrightarrow{g}(2h, 2h)]^{-1} = [\overleftrightarrow{g}_{L1}(2h, 2h)]^{-1} + [\overleftrightarrow{g}_{s2}(0, 0)]^{-1}. \quad (\text{II.14})$$

En utilisant les éléments de la fonction de Green donnés dans les références [11 - 13], et qui ne sont autres que les limites pour les milieux isotropes de ceux donnés dans le chapitre I, on obtient les expressions nécessaires dans les éqs. (II.11) et (II.14) pour le calcul de la densité d'états.

Dans ce qui suit, nous donnons les expressions explicites de $g_s(0, 0)$ et $g_s(2h, 2h)$ pour un substrat semi-infini et celles de $g_L(2h, 2h)$ correspondant à une couche libre. Rappelons que pour toutes les fonctions de Green précédentes, les composantes g_{22} sont découplées des composantes $g_{11}, g_{13}, g_{31}, g_{33}$ c'est-à-dire $g_{12} = g_{21} = g_{23} = g_{32} = 0$ (voir chapitre I). La contribution des vibrations transverses dans la densité d'états vient des composantes 22, tandis que les composantes 11, 13, 31, et 33 fournissent la contribution des modes sagittaux à la densité d'états.

Définissons d'abord les quantités suivantes :

$$\varepsilon = \frac{\alpha_l \alpha_t}{k_{//}}, \quad (\text{II. 15})$$

$$C^t = \cosh(2 \alpha_t h), \quad C^l = \cosh(2 \alpha_l h), \quad (\text{II. 16})$$

$$S^t = \sinh(2 \alpha_t h), \quad S^\ell = \sinh(2 \alpha_\ell h) \quad (\text{II. 17})$$

où α_ℓ et α_t sont définis à partir des équations (I.50) et (I.51).

i) Les composantes 22 des éléments de la fonction de Green sont :

$$g_s(0, 0) = -(\rho \alpha_t C_t^2)^{-1}, \quad (\text{II. 18})$$

$$g_s(2h, 2h) = \frac{1}{2\rho \alpha_t C_t^2} (1 + e^{-4\alpha_t h}), \quad (\text{II. 19})$$

$$g_L(2h, 2h) = -\frac{C^t}{\rho \alpha_t C_t^2 S^t}. \quad (\text{II. 20})$$

ii) Les composantes 11, 13, 31, et 33 des éléments de la fonction de Green.

$$\overleftrightarrow{g}_s(0, 0) = \frac{1}{\rho C_t^2 [(k_{//}^2 + \alpha_t^2)^2 - 4 \alpha_\ell \alpha_t k_{//}^2]} \begin{bmatrix} \frac{\alpha_t \omega^2}{C_t^2} & -i k_{//} [\alpha_t^2 + k_{//}^2 - 2\alpha_\ell \alpha_t] \\ -i k_{//} [\alpha_t^2 + k_{//}^2 - 2\alpha_\ell \alpha_t] & \frac{\alpha_\ell \omega^2}{C_t^2} \end{bmatrix} \quad (\text{II. 21})$$

$$\overleftrightarrow{g}_L(2h, 2h) = \begin{bmatrix} m & in \\ -in & p \end{bmatrix} \quad (\text{II. 22})$$

où

$$m = F \frac{\alpha_t \omega^2}{2 k_{//} C_t^2} [(k_{//}^2 + \alpha_t^2)^2 S^\ell C^t - 4 \alpha_\ell \alpha_t k_{//}^2 S^t C^\ell], \quad (\text{II. 23})$$

$$n = F \left\{ \alpha_\ell \alpha_t (k_{//}^2 + \alpha_t^2) (3k_{//}^2 + \alpha_t^2) (C_t C_\ell - 1) - \frac{1}{2} S^\ell S^t [(k_{//}^2 + \alpha_t^2)^3 + 8 \varepsilon^2 k_{//}^6] \right\}, \quad (\text{II.24})$$

$$p = \frac{F \alpha_\ell \omega^2}{2 k_{//} C_t^2} \left\{ (k_{//}^2 + \alpha_t^2)^2 S^t C^\ell - 4 \alpha_\ell \alpha_t k_{//}^2 S^\ell S^t \right\}, \quad (\text{II.25})$$

$$F = \frac{2 k_{//}}{\rho C_t^2} \left\{ [(k_{//}^2 + \alpha_t^2)^4 + (4 \alpha_\ell \alpha_t k_{//}^2)^2] S^\ell S^t - 8 \alpha_\ell \alpha_t k_{//}^2 (k_{//}^2 + \alpha_t^2)^2 (C^t C^\ell - 1) \right\}. \quad (\text{II.26})$$

$$\vec{g}_s(2h, 2h) = \frac{k_{//}}{2\rho \omega^2 r_+} \begin{bmatrix} u & iv \\ -iv & w \end{bmatrix}, \quad (\text{II.27})$$

où

$$u = -\frac{k_{//}}{\alpha_\ell} \left\{ (1 - \varepsilon) r_+ + 2 e^{-2h} (\alpha_\ell + \alpha_t) + r_- (e^{-4\alpha_\ell h} + \varepsilon e^{-4\alpha_t h}) \right\} \quad (\text{II.28})$$

$$v = e^{-2h} (\alpha_\ell + \alpha_t) \left(1 + \frac{1}{\varepsilon}\right) + r_- (e^{-4\alpha_t h} + e^{-4\alpha_\ell h}) \quad (\text{II.29})$$

$$w = -\frac{k_{//}}{\alpha_t} \left\{ (1 - \varepsilon) r_+ + 2 e^{-2h} (\alpha_\ell + \alpha_t) + r_- (e^{-4\alpha_t h} + \varepsilon e^{-4\alpha_\ell h}) \right\} \quad (\text{II.30})$$

$$r_\pm = \frac{-4\alpha_\ell \alpha_t k_{//}^2 \pm (k_{//}^2 + \alpha_t^2)^2}{4\alpha_\ell \alpha_t (k_{//}^2 + \alpha_t^2)} \quad (\text{II.31})$$

II - 4. APPLICATIONS ET DISCUSSIONS DES RESULTATS

Ce paragraphe contient quelques illustrations de densités d'états et de courbes de dispersion pour une couche de W d'épaisseur 2h déposée sur un

substrat d'Al (W/Al) et vice versa (Al/W) ; les paramètres de ces matériaux sont donnés dans le tableau II. 1. Nous discuterons le comportement général des densités d'états ainsi que leurs particularités pour les exemples cités ci-dessus. En particulier, en raison d'une différence notable entre les constantes élastiques de W et Al, la plupart des courbes de dispersion dans le cas W/Al (respectivement Al/W) sont très proches de celles pour une couche libre de W (respectivement une couche d'Al ayant une surface libre de contraintes et l'autre surface rigidement bloquée).

	C_t (m/s)	C_l (m/s)	ρ (Kg/m ³)
W	2860	5231	19300
Al	3110	6422	2700
ZnSe	2725	4065	5264
GaAs	3342	4710	5316.9

Tableau II-1. Paramètres élastiques de W, Al, ZnSe et GaAs.

a) Nous présentons d'abord sur la figure II-2 la dispersion des modes localisés et résonnants de polarisation transverse pour une couche de W adsorbée sur un substrat d'Al; ces modes apparaissent comme des pics dans la densité d'états $n(\omega, k_{//})$, illustrée sur la figure II-3 pour une valeur donnée du vecteur d'onde réduit $2k_{//} h$. Dans la figure II-2, les courbes au-dessous de la ligne de la vitesse du son transverse dans le substrat, représentent les modes localisés. Leur amplitude décroît exponentiellement dans le substrat et ils apparaissent comme des pics δ dans la densité d'états. Dans la limite $k_{//} h \rightarrow \infty$, ils tendent asymptotiquement vers la vitesse du son transverse dans l'adsorbat C_t (W). D'autre part, leur extension dans la bande du substrat représente les états résonnants dont la durée de vie est reliée à la largeur finie des pics de densités d'états. La figure II-3 montre que, pour une valeur donnée de $k_{//} h$, ces pics s'élargissent et leurs intensités décroissent lorsque la fréquence augmente.

Comme mentionné ci-dessus, les courbes de dispersion dans la fig. II-2 sont très proches de celles obtenues pour une couche libre de W; de la même façon les résultats pour une couche d'Al sur un substrat de W (voir fig. II-4) sont très voisins de ceux obtenus pour une couche d'Al ayant une surface libre de contraintes et l'autre surface rigidement bloquée. Ce sont en fait deux situations extrêmes qui ne se produisent pas en général pour des paramètres arbitraires des constituants (nous reviendrons sur ces points avec plus de détails dans la

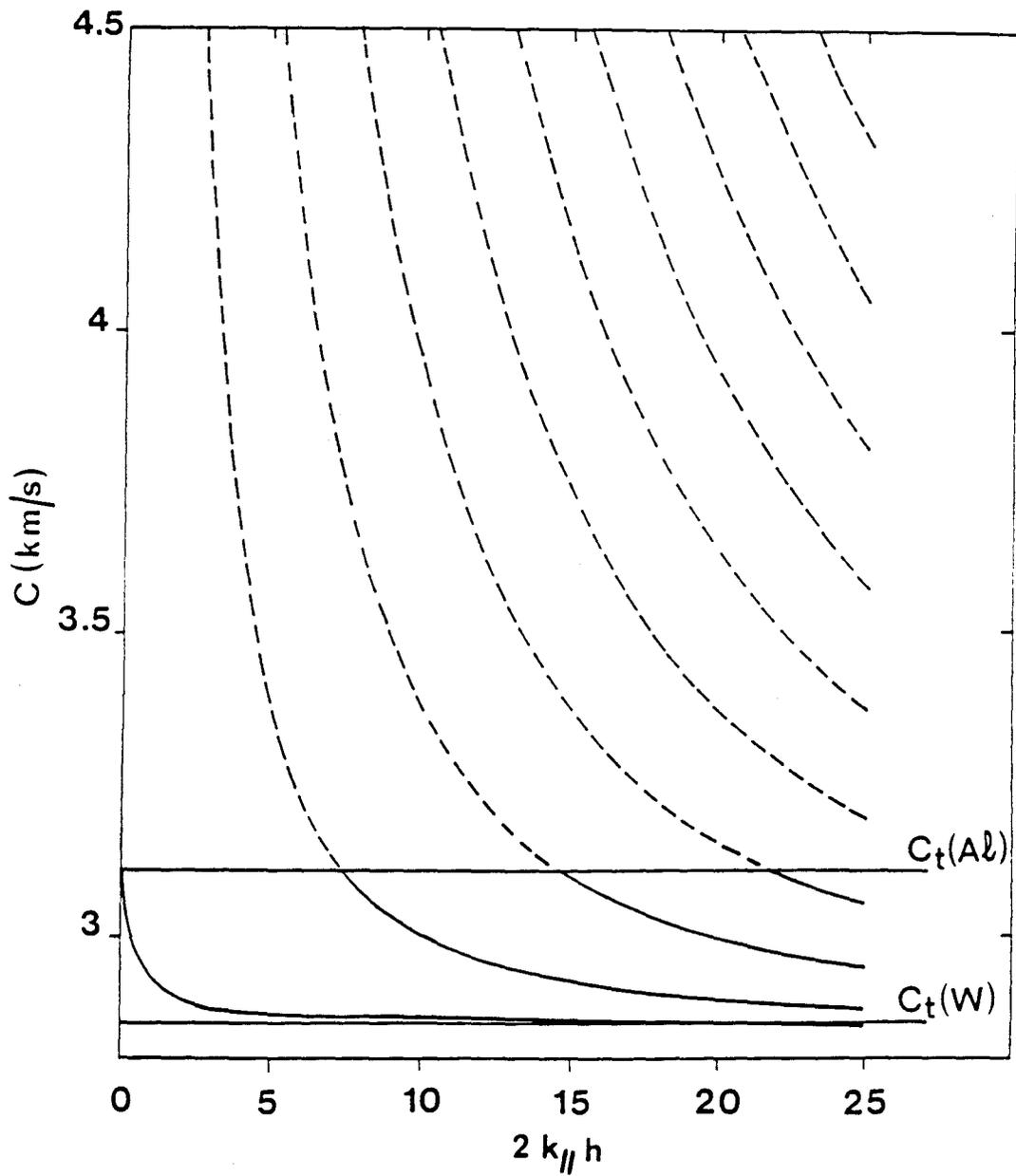


Figure II-2 La dispersion des modes localisés et résonants transverses pour une couche de W adsorbée sur un substrat d'Al. Les courbes en traits pleins et discontinus représentent respectivement les modes localisés et résonants. C est la vitesse du son.



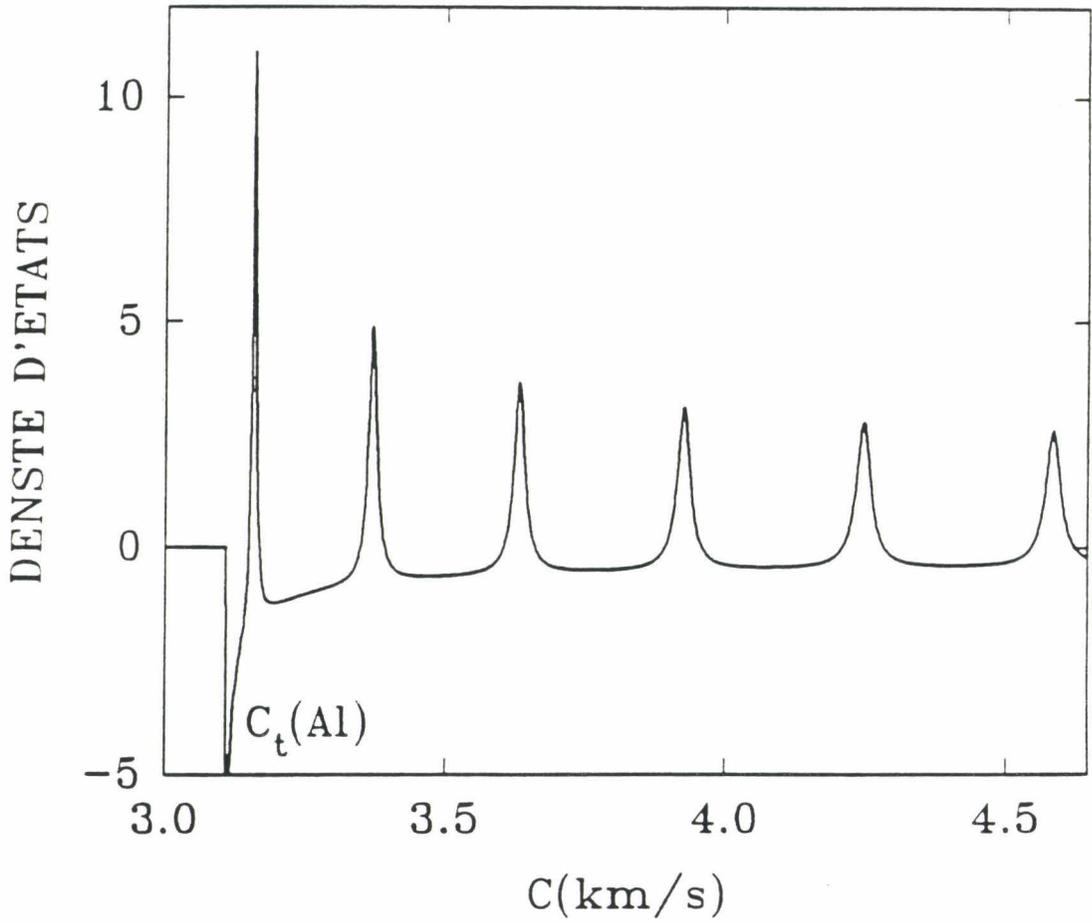


Figure II-3 La variation de densité d'états des modes transverse (en unités de $2h/C_t(\text{Al})$) entre la couche adsorbée de W sur le substrat d'Al et la même quantité d'un cristal semi-infini d'Al. Cette figure est dessinée pour $2k_{//} h = 20$.



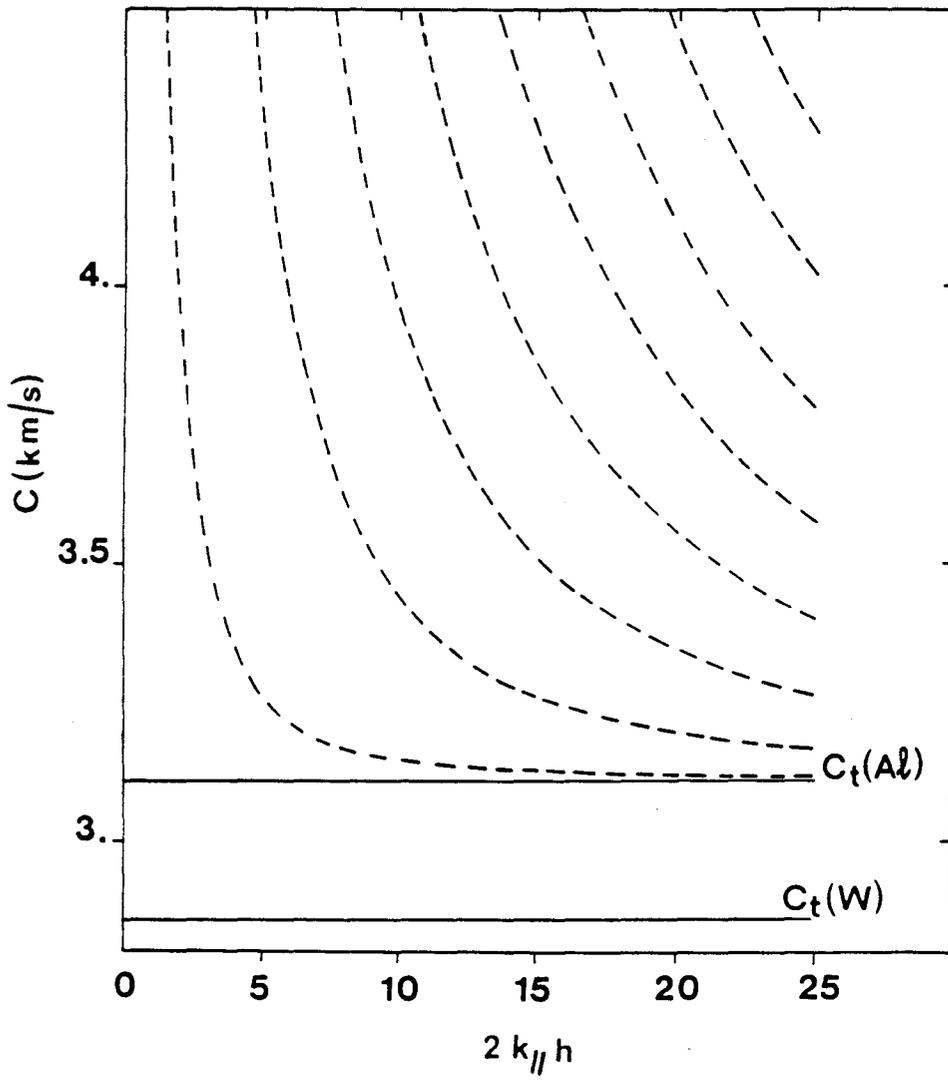


Figure II-4 Même chose que la figure II-2 dans le cas d'une couche d'Al déposée sur un substrat de W.



discussion des modes sagittaux). Cependant même avec des paramètres arbitraires, on peut être très proche de ces deux cas limites pour les parties des courbes de dispersion qui sont éloignées de la vitesse du son dans le substrat, c'est à dire pour des fréquences suffisamment faibles ou suffisamment grandes par rapport au bas de la bande du substrat. Notons que dans le cas particulier $k_{//}h = 0$ les positions des états résonnants sont exactement données par $\sin\left(\frac{2\omega h}{C_{t1}}\right) = 0$ ou $\cos\left(\frac{2\omega h}{C_{t1}}\right) = 0$; c'est-à-dire les courbes de dispersion d'une couche isolée dans les deux cas limites mentionnés précédemment, suivant que la vitesse de l'adsorbat (C_{t1}) est inférieure à celle du substrat (C_{t2}) ou vice versa. Cette démonstration à $k_{//} = 0$ reste valable pour des ondes longitudinales pures se propageant perpendiculairement à la surface, à condition de remplacer les vitesses transverses par les vitesses longitudinales. Une telle analyse est utilisée avec succès par Benedek et al [7] pour expliquer les positions des ondes longitudinales résonnantes observées par diffusion d'hélium dans les multicouches Na/Cu (001).

b) La figure II-5 représente les courbes de dispersion des ondes sagittales dans le cas W/Al; le comportement de la densité d'états est illustré sur la figure II-7 pour quelques valeurs de $k_{//}$. Dans la limite $k_{//}h \rightarrow \infty$ sur la figure II-5, les deux branches les plus basses tendent respectivement vers la vitesse de l'onde de Rayleigh d'un cristal de W ($C_R(W)$) et celle de Stoneley à l'interface Al-W (C_S); les autres branches tendent vers la vitesse du son transverse dans W ($C_t(W)$). Une analyse de la densité d'états partielle montre un changement graduel du caractère prédominant de ces ondes de transverse à longitudinal, lorsque la fréquence (ou la vitesse C) augmente. Sur cette figure, on peut noter aussi une importante interaction de modes au voisinage de la vitesse du son longitudinal dans W ($C_l(W)$).

Un comportement particulier sur la figure II-5 est l'arrangement des modes résonnants comme une série de doublets dans le domaine des vitesses longitudinales de W et d'Al ainsi qu'au-dessus. (Ce résultat est aussi observé pour une couche libre de W (voir Fig. II-6), où la présence d'un plan miroir permet d'assigner un caractère symétrique ou antisymétrique aux courbes d'un doublet respectivement). Dus à leurs largeurs finies, les états résonnants de la figure II-5 peuvent interagir ensemble, donnant lieu à un mélange des deux courbes d'un doublet. Cette association en doublets n'est pas forcément rencontrée pour des paramètres arbitraires des matériaux.

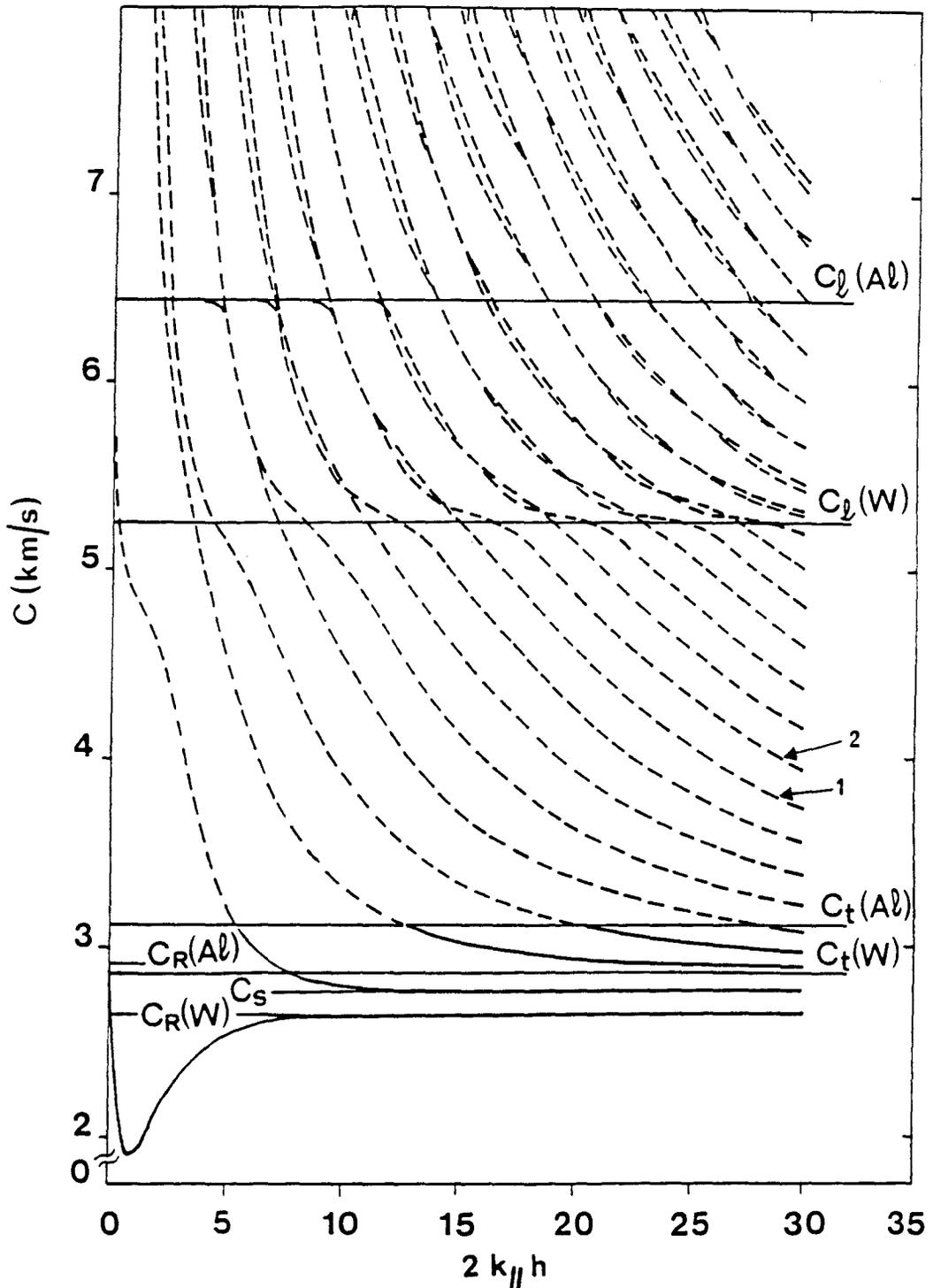


Figure II-5 Courbes de dispersion des modes localisés et résonnants de polarisation sagittale, pour une couche de W déposée sur un substrat d'Al. Les modes localisés (courbes pleines) au dessous de $C_t(Al)$ s'étendent à l'intérieur des bandes de volume du substrat comme des résonances (courbes discontinues). Les limites asymptotiques des deux courbes les plus basses sont respectivement $C_R(W)$ (la vitesse de Rayleigh dans le W) et C_S (la vitesse de Stoneley à l'interface Al-W).



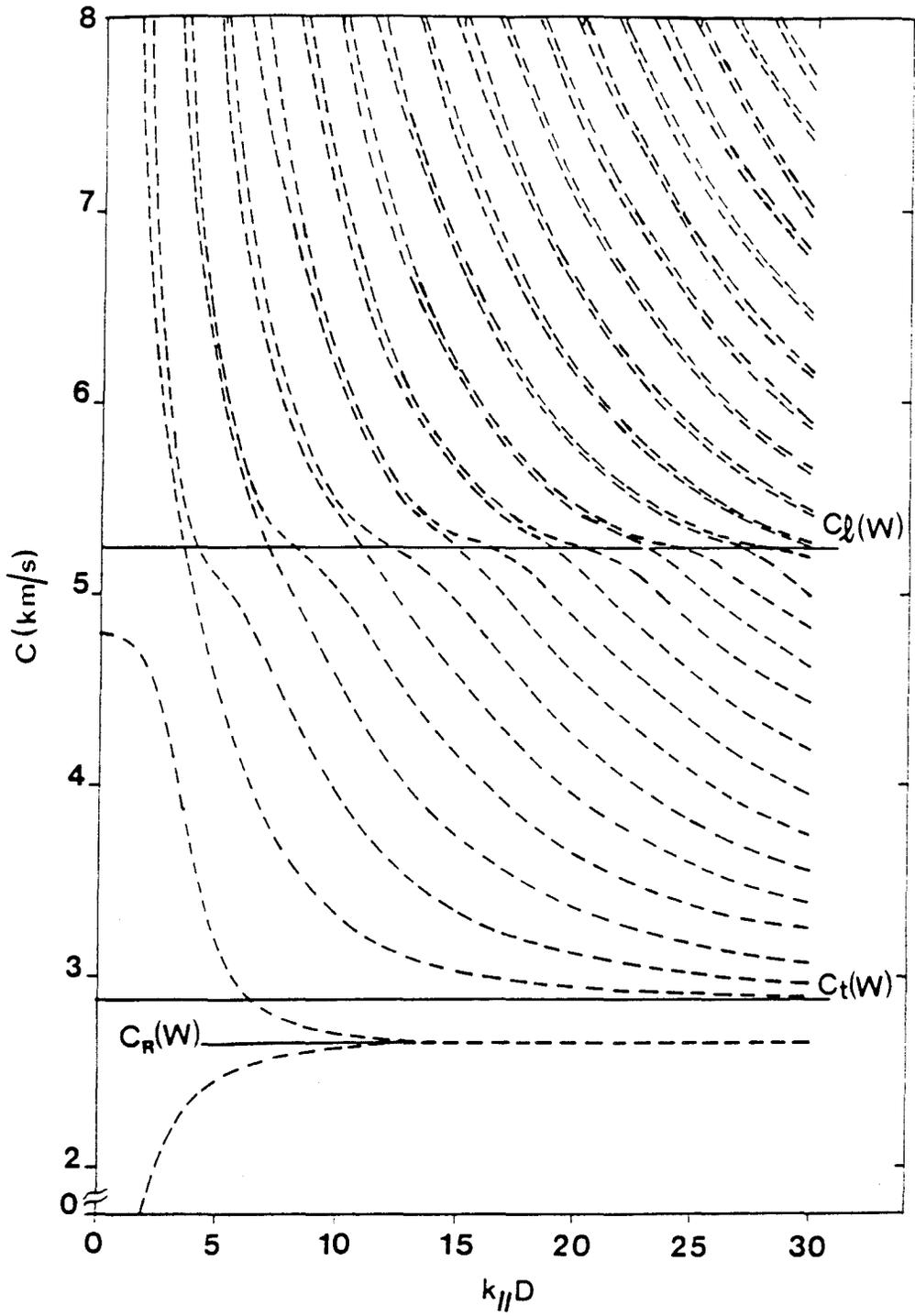


Figure II-6 Courbe de dispersion des modes discrets d'une lame mince libre de W pour la polarisation sagittale. A cause de la symétrie miroir dans la lame, les modes sont alternativement symétriques et antisymétriques.



Pour une valeur donnée du vecteur d'onde $\vec{k}_{//}$, on peut observer dans la densité d'états (figure II-7) que lorsque la vitesse augmente, l'intensité des résonances décroît d'abord avant d'augmenter de façon très significative dans la zone des vitesses longitudinales. Dans cette dernière région, la plupart des résonances prédominantes ont un fort caractère longitudinal lorsque la vitesse C tombe entre $C_{\ell}(W)$ et $C_{\ell}(Al)$. Or cette composante est atténuée dans le substrat et par conséquent ces résonances correspondent aux ondes longitudinales guidées, initialement prédites dans les références [4 - 5]. Cependant des résonances bien définies existent encore pour des vitesses juste au-dessus de $C_{\ell}(Al)$ où les ondes ont un comportement propagatif à l'intérieur du substrat (voir fig. II-7)

Une représentation plus significative est celle de la variation de l'intensité des résonances tout au long d'une courbe de dispersion (Fig. II-8): l'intensité maximale, accompagnée du rétrécissement des pics, est observé lorsque les deux modes résonnants d'un doublet interagissent ensemble. Par conséquent, la hauteur des pics dans la densité d'états peut quelquefois présenter une variation remarquable lorsque $k_{//}$ (ou C) varie d'une quantité même faible.

Sur la figure II-9 nous avons représenté les courbes de dispersion du système Al/W. A part les deux branches les plus basses, toutes les autres courbes sont très proches de celles correspondant à une couche d'Al isolée ayant une surface libre de contrainte et l'autre surface rigidement bloquée (voir fig. II-10). Le caractère de doublet des branches se produit pour $C > C_{\ell}(Al)$. La plupart des résonances longitudinales fines ont lieu dans cette région (voir fig. II-11), particulièrement juste au-dessus de $C_{\ell}(Al)$, même si leurs intensités sont en général plus faibles que celles correspondant au cas W/Al.

Finalement, à titre de comparaison, nous avons aussi étudié le cas d'une couche ZnSe déposée sur un substrat de GaAs. Ce système a été étudié précédemment [4 - 5] aussi bien expérimentalement que théoriquement et ses courbes de dispersion sont données dans la référence [5]. Sur la figure II-12, où nous avons montré quelques exemples de densités d'états des ondes sagittales correspondant à ce cas, on peut noter que, contrairement aux figures II-7 et II-11, des résonances intenses ont lieu uniquement dans la zone limitée par les vitesses longitudinales des deux constituants. D'autre part, le caractère de doublet des courbes de dispersion, discuté précédemment, n'est pas rencontré dans ce cas.

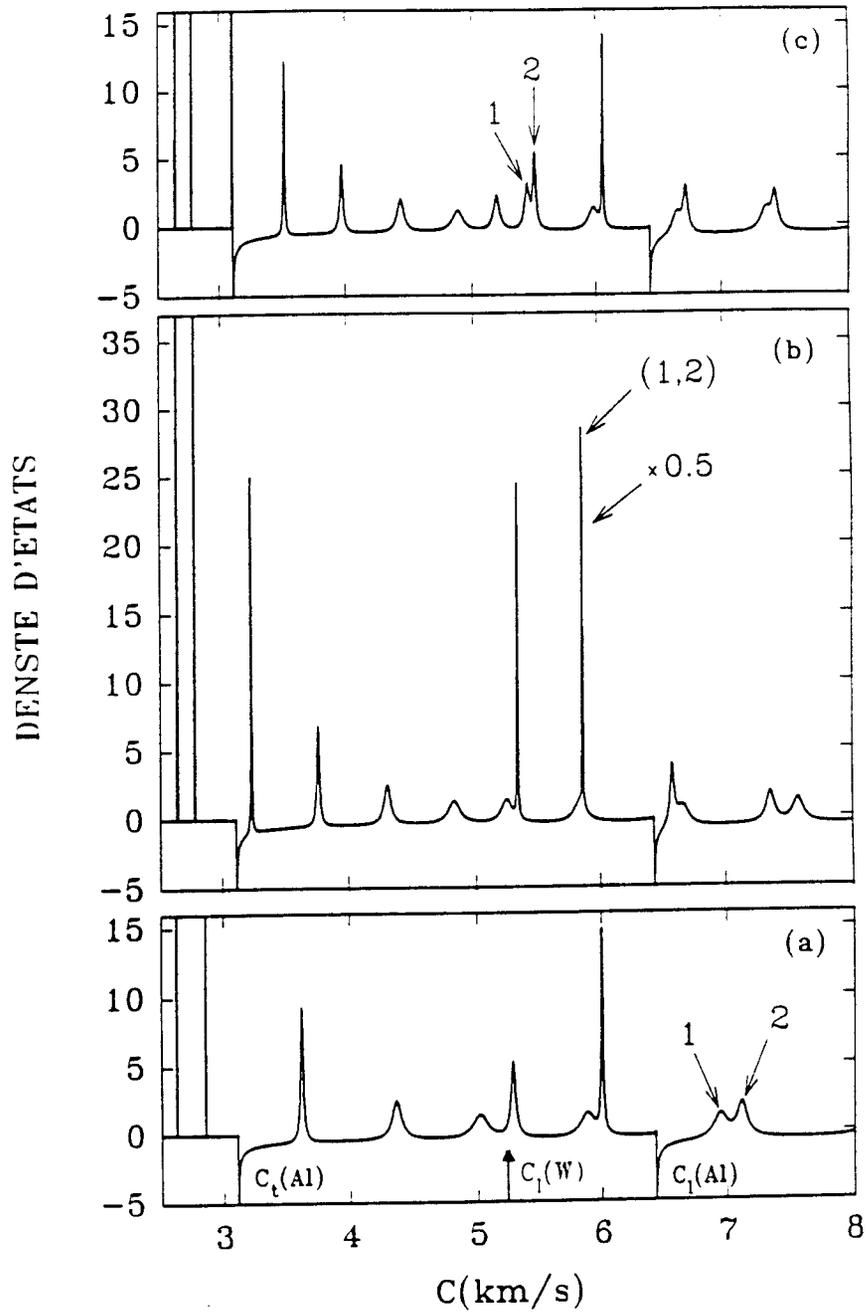


Figure II-7 La variation de densité d'états des modes sagittaux (en unités de $2h/C_t(\text{Al})$) entre une couche adsorbée de W sur un substrat d'Al et la même quantité d'un cristal semi-infini d'Al. Les modes de Sezawa localisés à l'intérieur de la couche de W donnent lieu à des pics deltas représentés au-dessous de $C_t(\text{Al})$. Les figures sont dessinées pour $2k//h = 8$ (a), 11(b) et 13(c). L'accent est mis sur l'évolution des deux résonances appelées 1 et 2 sur la figure II-5. La position de la vitesse du son longitudinale dans W est indiquée par une flèche.

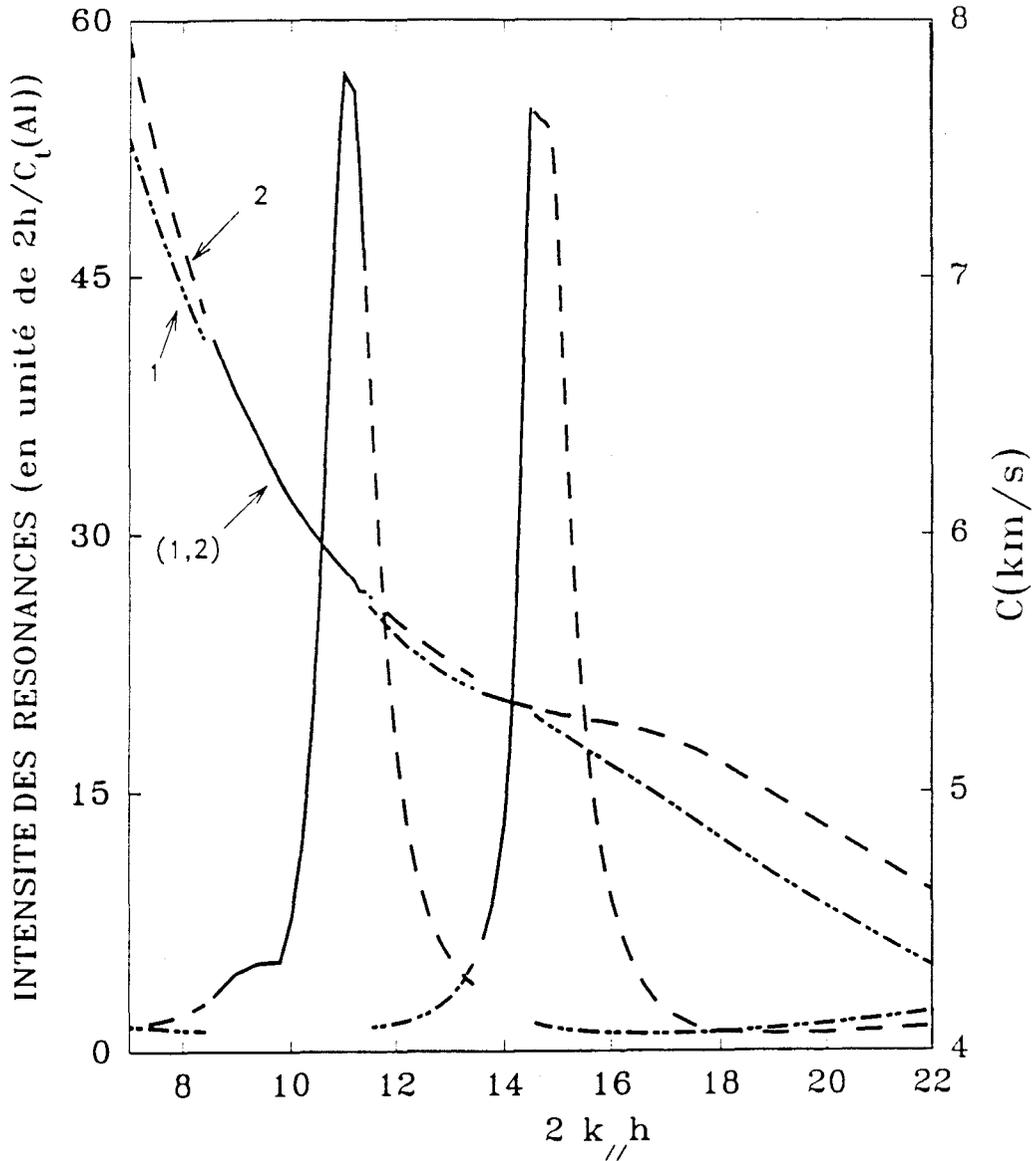


Figure II-8

L'intensité des résonances, appelées 1 et 2 sur les figures II-5 et II-7, tout au long des courbes de dispersion. L'intensité devient très importante lorsque les deux résonances interagissent ensemble. Pour bien montrer ce comportement, les courbes de dispersion sont aussi reproduites sur cette figure.

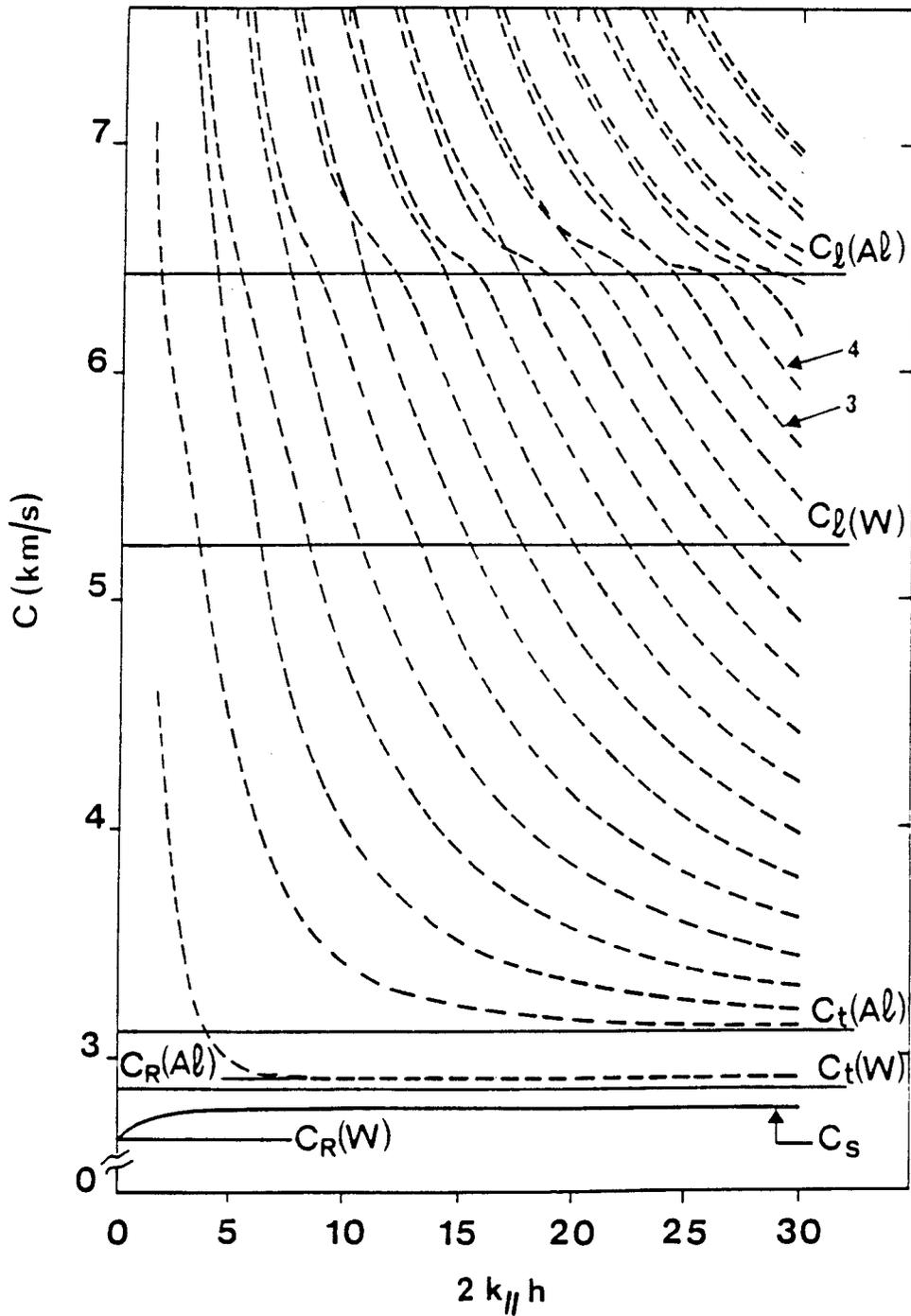


Figure II-9

Courbes de dispersion des modes localisés et résonnants de polarisation sagittale, pour une couche d'Al déposée sur un substrat de W. À part la courbe la plus basse qui tend asymptotiquement vers la vitesse de Stoneley à l'interface W-Al, toutes les autres courbes sont résonnantes avec les bandes de volume du substrat.



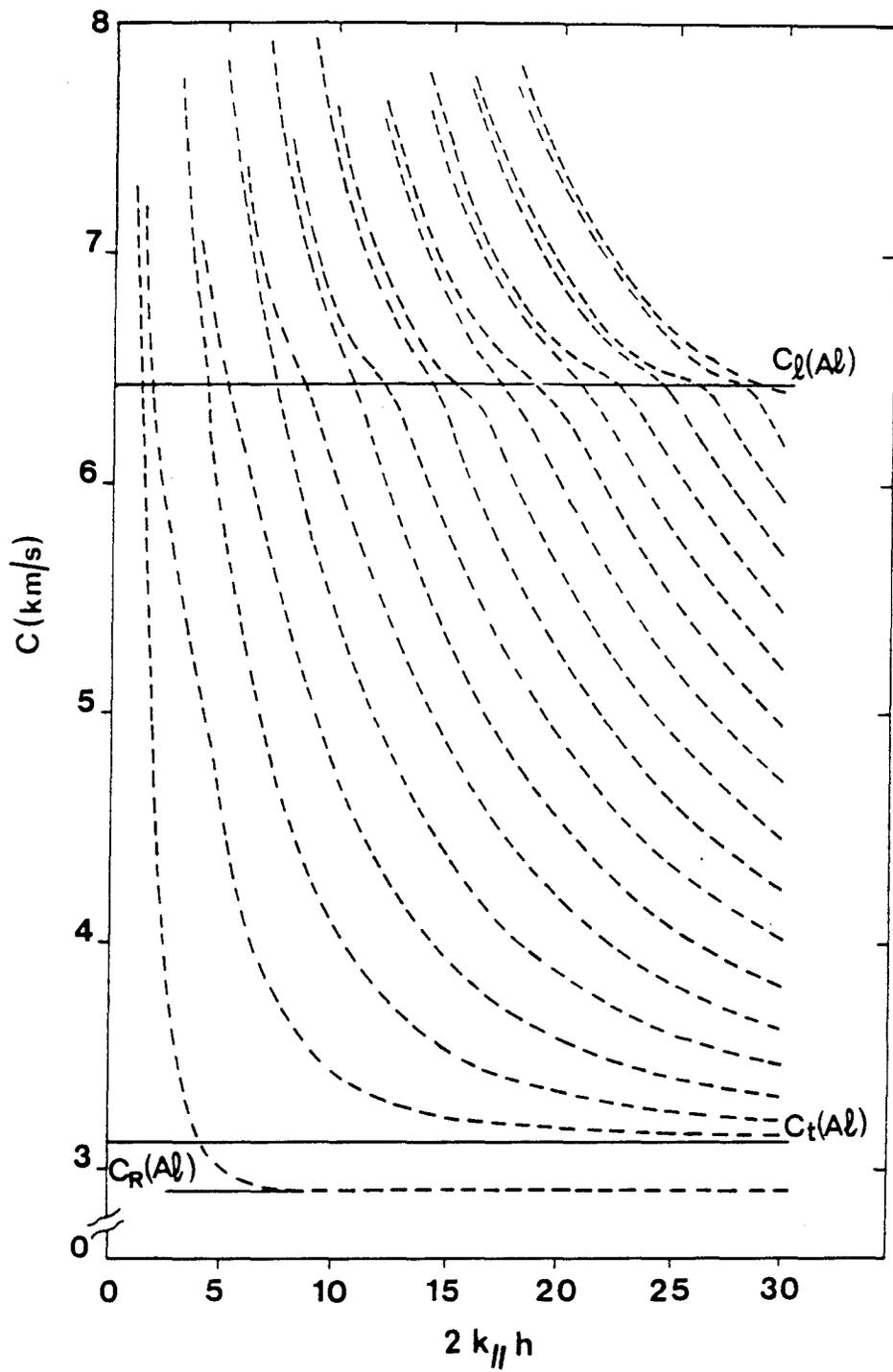


Figure II-10 Courbes de dispersion des modes discrets d'une couche d'Al avec une surface libre de contrainte et l'autre surface rigidement bloquée.



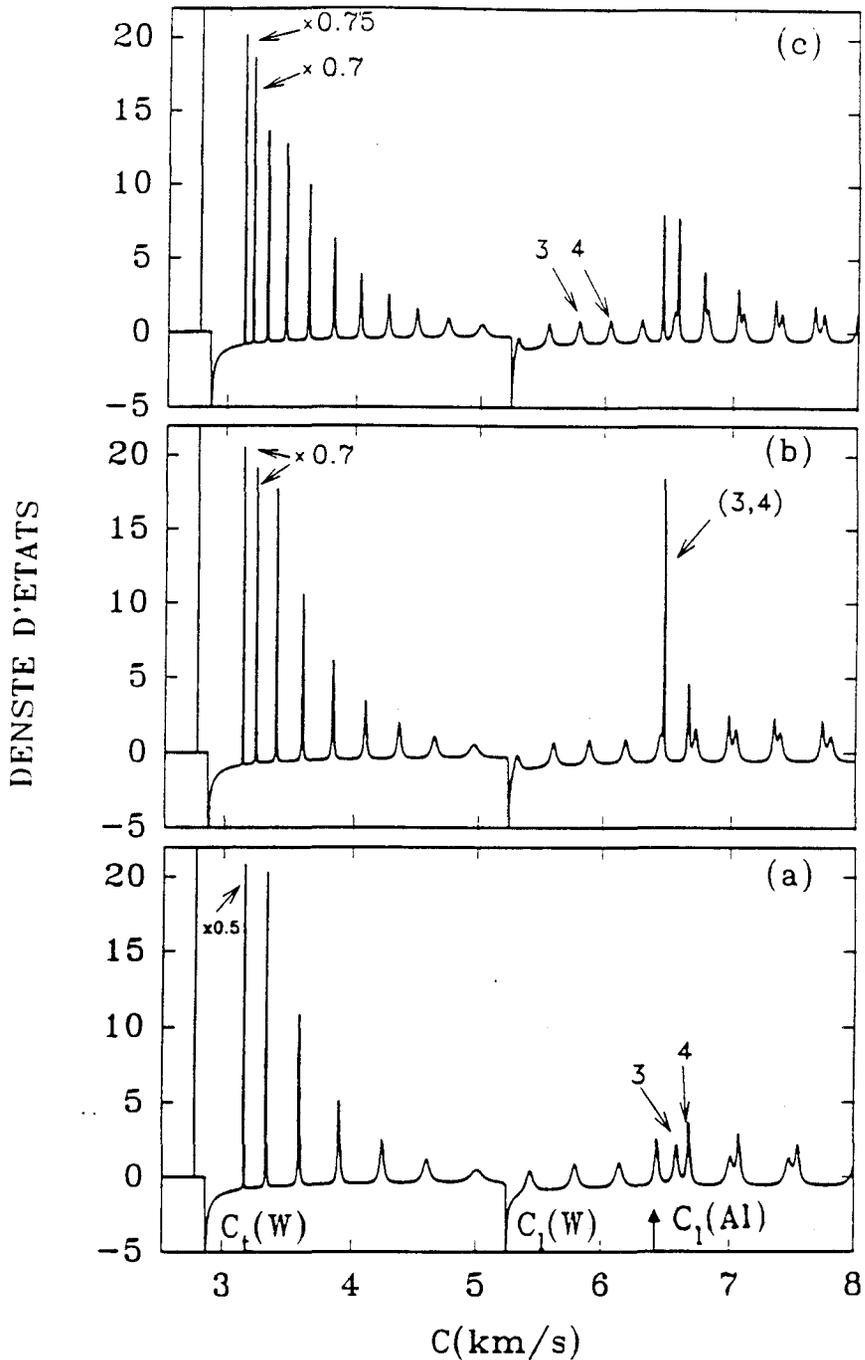


Figure II-11

La variation de densité d'états des modes sagittaux (en unités de $2h/C_t(\text{Al})$) entre une couche adsorbée d'Al sur un substrat de W et la même quantité d'un cristal semi-infini de W. Le mode de Stonely localisé à l'interface Al-W donne lieu à un pic delta représenté au-dessous de $C_t(\text{W})$. Les figures sont dessinées pour $2k_z h = 19$ (a), 24.3 (b) et 29 (c). L'accent est mis sur l'évolution des deux résonances appelées 3 et 4 sur la figure II-9. La position de la vitesse du son longitudinale dans Al est indiquée par une flèche.



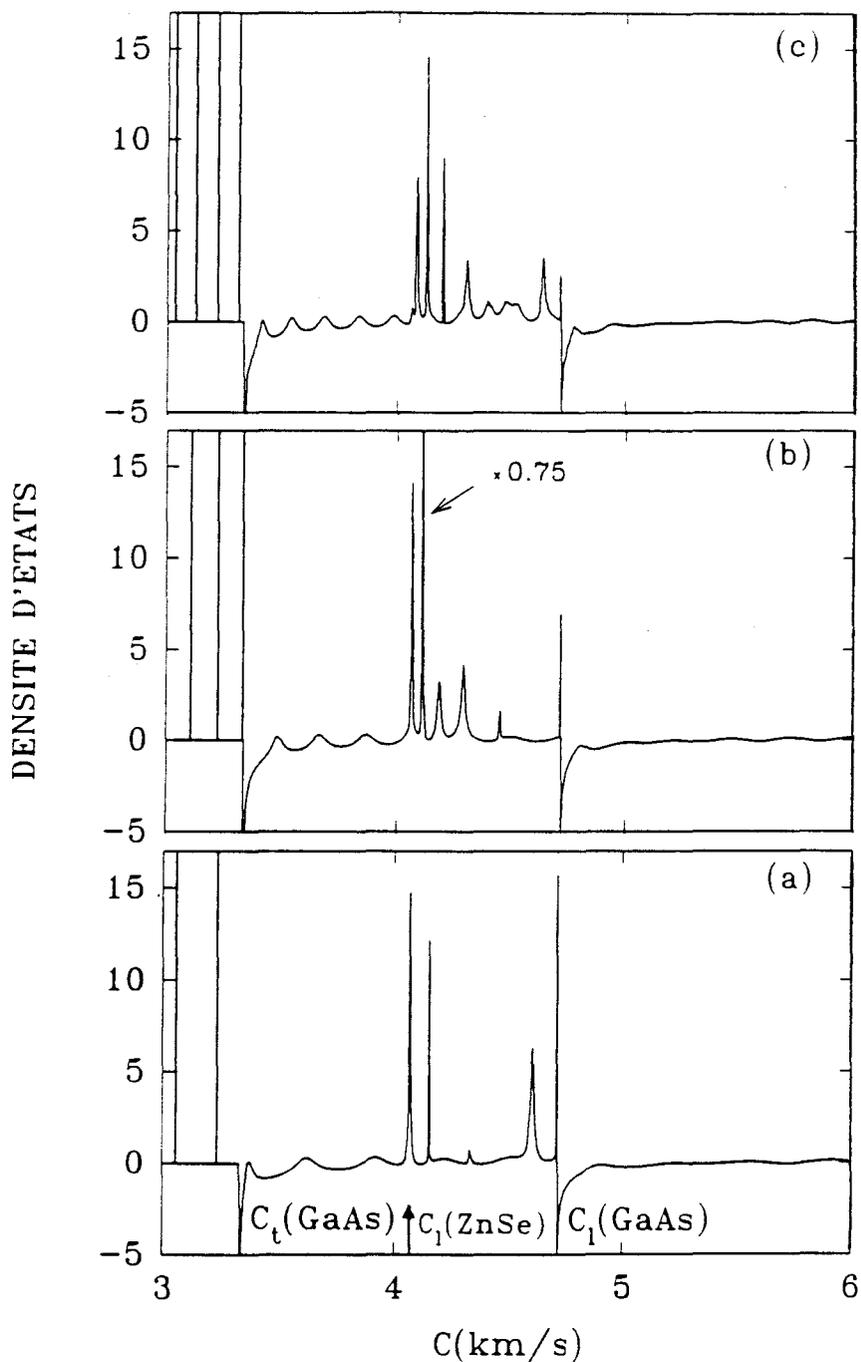


Figure II-12 Même chose que les figures II-7 et II-11 dans le cas ZnSe/GaAs. Les densités d'états sont données pour $2k_z h = 20$ (a), 30 (b) et 40 (c). La position de la vitesse du son longitudinale dans ZnSe est indiquée par une flèche.



II - 5. CONCLUSION

En utilisant le formalisme de la fonction de Green, nous avons présenté dans ce chapitre une expression simple et générale pour calculer la densité d'états totale d'une couche adsorbée. Naturellement, l'approche de la fonction de Green utilisée dans cette analyse nous permet aussi d'obtenir les densités d'états locales, même si on n'a pas détaillé cet aspect ici. Nous avons ensuite appliqué cette méthode générale au cas des milieux élastiques isotropes. Des résonances intenses ont été trouvées comme extension des ondes de Love et de Sezawa à l'intérieur des bandes de volume du substrat, celles-ci existent dans le domaine des vitesses transverses du son mais aussi dans le domaine des vitesses longitudinales où elles peuvent notamment prendre la forme d'ondes longitudinales guidées [4-5]. Pour ces dernières, les vibrations ont un caractère longitudinal prépondérant; or cette composante reste localisée dans la couche adsorbée et décroît exponentiellement dans le substrat. L'importance relative des différents pics dans la densité d'états dépend fortement des paramètres élastiques des constituants.

L'étude des densités d'états nous a permis de donner la courbe de dispersion des modes résonnants en fonction de $2k//h$. Nous avons montré que dans certains cas l'intensité d'une résonance peut varier très fortement même pour une faible variation de $k//$.

Dans l'exemple du système W/Al (resp. (Al/W)), nous avons observé un regroupement des courbes de dispersion sous forme de doublets qui reproduisent assez fidèlement les modes discrets d'une lame mince isolée de W avec surfaces libres (resp. d'Al avec une surface libre de contrainte et l'autre surface rigidement bloquée)

Bibliographie du chapitre II

1. A.E.H. Love, Some Problems of Geodynamics (Cambridge Univ. Press, London, 1911)
2. K. Sezawa and K. Kanai, bull. Earth. Res. Inst. Tokyo 13, 237 (1933)
3. G.W. Farnell and E.L. Adler, Physical Acoustics Principles and Methods, vol 9 ed. W.P. Mason and R.N. Thurston (New York : Academic Press) p 35, 1972.
B.A. Auld Acoustic Fields and Waves in Solids vols I, II (New York; Wiley) (1973)
4. B. Hillebrands, S. Lee, G.I. Stegman, H. Cheng, J.E. Potts and F. Nizzoli, Phys. Rev. Lett. 60, 832 (1988) and Surf. Sci. 211/212, 387 (1989).
S. Lee, B. Hillebrands, G.I. Stegman, H. Cheng, J. E. Potts and F Nizzoli, J. Appl. Phys. 63, 1914 (1988).
5. F. Nizzoli, B. Hillebrands, S. Lee, G.I. Stegman, G. Duda, G. Wegner and W. Knoll, Phys. Rev. B 40, 3323 (1989).
6. V. Bortolani, A.M. Marvin, F. Nizzoli and G. Santoro. J. Phys. C. 16, 1757 (1983).
7. G. Benedek, J. Ellis, A. Reichmuth, P. Ruggerone, H. Schief and J.P. Toennies, Phys. Rev. Lett. 69, 2951 (1992).
8. L. Dobrzynski, A. Akjouj, B. Sylla and B. Djafari-Rouhani, Acta Physica Polonica A 81, 85 (1992).
9. A.Akjouj, E.H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, J. Phys. : Condensed Matter 6, 1089 (1993).
10. B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, J. Phys. : Condensed Matter 5, 8177 (1993).
11. A.A. Maradudin and D.L. Mills. Ann Phys. 100, 262 (1976)

12. K. Portz, Ph. D. dissertation. Univ. of California, Irvine (1979).
13. M. G. Cottam and A.A. Maradudin: Surface Excitations (Modern Problems in Condensed Matter Sciences ,Vol. 9) (North-Holland, Amsterdam), p 108 (1986).

Chapitre III

CHAPITRE III

ONDES ACOUSTIQUES DE SURFACE ET D'INTERFACE DANS LES SUPER-RESEAUX SEMI-INFINIS

III - 1. INTRODUCTION

Durant la dernière décennie, la propagation des ondes acoustiques dans les super-réseaux a fait l'objet d'un grand nombre de travaux théoriques et expérimentaux résumés dans plusieurs articles de revue récents [1 - 7]. L'étude des phonons dans les super-réseaux présente au-delà d'un intérêt fondamental, un moyen de caractérisation des propriétés (période, paramètres élastiques, qualité,...) de ces hétérostructures. Les états propagatifs dans le volume du super-réseau forment les bandes de volume ; elles sont séparées par des bandes interdites (minigaps) où des modes localisés associés à une perturbation du super-réseau parfait (telle que la création d'une surface libre ou d'une interface avec le substrat) peuvent exister.

Expérimentalement, les modes localisés (Rayleigh, Sezawa, Love) à la surface d'un super-réseau semi-infini ou fini déposé sur un substrat ont été observés au-dessous des bandes de volume, par diffusion Brillouin et par d'autres techniques acoustiques. Leur vitesse a été mesurée dans plusieurs super-réseaux métalliques (Nb - Cu [8, 12, 16], Mo - Ni [9], Ni - V [10], Au - Cr [11], Mo - Ta [13], Fe - Pd [14], Ni - Cu [15]) ou semi-conducteurs (GaAs-AlAs) [17,18]. De telles mesures permettent par exemple de déterminer les constantes élastiques de ces systèmes et déduire des informations sur la qualité des super-réseaux. Dans la plupart de ces études, le super-réseau est considéré comme un milieu effectif homogène, déposé sur un substrat. Par conséquent, les effets de la modulation des propriétés élastiques dans le super-réseau (repliement des modes, apparition des minigaps) ne sont pas pris en compte.

Récemment, Trodahl et al [19] ont réussi à observer, en diffusion Raman, des modes acoustiques de surface avec des fréquences localisées dans les minigaps d'un super-réseau amorphe Ge-SiO. Ces modes se sont trouvés très sensibles à l'épaisseur et la composition de la couche superficielle, et leur comportement en fonction de l'épaisseur de cette dernière a été reporté.

D'autre part, dans la plupart des expériences réalisées sur les phonons acoustiques dans les super-réseaux, l'effet du substrat qui sert de support et de la couche d'encapsulage qui joue le rôle de couche de protection sont ignorés, et des conditions aux limites périodiques sont supposées par simplicité. Dans leur expérience de diffusion Raman par les phonons acoustiques dans un super-réseau ultramince $Ge_m Si_n$, Lockwood et al [20] ont observé d'intenses pics qu'ils ont attribués à la présence du substrat et de la couche d'encapsulage.

Sur le plan théorique, les modes de volume et de surface dans les super-réseaux ont été étudiés depuis une dizaine d'années, en utilisant la méthode de la matrice de transfert. Cette méthode a été appliquée pour l'étude des modes acoustiques de polarisation transverse [21] et sagittale [22], ainsi que dans le cas général où les trois composantes du champ de déplacement sont couplées [23]. En particulier, il a été montré que des modes localisés de polarisation transverse peuvent exister à la surface libre d'un super-réseau [21], ainsi qu'à l'interface super-réseau-substrat [24] ou au voisinage d'un défaut plan à l'intérieur d'un super-réseau [25]. (Notons que la surface plane d'un milieu homogène ou l'interface entre deux milieux homogènes ne peuvent pas être le support d'ondes localisées transverses). Notons aussi que le type de modes de surface observés par Trodahl et al [19] avait été prévu par cette méthode de calcul.

Une autre approche de calcul est celle de la fonction de Green qui a l'avantage de permettre plus facilement l'accès à des quantités physiques autres que les relations de dispersion des modes de volume et de surface : densités d'états locales et totales associées à différentes inhomogénéités introduites dans le super-réseau [26 - 28], les propriétés thermodynamiques [29], diffusion de la lumière[7]...

Dans ce chapitre, nous abordons dans le cadre de la théorie de l'élasticité et en utilisant la méthode de la théorie des réponses d'interface [30], l'étude des ondes acoustiques de polarisation transverse et sagittale dans les super-réseaux semi-infinis.

Nous avons tout d'abord étudié en détail les modes acoustiques de polarisation transverse dans un super-réseau semi-infini avec ou sans couche d'encapsulation à la surface, ou en contact avec un substrat. Pour ces modes qui font intervenir une seule direction de vibration, le calcul des fonctions réponses (de Green) des systèmes décrits précédemment, a pu être effectué analytiquement. Les densités d'états en sont déduites comme des fonctions de la fréquence ω et du vecteur d'onde $\vec{k}_{//}$ (parallèle aux interfaces). Les modes localisés et résonnants associés aux différentes inhomogénéités introduites dans le super-réseau (surface, interface,...), apparaissent comme des pics de densités d'états soit à l'intérieur des minigaps, soit à l'intérieur des bandes de volume du super-réseau. En particulier, nous avons obtenu des règles générales [27] sur l'existence des modes localisés transverses associés à la surface libre d'un super-réseau semi-infini, ainsi que pour les modes résonnants associés à l'interface super-réseau-substrat.

Dans le cas des modes de polarisation sagittale, le calcul des fonctions réponses et par suite des densités d'états est beaucoup plus compliqué en raison du couplage de deux degrés de vibration, et reste pour l'instant numérique. Dans ce travail, nous présentons la mise au point de la méthode de calcul, ainsi que quelques applications qui se limitent jusqu'à présent au super-réseau semi-infini. La règle générale que l'on peut prévoir sur l'existence des modes de surface est vérifiée numériquement.

Ce chapitre est structuré de la façon suivante: dans une première partie, consacrée aux modes localisés et résonnants de polarisation transverse (paragraphe III-2), nous présentons la méthode de calcul des fonctions de Green pour un super-réseau infini puis semi-infini avec une couche d'encapsulation. Les expressions détaillées de ces fonctions seront données dans l'appendice B. Ensuite, nous donnons les résultats analytiques obtenus pour les densités d'états dans les hétérostructures décrites précédemment. Des applications spécifiques sont données pour les super-réseaux Y-Dy ou GaAs-AlAs. L'effet d'une couche d'encapsulation de Si sur la surface de ce dernier super-réseau est aussi examiné. Dans la deuxième partie de ce chapitre, nous présentons une analyse similaire pour les modes localisés et résonnants de polarisation sagittale (paragraphe III-3), avec des applications au cas d'un super-réseau W-Al.

III.2 MODES LOCALISES ET RESONNANTS DE POLARISATION TRANSVERSE

III. 2. 1. Fonction de Green d'un super réseau infini et semi-infini

A. Equations générales

Le super-réseau est constitué d'un empilement alterné et périodique de deux couches cristallines différentes [31] $i = 1,2$ (voir Figure III.1 : Super-réseau à deux couches). Chaque couche a une épaisseur d_i et est caractérisée par ses constantes élastiques $C_{\alpha\beta\mu\nu}^{(i)}$ et sa densité $\rho^{(i)}$. Toutes les interfaces sont prises parallèles au plan (x_1, x_2) . La position suivant l'axe x_3 dans le milieu i appartenant à la cellule élémentaire n est notée par (n, i, x_3) où $-\frac{d_i}{2} \leq x_3 \leq \frac{d_i}{2}$. La période du super réseau est notée $D = d_1 + d_2$.

Rappelons que dans le cadre de la théorie de l'élasticité, les composantes u_α du vecteur déplacement, dans chaque milieu, doivent satisfaire les équations de mouvement (éq. (I. 15)).

$$-\rho \omega^2 u_\alpha = \sum_{\beta} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left[\sum_{\mu\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} (x_3) \frac{\partial u_\mu}{\partial x_\nu} (\vec{x}, t) \right] \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (\text{III.1})$$

La solution du vecteur déplacement dans chaque milieu [2, 21, 22] s'obtient en résolvant l'équation de mouvement précédente, et en utilisant les relations de continuité sur les déplacements et les contraintes aux interfaces. Elle peut s'écrire par exemple, dans le film $i = 1$ appartenant à la $n^{\text{ième}}$ cellule du super-réseau :

$$u_\alpha^{(n)}(\vec{x}, t) = \sum_{j=1}^3 \left[A_{\alpha j}^{(n)} \cosh(\alpha_j x_3) + B_{\alpha j}^{(n)} \sinh(\alpha_j x_3) \right] e^{i(\vec{k}_{//} \vec{x}_{//} - \omega t)}. \quad (\text{III.2})$$

Les paramètres α_j^2 sont les valeurs propres d'une matrice carré d'ordre 3. $A_{\alpha j}^{(n)}$, $B_{\alpha j}^{(n)}$ ($j = 1, 2, 3$) sont les vecteurs propres correspondants. ω est la fréquence de l'onde, $\vec{k}_{//}$ et $\vec{x}_{//}$ sont respectivement le vecteur d'onde et la position dans l'espace, parallèles aux interfaces du super-réseau. Le facteur $e^{i(\vec{k}_{//} \vec{x}_{//} - \omega t)}$ traduit une analyse de Fourier dans le plan parallèle aux couches, et une dépendance

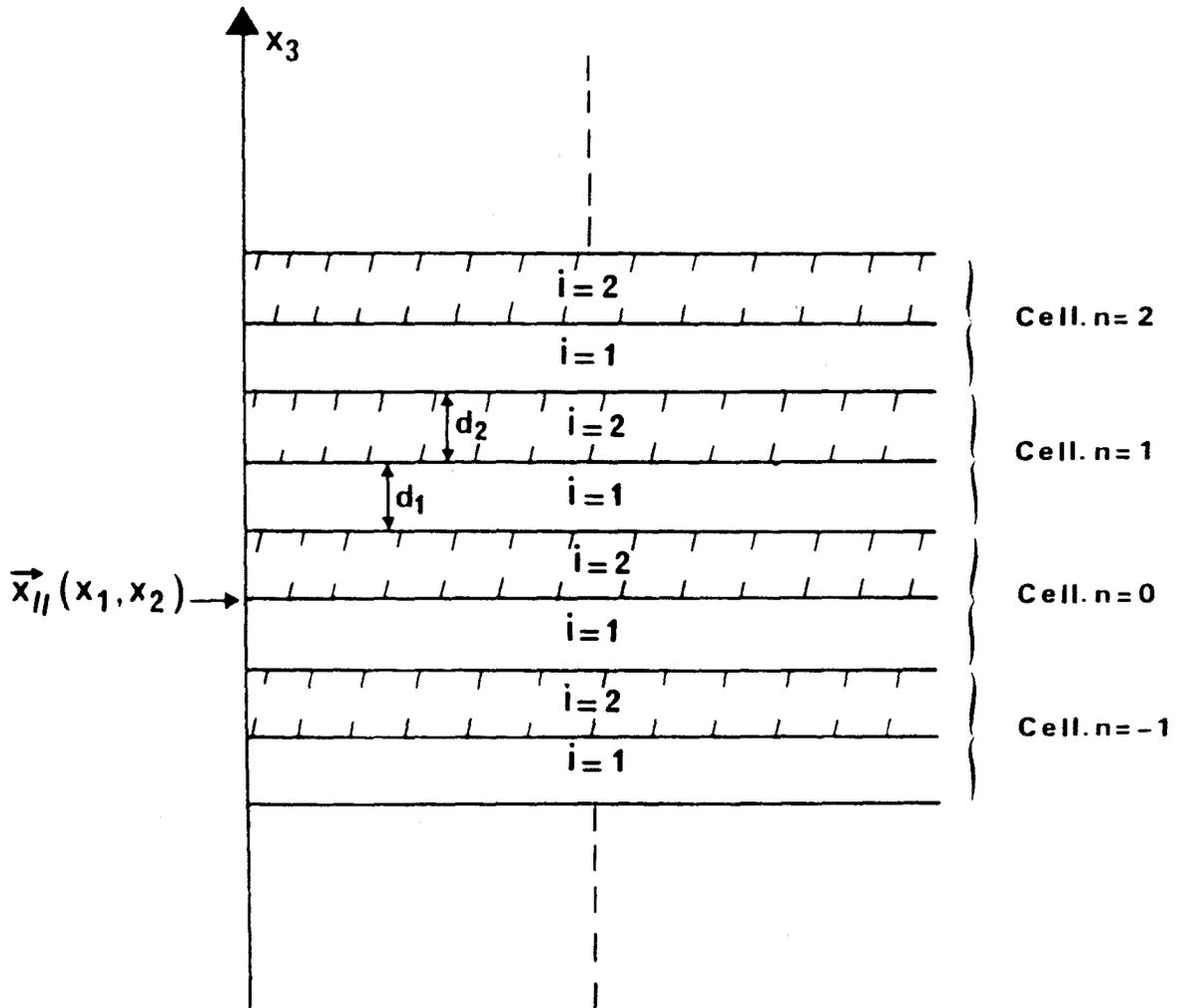


Figure III-1 Schéma de la géométrie d'un super-réseau à deux couches $i = 1$ et $i = 2$ ayant respectivement comme épaisseur $d_1 = 2h_1$ et $d_2 = 2h_2$. La période est $D = d_1 + d_2$. L'axe x_3 du super-réseau est perpendiculaire à ces couches.

harmonique avec le temps que nous avons introduite dans le champ des déplacements.

Comme indiqué au chapitre I, les modes de vibrations ayant en général une polarisation quelconque peuvent se découpler, dans certains cas, en ondes polarisées dans le plan sagittal (plan contenant x_3 et $k_{//}$) et en ondes transverses pour lesquelles les déplacements sont perpendiculaires au plan sagittal^[2,22,23] (éq. (I.31)). Dans le cas des modes de polarisation transverse auxquels on s'intéresse dans ce paragraphe, nous considérons le cas d'un super-réseau composé de cristaux hexagonaux avec des interfaces (0001) et $\vec{k}_{//}$ dirigé suivant la direction [100]. Le calcul des fonctions réponses (et par suite des densités d'états), obtenu pour un tel super-réseau, reste aussi valable pour des super-réseaux à cristaux cubiques, dans les conditions indiquées au chapitre I.

Rappelons que la fonction de Green de volume pour un milieu i est donnée par (éq. (I.33))

$$G_i(x_3, x'_3) = - \frac{1}{2\alpha_2^{(i)} C_{44}^{(i)}} e^{-\alpha_2^{(i)} |x_3 - x'_3|} \quad (\text{III. 3})$$

où $\alpha_2^{(i)}$ est défini par (éq. (I.34))

$$(\alpha_2^{(i)})^2 = k_{//}^2 \frac{C_{11}^{(i)} - C_{12}^{(i)}}{2 C_{44}^{(i)}} - \rho^{(i)} \frac{\omega^2}{C_{44}^{(i)}} \quad (\text{III.4})$$

$C_{11}^{(i)}$, $C_{12}^{(i)}$ et $C_{44}^{(i)}$ sont les constantes élastiques du matériau i . Maintenant, nous allons appliquer les conditions aux limites aux interfaces du super-réseau (éq. (I.10)) pour déduire la fonction de Green de volume d'un super-réseau infini.

Cette matrice est formellement la même que la matrice dynamique associée à une chaîne linéaire infinie d'atomes de masse M avec deux types d'interactions entre proches voisins caractérisées par les constantes β_1 et β_2 (Fig. III.2).

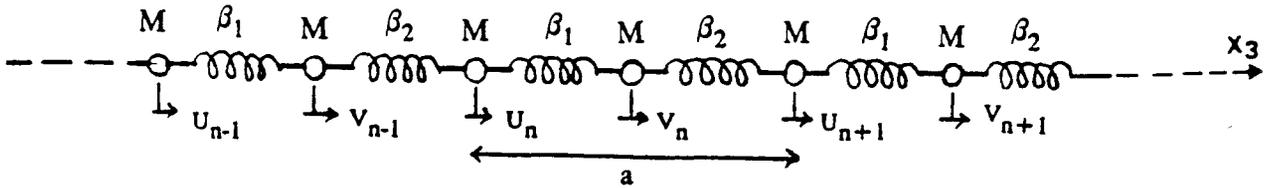


Figure III-2 Schéma de la chaîne linéaire infinie d'atomes de masse M , avec deux types d'interactions, a étant le paramètre de maille.

Par analogie avec la chaîne linéaire infinie d'atomes (voir détail de calcul dans l'appendice B), nous présentons une nouvelle façon simple d'effectuer le calcul de la relation de dispersion et des fonctions réponses dans l'espace des interfaces du super-réseau. Le principe de calcul est le suivant : en utilisant la transformée de Fourier le long de l'axe \vec{x}_3 du super-réseau, l'espace des interfaces dans l'espace réel $M_m = \{(n, i = 1, \frac{d1}{2}) ; (n, i = 1, -\frac{d1}{2})\}$ se réduit dans l'espace réciproque à deux états $\{k_3, \tilde{M}\}$ où $\tilde{M} = \{(i = 1, \frac{d1}{2}) ; (i = 1, -\frac{d1}{2})\}$. Dans cet espace à deux états uniquement, le calcul des éléments de la fonction réponse s'effectue facilement (voir appendice B), et en particulier la relation de dispersion obtenue s'écrit [21] :

$$\cos(k_3 D) = C_1 C_2 + 1/2 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) S_1 S_2 \quad (\text{III.9})$$

où C_i , S_i et F_i ($i = 1, 2$) sont donnés par l'équation (III. 7). k_3 est la composante du vecteur d'onde perpendiculaire aux interfaces ($\vec{k} \equiv (k_3, k_{//})$).

on notera $\eta(k_{//}, D, \omega)$, ou tout simplement η , la quantité (III. 9) où D est la période du super-réseau. En utilisant la transformée de Fourier réciproque et le théorème des résidus (voir Appendice B), les éléments de la fonction réponse dans l'espace des interfaces (dans l'espace réel M_m du super-réseau) deviennent :

$$\begin{aligned}
 g(n, 1, -\frac{d_1}{2}; n', 1, -\frac{d_1}{2}) &= \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1}, \\
 g(n, 1, -\frac{d_1}{2}; n', 1, \frac{d_1}{2}) &= \frac{S_2}{F_2} \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1} + \frac{S_1}{F_1} \frac{t^{|n-n'-1|+1}}{t^2-1}, \quad (III.10) \\
 g(n, 1, \frac{d_1}{2}; n', 1, -\frac{d_1}{2}) &= \frac{S_2}{F_2} \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1} + \frac{S_1}{F_1} \frac{t^{|n-n'+1|+1}}{t^2-1}, \\
 g(n, 1, \frac{d_1}{2}; n', 1, \frac{d_1}{2}) &= \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1}.
 \end{aligned}$$

Dans ces expressions t ne représente rien d'autre que $e^{ik_3 D}$ et est défini par

$$t = \begin{cases} \eta + \sqrt{\eta^2 - 1} & \text{si } \eta < -1 \\ \eta + i\sqrt{1 - \eta^2} & \text{si } |\eta| \leq 1 \\ \eta - \sqrt{\eta^2 - 1} & \text{si } \eta > 1. \end{cases} \quad (III. 11)$$

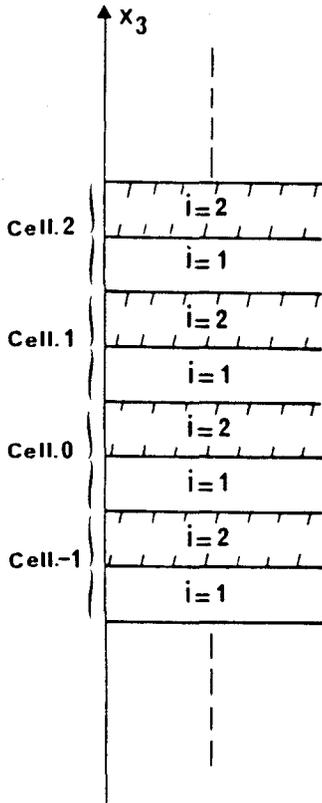
En utilisant les équations (I.9) et (III.10), on peut déduire l'expression complète de la fonction réponse du super-réseau infini (voir Appendice B).

C - Fonction de Green d'un super-réseau semi-infini :

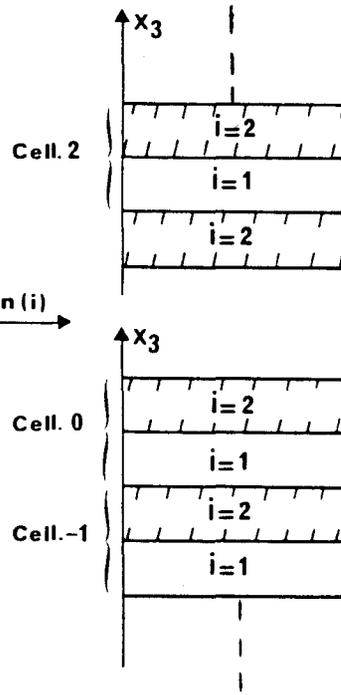
On aborde le cas du super-réseau semi-infini en poursuivant l'analogie avec la chaîne linéaire où la surface est réalisée en coupant l'interaction entre deux atomes proches voisins. De même, l'interface entre le super-réseau et un substrat est obtenue en changeant l'élément de matrice diagonal sur l'atome de surface dans la chaîne linéaire. L'addition d'une couche d'encapsulation à la surface du super-réseau est équivalente à l'adsorption d'un atome à la surface de la chaîne linéaire. Pour clarifier davantage cette analogie, considérons la géométrie de la figure (III-3c) où on suppose que le super-réseau occupe le demi-espace des x_3 négatifs, la couche superficielle ($i = 0$) étant une couche formée par un matériau différent de ceux du super-réseau, avec des paramètres élastiques $C_{ij}^{(0)}$, $\rho^{(0)}$ et une épaisseur $d_0 = 2h_0$. Ce système est obtenu à partir du super-réseau infini par les deux opérations suivantes :

i) on détache la lame ($n = 1, i = 1$) afin d'obtenir deux super-réseaux semi-infinis découplés (fig. III-3a,b)

ii) on change la couche ($n = 0, i = 2$) par la couche superficielle ($i = 0$) (fig. III-3b, c)



Opération (i)



Opération (ii)

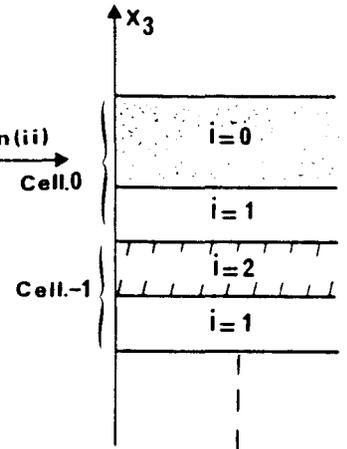


Fig. III-3a Schéma de la géométrie du super-réseau infini

Fig. III-3b Schéma de la géométrie de deux super-réseau x semi-infinis découplés.

Fig. III-3c Schéma de la géométrie d'un super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulation en surface.

Le calcul de la fonction réponse dans l'espace des interfaces M_m du super-réseau (fig. III-3c), nécessite d'écrire la perturbation qui conduit à sa création.

Soit \vec{d} la fonction de Green du super-réseau final (Fig. III.3.c) son inverse $\vec{d}^{-1}(M_m, M_m)$ dans l'espace des interfaces M_m est donné par les équations (I.10) et (III.5)

$$\vec{d}^{-1}(M_m, M_m) = \begin{bmatrix} A_0 & B_0 & & & \\ B_0 & A_0 + A_1 & B_1 & & \\ & B_1 & A_1 + A_2 & B_2 & \\ & & B_2 & A_1 + A_2 & B_1 \\ & & & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (\text{III.12})$$

où A_0 et B_0 sont définis de la même façon que les A_i et B_i donnés par l'éq. (III.6).

$\overleftrightarrow{d}^{-1}(M_m, M_m)$ ressemble à l'Hamiltonien d'une chaîne linéaire semi-infinie.

Il se déduit de celui $\overleftrightarrow{g}^{-1}(M_m, M_m)$ d'une chaîne infinie par une perturbation

$\overleftrightarrow{V}(M_s, M_s) = \overleftrightarrow{d}^{-1}(M_m, M_m) - \overleftrightarrow{g}^{-1}(M_m, M_m)$ représentant les deux opérations i) et ii) ci-dessus. Cette perturbation affecte un ensemble de trois états

$M_s = \left\{ (n = 0, i = 1, \frac{d_1}{2}), (n = 1, i = 1, -\frac{d_1}{2}), (n = 1, i = 1, \frac{d_1}{2}) \right\}$, et peut s'écrire

matriciellement :

$$\overleftrightarrow{V}(M_s, M_s) = \begin{bmatrix} \frac{-F_0 C_0}{S_0} + \frac{F_2 C_2}{S_2} & \frac{F_0}{S_0} - \frac{F_2}{S_2} & 0 \\ \frac{F_0}{S_0} - \frac{F_2}{S_2} & \frac{-F_0 C_0}{S_0} + \frac{F_1 C_1}{S_1} + \frac{F_2 C_2}{S_2} & \frac{-F_1}{S_1} \\ 0 & \frac{-F_1}{S_1} & \frac{F_1 C_1}{S_1} \end{bmatrix} \quad (\text{III.13})$$

La connaissance des éléments de la fonction de Green $\overleftrightarrow{g}(M_m, M_m)$ dans l'espace des interfaces (éq. (III.10)) et de ceux de l'opérateur de perturbation $\overleftrightarrow{V}(M_s, M_s)$, nous permet de déduire (éqs. (I.6) et (I.9)) tous les éléments de la fonction de Green nécessaires pour le calcul de la densité d'états d'un super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulation à la surface (voir appendice B).

III - 2-2 DENSITES D'ETATS

Connaissant les fonctions réponse données dans l'appendice B, on obtient pour une valeur donnée de $\vec{k}_{//}$, les densités d'états locales et totales pour un super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulation. Nous indiquerons à la fin de ce paragraphe, comment on peut obtenir à partir de ces quantités des résultats similaires pour deux cas limites, à savoir le cas de l'interface entre le super-réseau et le substrat homogène, et celui du super-réseau semi-infini sans la couche d'encapsulation.

A - Densités d'états locales

La densité d'états locale sur le plan (n, i, x_3) est donnée par

$$n(\omega^2, k_{//}; n, i, x_3) = -\frac{\rho^{(i)}}{\pi} \text{Im } d^+(\omega^2, k_{//}; n, i, x_3; n, i, x_3) \quad (\text{III.14})$$

où

$$d^+(\omega^2) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} d(\omega^2 + i\varepsilon) \quad (\text{III.15})$$

et $d(\omega^2)$ est la fonction réponse dont les éléments sont donnés dans l'appendice B. Les densités d'états peuvent aussi être données en fonction de ω , plutôt que ω^2 , en utilisant la relation bien connue $n(\omega) = 2\omega n(\omega^2)$. A partir des éléments de la fonction réponse donnés dans l'appendice B, nous obtenons l'expression explicite suivante pour la densité d'états locale à la surface libre du super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulation d'épaisseur d_0 ($n = 0, i = 0$).

$$n_s(\omega^2, k_{//}; 0, 0, \frac{d_0}{2}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} + \frac{S_0}{F_0 C_0} (C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t) \right] \Delta^{-1} \quad (\text{III.16})$$

où C_0, S_0, F_0 sont définis pour $i = 0$ de façon similaire aux C_i, S_i, F_i donnés par l'éq. (III.7); t est défini par l'équation (III.11), et Δ est donné par

$$\Delta = C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1} S_1 S_2 - t^{-1} - \frac{F_0 S_0}{C_0} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right). \quad (\text{III.17})$$

De la même manière, la densité d'état locale à l'interface entre le super-réseau semi-infini et la couche d'encapsulation est donnée par

$$n_i(\omega^2, k_{//}; 0, 0, -\frac{d_0}{2}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \Delta^{-1} \quad (\text{III.18})$$

B - Densités d'états totales

La densité d'états totale, pour une valeur donnée de $k_{//}$, est obtenue en intégrant sur x_3 la densité d'états locale et en sommant sur n et i . Nous nous intéressons plus particulièrement à la différence entre la densité d'états du super-réseau semi-infini recouvert par la couche d'encapsulation et celle d'un super-réseau infini ayant le même nombre de couches que le super-réseau semi-infini.

Cette variation $\Delta n(\omega^2)$ peut être écrite, comme la somme des variations de densités d'états $\Delta_1 n(\omega^2)$ et $\Delta_2 n(\omega^2)$ des couches 1 et 2, et de la densité d'états $n_0(\omega^2)$ de la couche d'encapsulation.

$$\Delta n(\omega^2) = \Delta_1 n(\omega^2) + \Delta_2 n(\omega^2) + n_0(\omega^2) \quad (\text{III.19})$$

où

$$\Delta_1 n(\omega^2) = \frac{-\rho^{(1)}}{\pi} \sum_{n=-\infty}^0 \text{Im} \int_{-d_1/2}^{+d_1/2} [d(n,1,x_3; n,1,x_3) - g(n,1,x_3; n,1,x_3)] dx_3, \quad (\text{III.20})$$

$$\Delta_2 n(\omega^2) = \frac{-\rho^{(2)}}{\pi} \sum_{n=-\infty}^{-1} \text{Im} \int_{-d_2/2}^{+d_2/2} [d(n,2,x_3; n,2,x_3) - g(n,2,x_3; n,2,x_3)] dx_3, \quad (\text{III.21})$$

$$n_0(\omega^2) = \frac{-\rho^{(0)}}{\pi} \text{Im} \int_{-d_0/2}^{+d_0/2} d(0,0,x_3; 0,0,x_3) dx_3, \quad (\text{III.22})$$

\overleftrightarrow{d} et \overleftrightarrow{g} sont respectivement les fonctions réponses du super-réseau semi-infini avec la couche d'encapsulation et du super-réseau infini. A l'aide des expressions explicites des fonctions réponses données dans l'appendice B, nous obtenons :

$$\Delta_1 n(\omega^2) = \frac{-\rho^{(1)}}{\pi} \text{Im} \frac{t}{(t^2-1)^2} \left\{ \frac{S_1}{\alpha_1 F_1} \left[C_2 S_1 + \frac{1}{2} C_1 S_2 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{d_1 S_2}{2 F_2} \left(1 - \frac{F_2^2}{F_1^2} \right) \right\} \frac{Y}{\Delta}, \quad (\text{III.23})$$

$$\Delta_2 n(\omega^2) = \frac{-\rho^{(2)}}{\pi} \text{Im} \frac{t^2}{(t^2-1)^2} \left\{ \frac{S_2}{\alpha_2 F_2} \left[C_1 S_2 + \frac{1}{2} C_2 S_1 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{d_2 S_1}{2 F_1} \left(1 - \frac{F_1^2}{F_2^2} \right) \right\} \frac{Y}{\Delta}, \quad (\text{III.24})$$

$$n_0(\omega^2) = \frac{-\rho^{(0)}}{2\pi} \text{Im} \left\{ \frac{S_0}{\alpha_0 C_0} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) + d_0 \left[\left(C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t \right) \frac{S_0}{F_0 C_0} + \frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right] \right\} \frac{1}{\Delta} \quad (\text{III.25})$$

où

$$Y = C_2 - C_1 t - \frac{F_0 S_0}{C_0} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right). \quad (\text{III.26})$$

Aux limites des bandes de volume du super-réseau données par $t(\omega_0) = \pm 1$, le développement limité au premier ordre en $(\omega - \omega_0)$ donne

$$\frac{t}{(t^2 - 1)^2} = \frac{1}{8} \left(\left(\frac{d\eta}{d\omega} \right)_{\omega_0} \right)^{-1} \left[P \left(\frac{1}{\omega - \omega_0} \right) - i\pi \delta(\omega - \omega_0) \right] \quad (\text{III.27})$$

on en déduit alors (voir appendice B)

$$\Delta_1 n(\omega) + \Delta_2 n(\omega) = -\frac{1}{4} \delta(\omega - \omega_0). \quad (\text{III.28})$$

Ainsi, la création d'un super-réseau semi-infini à partir d'un super-réseau infini, donne lieu à des pics δ de poids $-\frac{1}{4}$ dans la densité d'états aux limites des bandes de volume du super-réseau.

C - Etats localisés

Lorsque le dénominateur de $\Delta n(\omega^2)$ s'annule pour des fréquences situées dans les gaps du super-réseau infini, on obtient des états localisés dont les fonctions d'ondes présentent une décroissance exponentielle dans le super-réseau. L'expression explicite donnant ces états localisés est

$$C_1 S_2 \left(\frac{F_0 S_0}{F_2 C_0} - \frac{F_2 C_0}{F_0 S_0} \right) + S_1 S_2 \left(\frac{F_1}{F_2} - \frac{F_2}{F_1} \right) + C_2 S_1 \left(\frac{F_0 S_0}{F_1 C_0} - \frac{F_1 C_0}{F_0 S_0} \right) = 0 \quad (\text{III.29})$$

avec la condition suivante

$$\left| C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1} S_1 S_2 - \frac{F_0 S_0}{C_0} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right| > 1. \quad (\text{III.30})$$

D - Limite d'un super-réseau semi-infini sans la couche d'encapsulage

Lorsque l'épaisseur de la couche d'encapsulage tend vers zéro, la quantité S_0 tend vers zéro dans les résultats précédents (III.16) (III.23) (III.24) (III.28) (III.29) et (III.30). Ceux-ci décrivent alors le cas d'un super-réseau semi-infini terminé par la couche complète $i = 1$ à la surface. Remarquons dans l'équation (III.25) que dans cette limite $n_0(\omega)$ s'annule.

Dans la limite où la couche d'encapsulation $i = 0$ est de même nature que la couche $i = 2$ du super-réseau, mais d'épaisseur $d_0 = d_s < d_2$, les mêmes résultats décrivent le cas d'un super-réseau semi-infini terminé par une couche de surface incomplète de type $i = 2$. Dans ce cas, on peut calculer la variation de densité d'états entre un tel super-réseau semi-infini et le même volume du super-réseau infini, en intégrant dans l'éq. (III.21) $\Delta n(\omega^2)$ jusqu'à la dernière couche de surface $\frac{d_s}{2}$ plutôt que jusqu'à $\frac{d_2}{2}$, et en posant $n_0(\omega^2) = 0$.

Un résultat original est obtenu en considérant la variation de la densité d'états $\Delta n_c(\omega^2)$ lorsqu'on clive un super-réseau infini en deux super-réseaux semi-infinis complémentaires. En effet, on peut montrer à partir de l'éq. (II.9) que $\Delta n_c(\omega^2)$ peut être obtenue à partir des éléments de la fonction réponse de surface de deux super-réseaux semi-infinis complémentaires $d_1(0, 2, d_s; 0, 2, d_s)$ et $d_2(0, 2, d_s; 0, 2, d_s)$:

$$\Delta n_c(\omega^2) = + \frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega^2} \text{Im} \log \det [d_1(0, 2, d_s; 0, 2, d_s) + d_2(0, 2, d_s; 0, 2, d_s)] \quad (\text{III.31})$$

Puis on démontre analytiquement que $\Delta n_c(\omega^2)$ est égale à zéro à l'intérieur des bandes de volume du super-réseau, et qu'à toutes les limites de ces bandes, $\Delta n_c(\omega)$ présente des pics deltas de poids $-1/2$ (voir appendice B). Ces deux résultats associés à la nécessaire conservation du nombre total d'états permettent d'aboutir à une règle générale; à savoir : lorsqu'on considère deux super-réseaux semi-infinis complémentaires, obtenus à partir du clivage d'un super-réseau infini, nous avons autant de modes localisés que de minigaps, pour chaque valeur de $\vec{k}_{//}$.

E - Limite d'un super-réseau semi-infini en contact avec un substrat homogène

Lorsque l'épaisseur d_0 de la couche d'encapsulation tend vers l'infini, la quantité $\frac{S_0}{C_0}$ tend vers 1 dans les expressions précédentes qui décrivent alors le cas de l'interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat homogène. En particulier, les expressions suivantes restent valables : équations (III.29 - III.30) donnant les états localisés d'interface, (III.28) donnant les pics δ de poids $-\frac{1}{4}$ aux

limites des bandes de volume du super-réseau, ainsi que (III.23 - III.24) donnant la variation de la densité d'états dans l'espace occupé par le super-réseau. Dans l'espace du substrat semi-infini, plutôt que de calculer $n_0(\omega^2)$, on considère la variation de la densité d'états $\Delta_0 n(\omega^2)$ entre le substrat en contact avec le super-réseau et le même volume du substrat infini, à savoir

$$\Delta_0 n(\omega^2) = -\frac{\rho^{(0)}}{\pi} \operatorname{Im} \int_0^{\infty} [d_0(x_3, x_3) - G_0(x_3, x_3)] dx_3 \quad (\text{III.32})$$

où

$$d_0(x_3, x'_3) = \frac{-1}{2F_0} e^{-\alpha_2^{(0)} |x_3 - x'_3|} + \left[\frac{1}{2F_0} + \frac{1}{\Delta_0} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right] e^{-\alpha_2^{(0)} (x_3 + x'_3)} \quad (\text{III.33})$$

$$\Delta_0 = C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1} S_1 S_2 - t^{-1} - F_0 \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right), \quad (\text{III.34})$$

et

$$G_0(x_3, x'_3) = \frac{-1}{2 \alpha_2^{(0)} C_{44}^{(0)}} e^{-\alpha_2^{(0)} |x_3 - x'_3|} \quad (\text{III.35})$$

Nous obtenons ainsi

$$\Delta_0 n(\omega^2) = -\frac{\rho^{(0)}}{\pi} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{2\alpha_0} \left[\frac{1}{2F_0} + \frac{1}{\Delta_0} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right] \right\}. \quad (\text{III.36})$$

Notons que la densité d'états locale à l'interface super-réseau-substrat s'écrit :

$$n'_i(\omega^2) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \Delta_0^{-1} \right]. \quad (\text{III.37})$$

D'autre part, il est intéressant aussi dans ce cas, de calculer la variation de densité d'états $\Delta_{nI}^{(1)}(\omega^2)$ lorsqu'on couple entre eux le super-réseau semi-infini et le substrat considérés séparément. $\Delta_{nI}^{(1)}(\omega^2)$ peut être obtenue de la même manière que précédemment (Eq. (III.31)), où $d_2(0, 2, d_s; 0, 2, d_s)$ représente maintenant la fonction réponse à la surface d'un substrat homogène semi-infini.

Considérons maintenant le super-réseau semi-infini complémentaire du précédent (obtenu à partir du clivage du même super-réseau infini) et calculons

la variation de la densité d'états $\Delta_{nI}^{(2)}(\omega^2)$ correspondant au couplage de ce super-réseau semi-infini avec le substrat. Nous aboutissons alors à une règle générale (voir appendice B), à savoir la somme des variations de densités d'états de ces deux systèmes complémentaires $\Delta_{nIc}(\omega^2) = [\Delta_{nI}^{(1)}(\omega^2) + \Delta_{nI}^{(2)}(\omega^2)]$ est égale à zéro pour des fréquences ω appartenant à la fois aux bandes de volume du super-réseau et à celle du substrat. En se rappelant le résultat (paragraphe D) concernant l'existence des états de surface sur les deux super-réseaux semi-infinis complémentaires, on peut s'attendre alors à des résonances associées à l'interface super-réseau - substrat qui tombent à l'intérieur des gaps du super-réseau tout en étant dans la bande de volume du substrat.

F - Récapitulation des règles générales sur l'existence des états localisés et résonnants

Nous pouvons récapituler les règles générales énoncées précédemment sur l'existence des états localisés et résonnants, en considérant deux super-réseaux semi-infinis complémentaires, obtenus par clivage d'un super-réseau infini, le long d'un plan parallèle aux couches.

Nous avons démontré d'abord analytiquement, l'existence de pics deltas de poids - 1/4 dans la variation de densité d'états, aux limites des bandes de volume de chaque super réseau semi-infini (soit un poids de - 1/2 pour les deux super-réseaux complémentaires). D'autre part, on démontre qu'à l'intérieur de ces bandes de volume la variation de densité d'états est nulle. Ces deux résultats ensemble montrent qu'on perd un état (- 1) à chaque minibande du super-réseau. En tenant compte de la nécessaire conservation du nombre d'états, on déduit qu'il doit exister autant de modes localisés de surface que de minigaps (ou minibandes).

Couplons maintenant chacun des deux super-réseaux complémentaires décrits précédemment à un substrat homogène. Dans ce cas, on démontre aussi qu'il existe des pics δ de poids - 1/2 aux limites des bandes de volume des super-réseaux. D'autre part, la variation de la densité d'états est nulle pour des fréquences ω appartenant simultanément aux bandes de volume du super-réseau et à celle du substrat. Ces deux résultats ensemble montrent qu'il y a perte d'un état (- 1) pour chaque minibande du super-réseau située dans la bande de volume de substrat. En tenant compte toujours de la nécessaire conservation du nombre

d'états, on aboutit à une deuxième règle générale à savoir: l'existence de résonances qui tombent à l'intérieur des gaps du super-réseau tout en étant dans la bande de volume du substrat.

III - 2-3 APPLICATIONS ET DISCUSSIONS DES RESULTATS

Dans ce qui suit, des résultats spécifiques seront présentés pour des super-réseaux semi-infinis Y - Dy^[32] ou GaAs-AlAs, ainsi que pour des super-réseaux GaAs-AlAs recouverts par une couche d'encapsulation de Si à la surface. Les tableaux suivants donnent les valeurs des constantes élastiques et des densités de ces cristaux.

	C_{44} ($\times 10^{10} \text{N/m}^2$)	ρ (Kg/m^3)
GaAs	5.94	5316.9
AlAs	5.42	3721.8
Si	7.96	2330

Tableau III-1: Paramètres élastiques de GaAs, AlAs et Si

	C_{11} (10^{10}N/m^2)	C_{12} ($\times 10^{10} \text{N/m}^2$)	C_{44} ($\times 10^{10} \text{N/m}$)	ρ (Kg/m^3)
Y	7.79	2.85	2.431	4450
Dy	7.31	2.53	2.40	8560

Tableau III-2 : Paramètres élastiques de Y et Dy

A - Super-réseau semi-infini

Les applications présentées ici se réfèrent à des super-réseaux GaAs - AlAs avec $d_1 = d_2$ et la période $D = d_1 + d_2$. La figure III-4 donne la courbe de dispersion des bandes de volume et des modes de surface de deux super-réseaux semi-infinis complémentaires, obtenus en coupant un super-réseau infini au niveau d'une couche de GaAs, de telle façon que les épaisseurs de la couche de GaAs sur chaque partie semi-infinie soient respectivement $d_s = 0.3 d_2$ et $d_s = 0.7 d_2$. Sur cette figure les zones hachurées correspondent aux bandes de volume (éq. (III.9)), où les ondes acoustiques se propagent à travers le super-réseau. Ces bandes sont séparées par des gaps où peuvent exister les modes localisés de surface. On

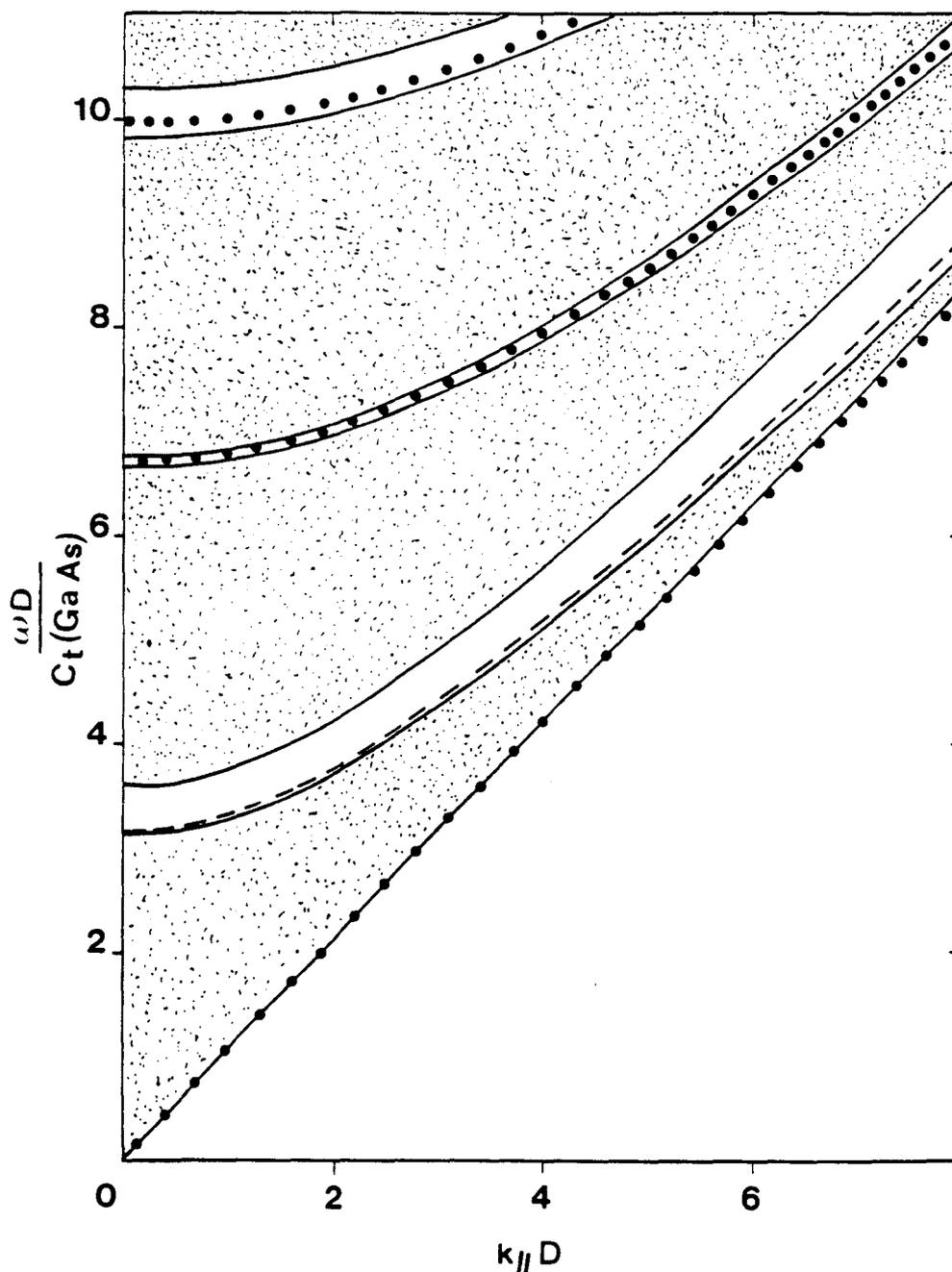


Figure III-4 Ondes élastiques transverses de volume et de surface dans un super-réseau GaAs-AlAs. Les courbes représentent $\omega D/C_t(\text{GaAs})$ en fonction de $k_{//} D$, où ω est la fréquence, $k_{//}$ le vecteur de propagation parallèle aux interfaces, $C_t(\text{GaAs})$ la vitesse du son transverse dans GaAs, et $D = d_1 + d_2$ la période du super-réseau. Les domaines hachurés représentent les bandes de volume. Les lignes en pointillés représentent les phonons de surface pour le super-réseau semi-infini terminé par une couche de GaAs d'épaisseur $d_s = 0.7 d_2$. Les lignes discontinues représentent les phonons de surface pour le super-réseau complémentaire terminé par une couche de GaAs d'épaisseur $d_s = 0.3 d_2$.

observe qu'il existe un état de surface dans chaque gap associé soit à un super-réseau semi-infini soit à son complémentaire; ce résultat est en conformité avec la règle générale annoncée au sous-paragraphe III-2-2D. On peut aussi noter que les modes de surface sont très dépendants de l'épaisseur de la couche de surface de GaAs; nous reviendrons sur ce point dans la discussion de la figure III-6.

Sur la figure III-5, nous illustrons pour $k_{//} D = 6$, la variation de la densité d'états vibrationnelle entre le super-réseau semi-infini terminé par une couche de GaAs d'épaisseur $d_s = 0.7 d_2$ et le même volume d'un super-réseau infini. Les fonctions deltas qui apparaissent sur cette figure sont élargies en ajoutant à la fréquence une petite quantité imaginaire. Les fonctions δ associées aux états localisés de surface sont notés L_i , et les fonctions δ de poids $(-\frac{1}{4})$, situées respectivement en bas et en haut des bandes de volume, sont notées B_i (comme bottom) et T_i (comme top). Ces fonctions δ élargies B_i et T_i de poids $(-\frac{1}{4})$ n'ont pas toutes exactement la même forme: ceci est dû aux divergences en $(\omega - \omega_{T_i})^{-1/2}$ ou $(\omega - \omega_{B_i})^{-1/2}$ qui existent près des limites de bandes dans les densités d'états des systèmes à une dimension. A part les pics deltas mentionnés ci-dessus et le comportement particulier aux limites des bandes de volume, la variation de la densité d'états $\Delta n(\omega, k_{//})$ ne révèle pas d'autre effet significatif à l'intérieur des bandes de volume du super-réseau.

Nous avons remarqué (Fig. III-4) que les états de surface sont très sensibles à l'épaisseur d_s de la couche de surface. Nous présentons sur la figure III-6 la variation de ces fréquences en fonction de $\frac{d_s}{d_2}$, pour $k_{//} D = 3$, aussi bien pour une couche de surface de GaAs (traits discontinus) que pour une couche de surface d'AlAs (traits pleins). Lorsque $\frac{d_s}{d_2} \leq 1$, on peut observer sur cette figure qu'il existe toujours un état de surface dans chaque gap, pour toute combinaison de deux super-réseaux complémentaires tel que $d_{s1} + d_{s2} = d_2$. On peut noter aussi que pour une fréquence donnée, les états de surface se répètent périodiquement en fonction de d_s . D'autre part, lorsque d_s augmente, les fréquences des modes de surface décroissent jusqu'à ce que les courbes correspondantes pénètrent dans les bandes de volume (zones hachurées) et deviennent des résonances ; en même temps de nouvelles branches localisées sont extraites des bandes de volume. Cependant, les modes résonnants sont bien définis dans la densité d'états

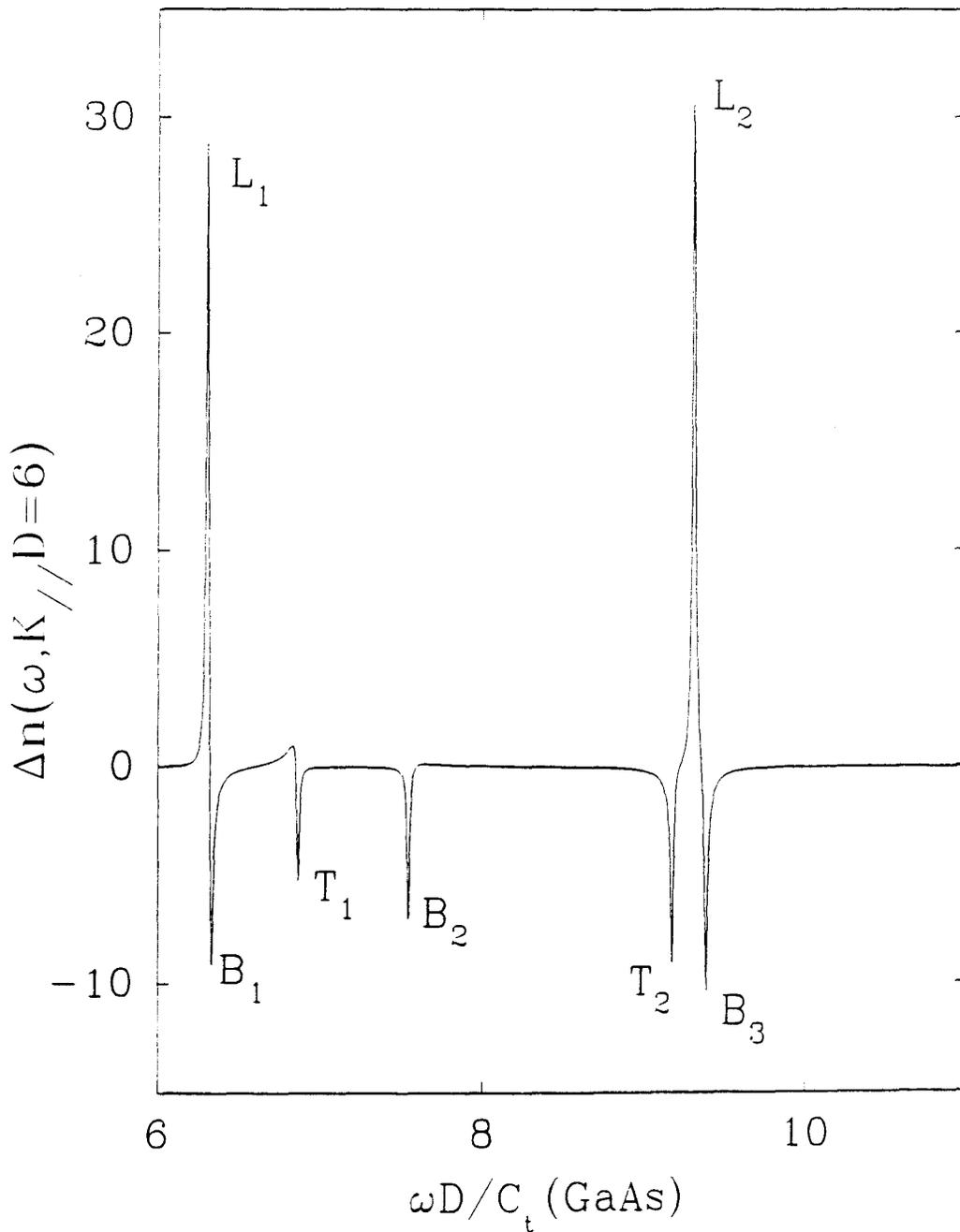


Figure III-5 La variation de la densité d'états (en unités de $D/C_t(\text{GaAs})$) entre le super-réseau semi-infini terminé par une couche de GaAs d'épaisseur $d_s = 0.7 d_2$ et le même volume d'un super-réseau infini, en fonction de $\omega D / C_t(\text{GaAs})$, pour $k_{//} D = 6$. B_i et T_i réfèrent respectivement aux pics deltas de poids $(-1/4)$ situés en bas et en haut des bandes de volume et L_i indiquent les modes localisés de surface.

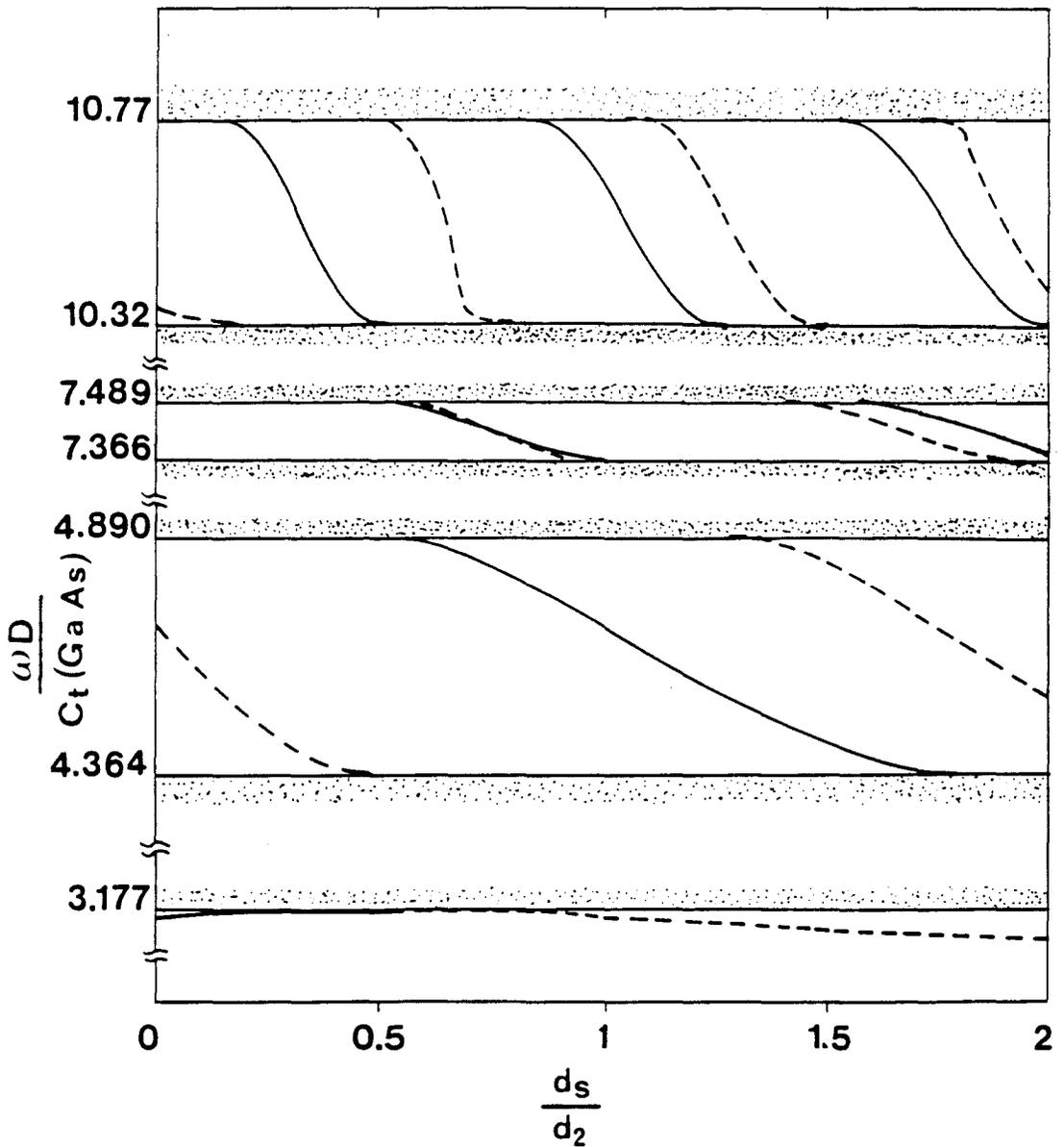


Figure III-6 Variation de la fréquence réduite $\omega D/C_t(\text{GaAs})$ des modes de surface des super-réseaux semi-infinis GaAs-AlAs en fonction de d_s/d_2 , pour $k_{//}D = 3$. d_s est l'épaisseur de la couche de surface qui peut être GaAs (traits discontinus) ou AlAs (traits pleins). Les régions hachurées représentent les trois premières bandes de volume du super-réseau.



uniquement tant que leurs fréquences restent au voisinage des limites des bandes de volume ; en pénétrant dans les bandes, ils s'évanouissent très rapidement.

B - Super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulation

Maintenant nous supposons qu'une couche d'encapsulation de Si, d'épaisseur d_0 , est déposée sur un super-réseau GaAs - AlAs terminé par une couche complète de GaAs. La dispersion des modes localisés et résonnants induits par la couche d'encapsulation d'épaisseur $d_0 = 4 D$ est représentée sur la figure III-7. Suivant leur fréquence, ces modes peuvent présenter différents comportements dans la direction perpendiculaire aux interfaces : ils peuvent être propagatifs à la fois dans le super-réseau et dans la couche d'encapsulation, ou se propager dans l'un et être évanescents dans l'autre, ou être évanescents des deux côtés de l'interface super-réseau-couche d'encapsulation. Les modes localisés d'interface correspondant à ce dernier cas sont notés par l'indice i sur la figure III-7.

La variation de la densité d'états $\Delta n(\omega)$ entre ce super-réseau recouvert par une couche de Si et le même volume d'un super-réseau infini est calculé suivant le raisonnement donné dans le paragraphe III-2-2B. $\Delta n(\omega)$ est représenté sur la figure III-8 en fonction de $\omega D / C_t(\text{GaAs})$, pour $k_{//} D = 3$. B_i et T_i se réfèrent, dans ce cas aussi, aux pics δ de poids $(-\frac{1}{4})$ qui apparaissent aux limites des bandes de volume du super-réseau ; L_i et R_i correspondent respectivement aux modes localisés et résonnants induits par la couche d'encapsulation de Si. La résonance la plus intense R_2 est située vers les basses fréquences, juste au-dessus de la vitesse du son du Si. Les autres résonances sont moins intenses, spécialement aux hautes fréquences où la séparation entre les branches successives augmente.

A l'aide des équations (III.16) et (III.18), nous avons étudié aussi les densités d'états locales et trouvé qu'elles dépendent de façon importante de la position du plan sur lequel elles sont calculées. En particulier, nous avons trouvé que la densité d'états locale sur la surface de la couche d'encapsulation de Si (voir figure III-9a) présente le même comportement que la densité d'états totale illustrée sur la figure III-8. Par contre la densité d'états locale à l'interface super-réseau - couche d'encapsulation (fig. III-9b) est assez différente. On y observe, en particulier, des creux aux fréquences de résonance correspondant à la densité d'états locale à

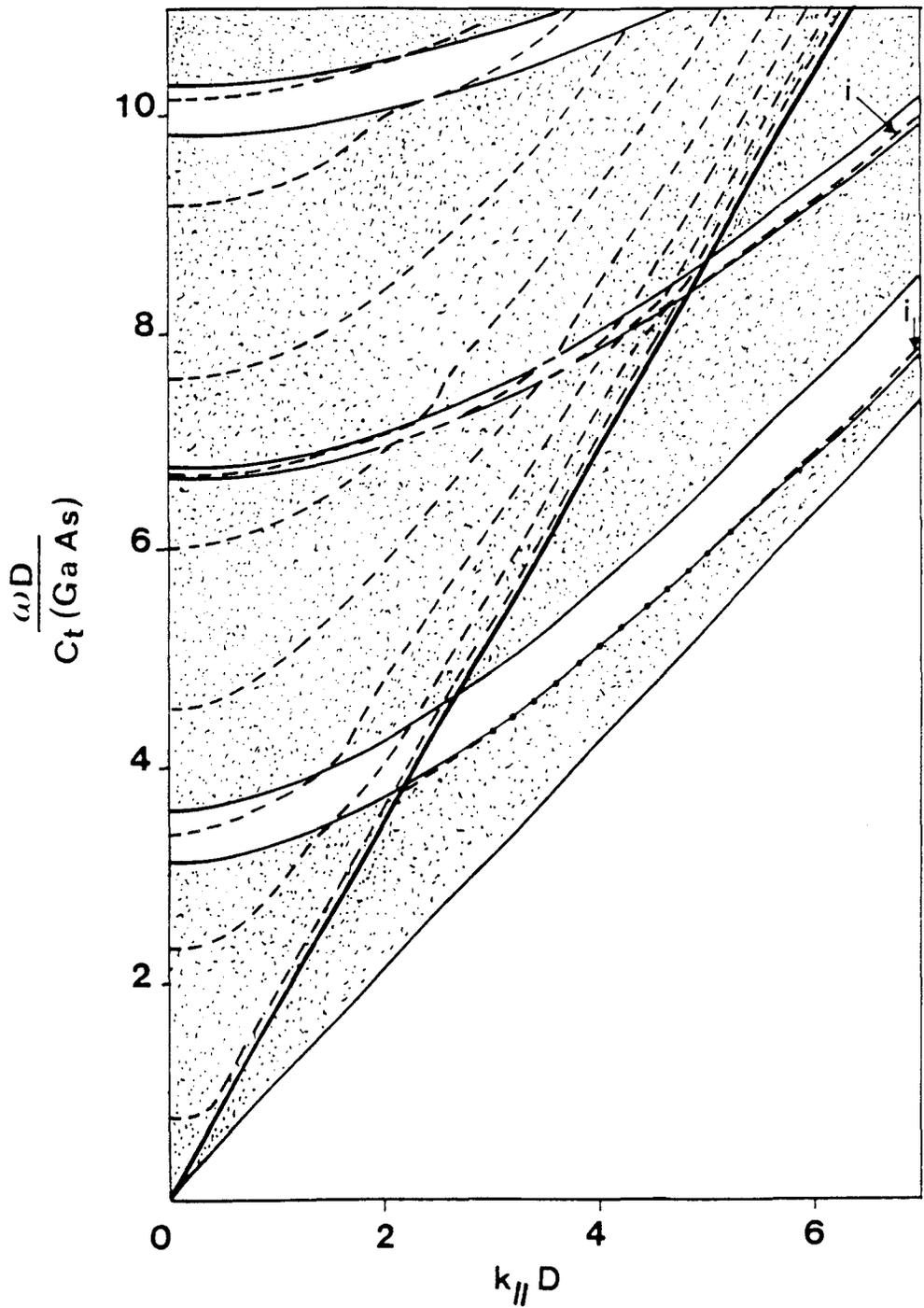


Figure II -7 Dispersion des modes localisés et résonnants (traits discontinus) induits par une couche d'encapsulation de Si d'épaisseur $d_0 = 4D$, déposée sur un super-réseau semi-infini GaAs-AlAs terminé par une couche complète de GaAs. Les domaines hachurées représentent les bandes de volume du super-réseau. La droite épaisse indique le bas de la bande de volume du Si. Les branches notées (i) correspondent aux modes localisés à l'interface super-réseau - couche d'encapsulation.



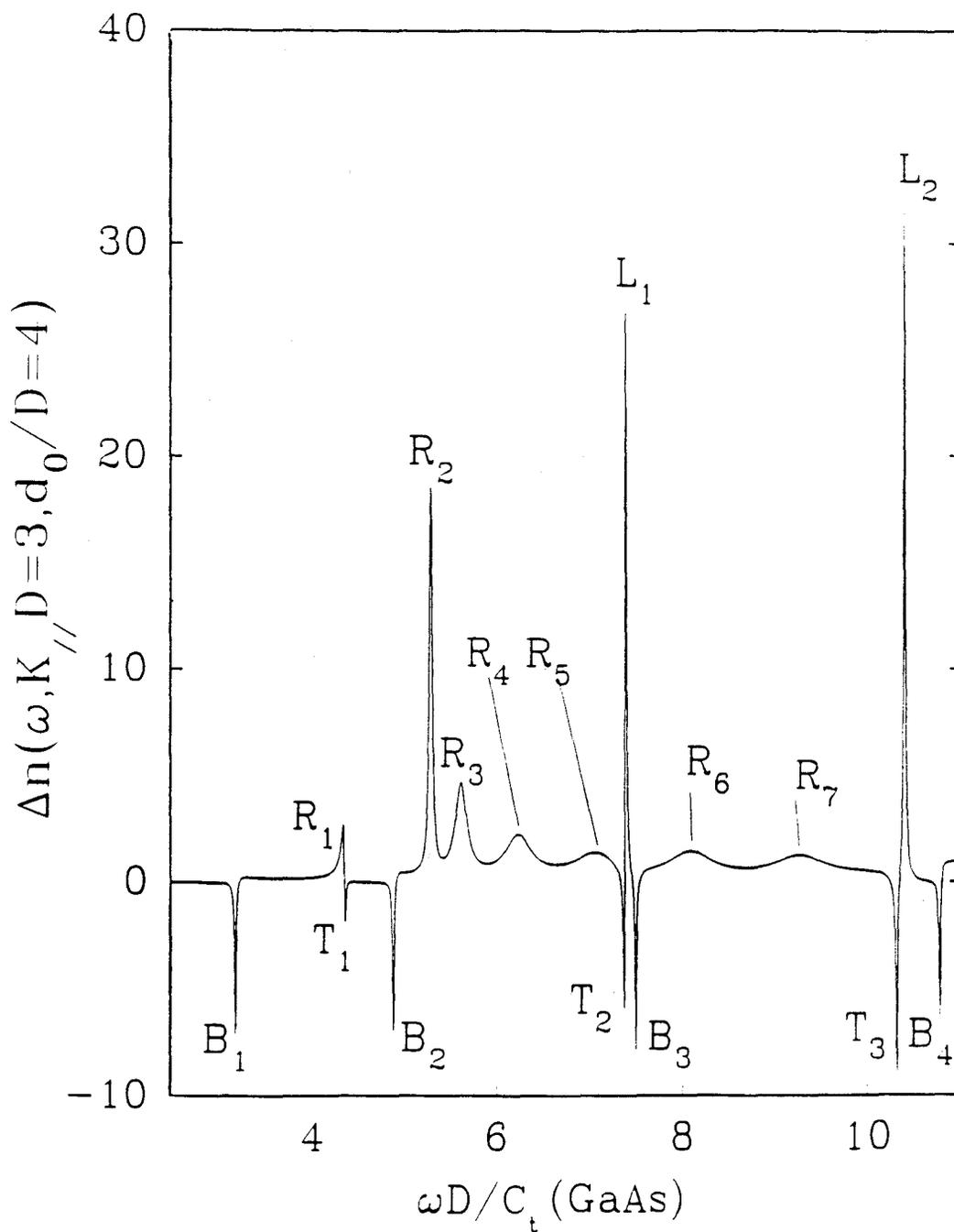


Figure III-8 Densité d'états (en unités de D/C_t (GaAs)) correspondant au cas décrit dans la figure III-7, pour $k_{//} D = 3$. La contribution de la même quantité de volume du super-réseau GaAs-AlAs est soustraite. B_i, T_i et L_i ont la même signification que dans la figure III-5, R_i représente les modes résonnants.

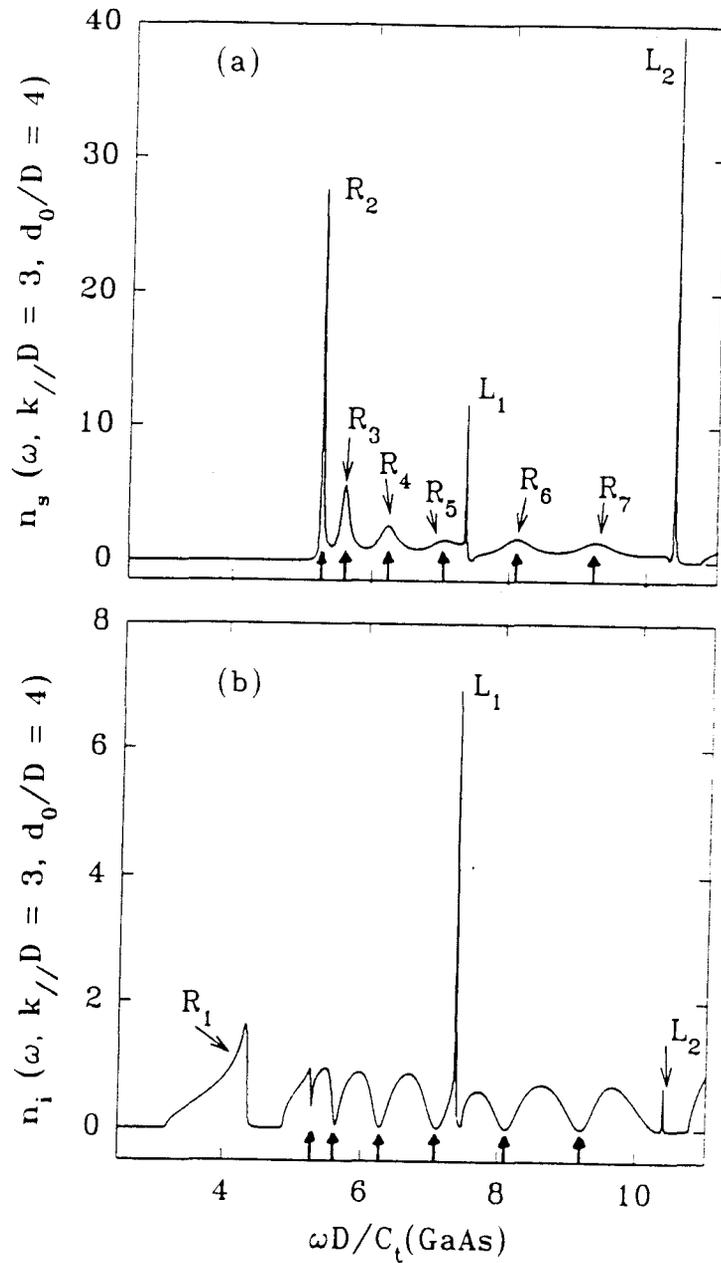


Figure III-9 Densité d'état locale à la surface de la couche d'encapsulation de Si (a) et à l'interface du super-réseau avec la couche d'encapsulation (b). L_i et R_i ont la même signification que dans la fig. III-8. Les flèches indiquent les positions des résonances qui apparaissent dans la densité d'états locale à la surface de la couche d'encapsulation (a) et qui coïncident avec les creux dans la densité locale à l'interface super-réseau-couche d'encapsulation (b).



la surface libre (fig. III-9a). Ces comportements peuvent être expliqués par les conditions aux limites différentes qui existent sur ces deux plans.

Les fréquences des modes localisés et résonnants varient avec l'épaisseur d_0 de la couche d'encapsulation. La figure III-10 présente ces variations, pour $k_{//} D = 1$. Les premières branches deviennent proches les unes des autres lorsque d_0 augmente. Notons aussi que les courbes dans cette figure sont presque horizontales lorsqu'une branche localisée tend à devenir résonnante en pénétrant dans la bande de volume. Une fois à l'intérieur des bandes de volume, les branches correspondant à ces résonances varient rapidement avec d_0 , mais leur intensité dans la densité d'états décroît voire s'annule, en particulier lorsque d_0 est petit ou la fréquence est élevée. Finalement, mentionnons dans ce cas aussi que, pour une fréquence ω donnée dans la figure III-10, les modes se répètent périodiquement en fonction de d_0 .

Lorsque la couche d'encapsulation de Si est déposée sur la couche AlAs du super-réseau, d'autres modes localisés et résonnants, différents de ceux donnés sur les figures précédentes, apparaissent [28]. Dans ce cas, les figures III-11, III-12 et III-13 donnent respectivement les courbes de dispersion, la variation de la densité d'états totale et la variation des fréquences des modes localisés et résonnants en fonction de l'épaisseur de la couche d'encapsulation.

Lorsque l'épaisseur d_0 de la couche d'encapsulation tend vers l'infini, on trouve la situation d'un super-réseau semi-infini en contact avec un substrat que nous allons présenter au paragraphe suivant.

C - Super-réseau semi-infini en contact avec un substrat homogène

La possibilité des ondes transverses à l'interface entre un super-réseau et un substrat avait été démontrée auparavant [24] en utilisant la méthode de la matrice de transfert. Le calcul analytique de la densité d'états nous permet d'étudier, en plus des modes localisés, les résonances associées à cette interface. Ces dernières apparaissent comme des pics bien définis de la densité d'états. Les résultats seront illustrés, comme dans la référence [24] , pour un super-réseau Y-Dy, avec $d_1 = d_2$ et $D = 2 d_2$, en contact avec un substrat dans lequel la vitesse du son transverse est égale à deux fois celle du Dy.

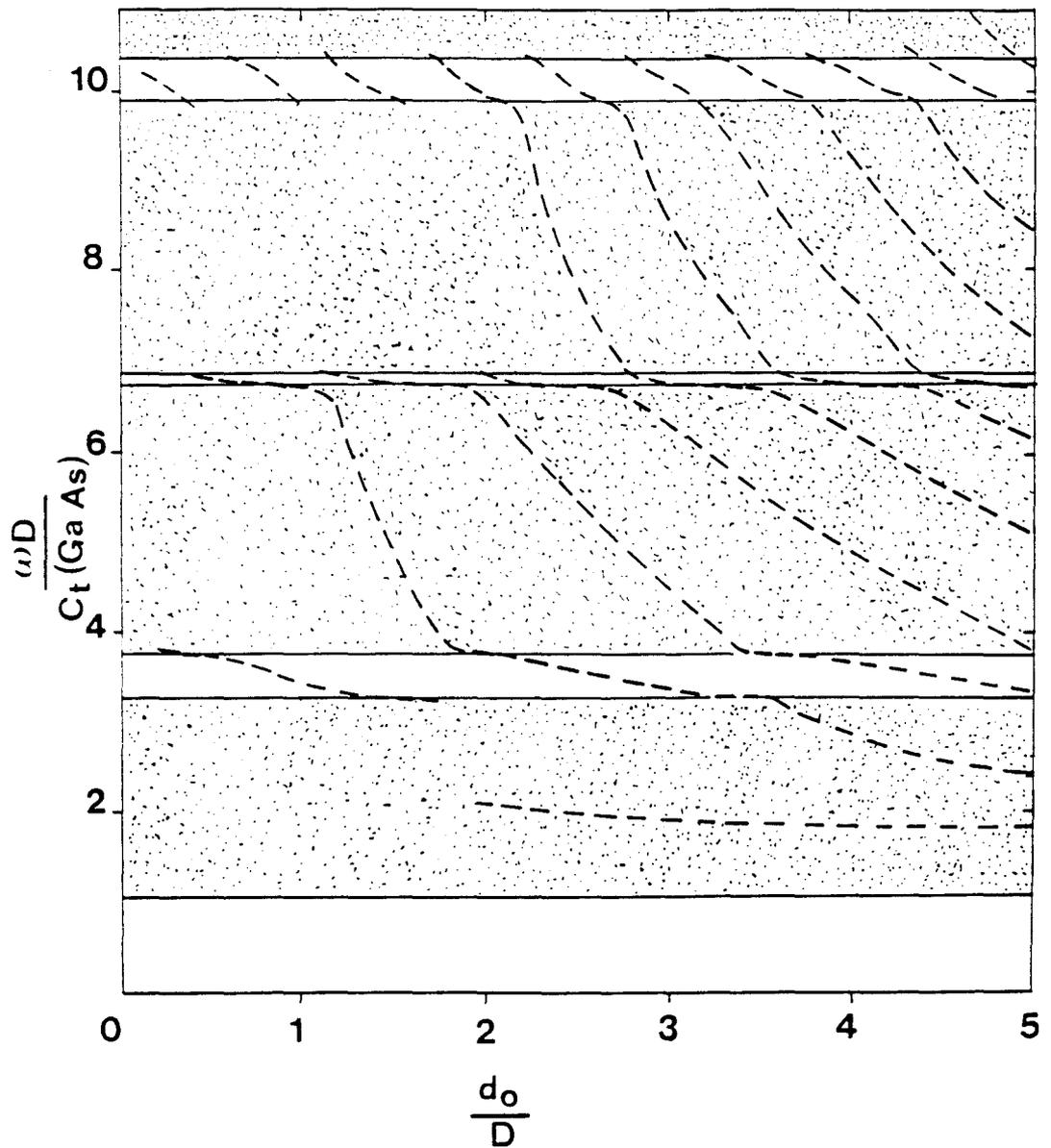


Figure III-10 Variation de la fréquence réduite $\omega D / C_t(\text{GaAs})$ des modes localisés et résonnants (traits discontinus) présentés dans la fig.III-7 en fonction de l'épaisseur d_0 de la couche d'encapsulation de Si, pour $K_{//} D = 1$. Les zones hachurées présentent les trois premières bandes de volume du super-réseau séparées par des gaps.



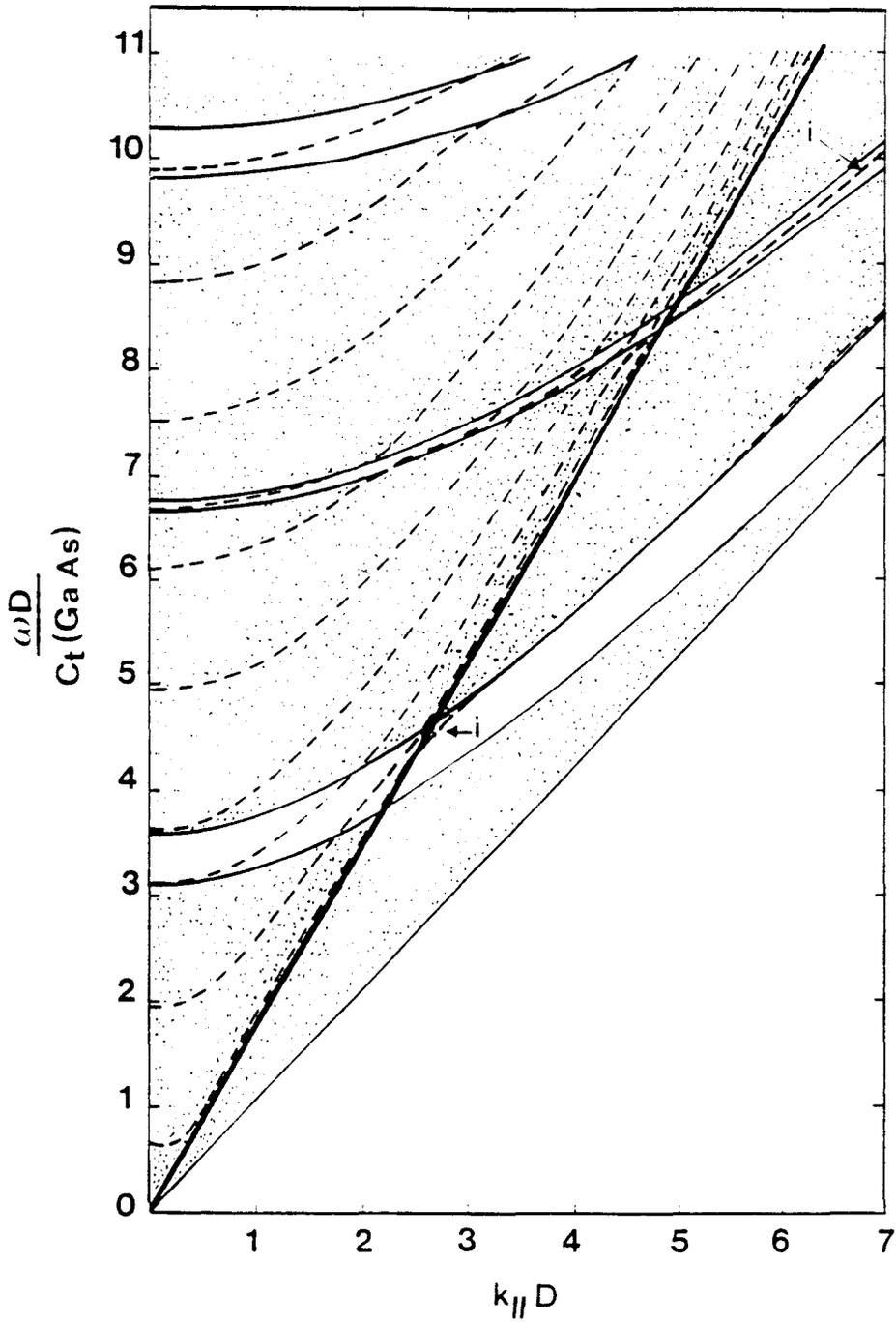


Figure III-11 Môme chose que sur la fig. III-7, mais lorsque la couche de Si est déposée sur un super-réseau semi-infini GaAs-AlAs terminé par une couche complète d'AlAs.

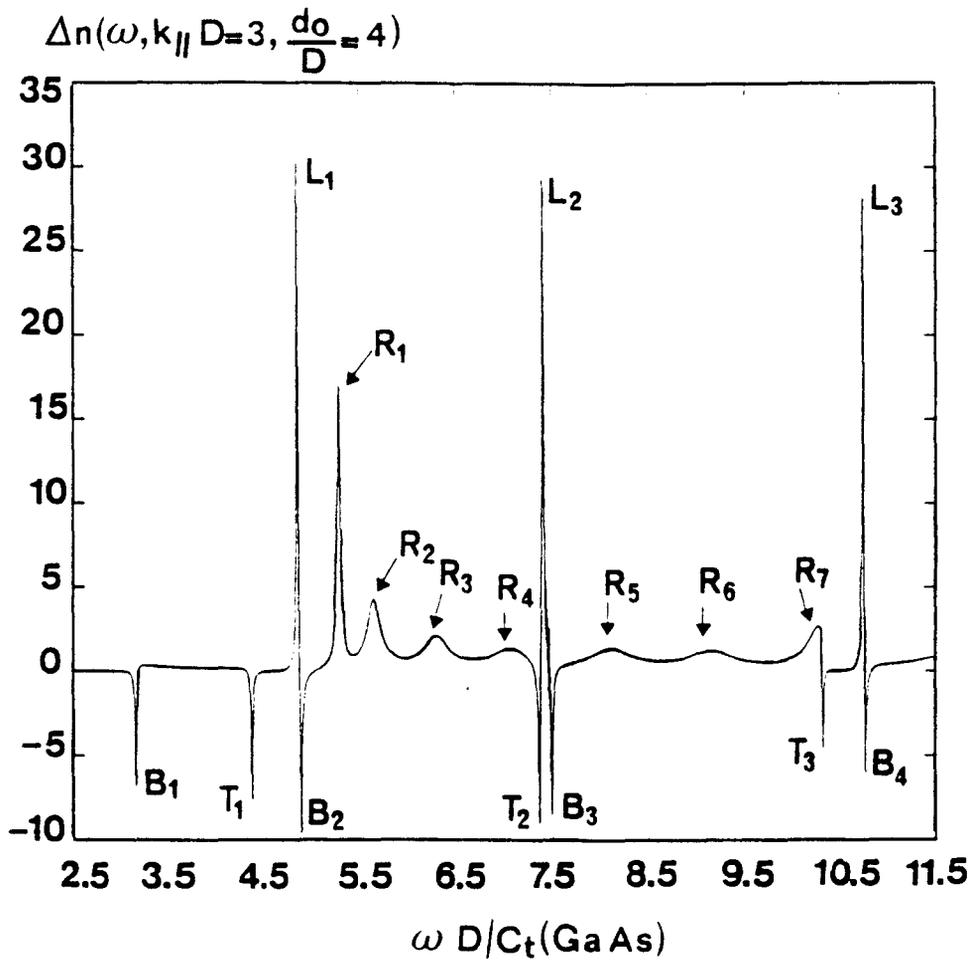


Figure III-12 Môme chose que sur la fig. III-8, mais lorsque la couche de Si est en contact avec la couche AlAs du super-réseau.



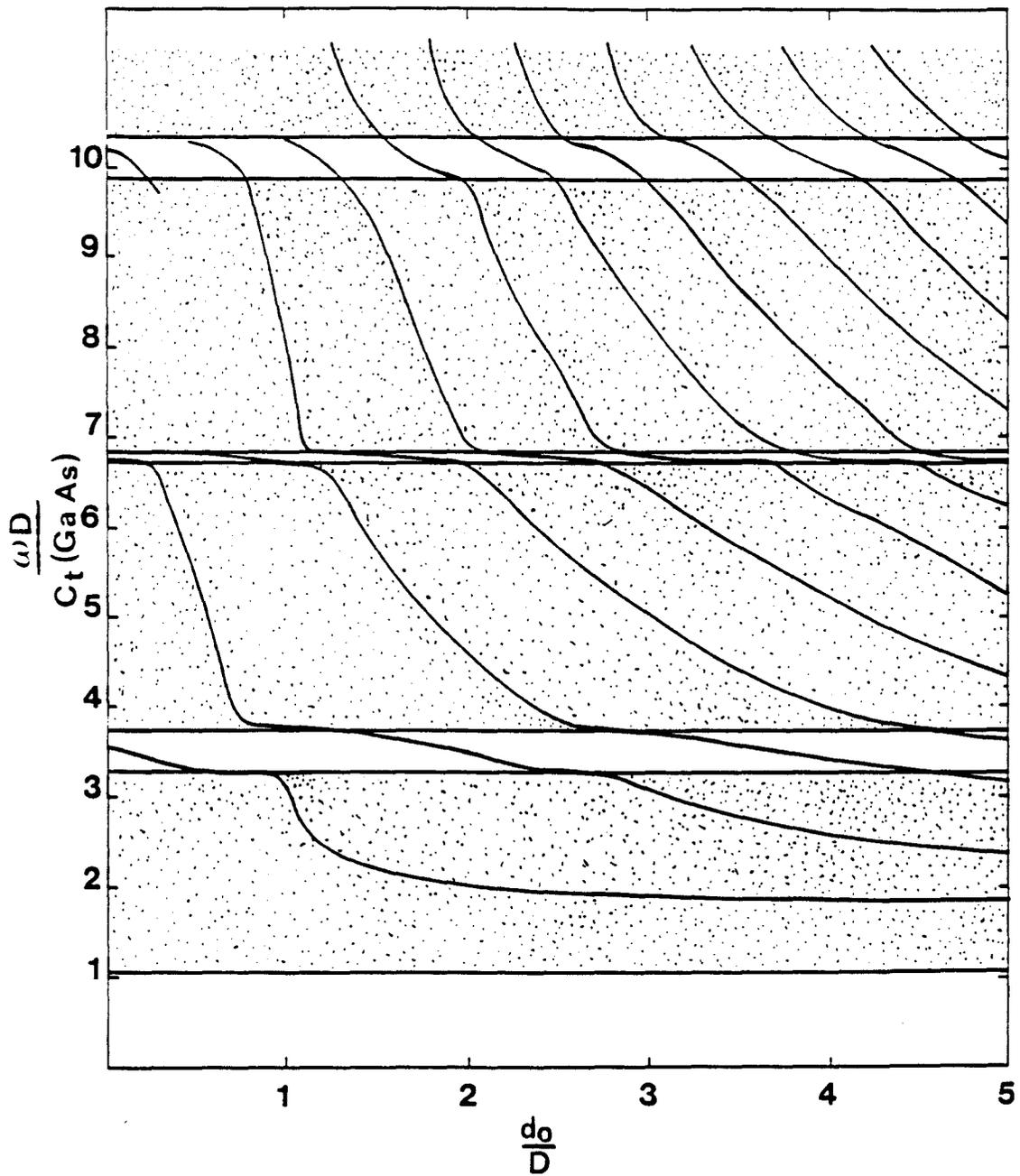


Figure III-13 Même chose que sur la fig. III-10, mais lorsque la couche de Si est en contact avec la couche AlAs du super-réseau.

307
11.10

Dans la référence [24] , l'existence des modes localisés avait été discutée en fonction du paramètre $\gamma = C_{44}^{(s)}/C_{44}^{(Dy)}$ (où l'indice s signifie substrat), en supposant que le substrat est en contact avec une couche du super-réseau de type Dy ou Y. Les modes localisés d'interface peuvent être discutés, à partir des deux cas extrêmes suivants : $\gamma = 0$ ou $\gamma \rightarrow \infty$. Dans le premier cas, les modes localisés sont ceux associés à la surface libre du super-réseau, tandis que pour le deuxième cas les amplitudes des vibrations tendent vers zéro à l'interface et restent très faibles dans le substrat (interface rigide). Pour montrer les modes résonnants d'interface dans ce paragraphe, nous présentons respectivement sur les figures III-14 et III-16 deux exemples pour lesquels la constante élastique $C_{44}^{(s)}$ du substrat prend deux valeurs très différentes: $\gamma = C_{44}^{(s)}/C_{44}^{(Dy)} = 0.5$ ou 4.

(i) Cas $\gamma = 0.5$. La figure III-14 montre les modes localisés et résonnants d'interface pour deux super-réseaux complémentaires, où le substrat est respectivement en contact avec une couche complète de Y ou de Dy. Dans le premier cas, les deux courbes en traits pleins dans les minigaps du super-réseau sont des modes localisés d'interface qui continuent (traits discontinus) sous forme de résonances bien définies à l'intérieur de la bande de volume du substrat tout en restant dans les minigaps du super-réseau. Comme, dans ce cas, la constante élastique $C_{44}^{(s)}$ du substrat a une valeur faible ($\gamma = 0.5$), ces résonances sont proches des états de surface du super-réseau semi-infini ($\gamma = 0$). Leurs intensités décroissent, lorsque γ croît.

Maintenant, si le substrat est en contact avec la couche Dy, on obtient la branche en traits discontinus avec des pointillés au voisinage du bas de la première minibande, qui est partiellement localisée (pour $k_{//} D \gtrsim 5$) et partiellement résonnante avec les états du super-réseau (lorsque $k_{//} D \lesssim 5$). D'autre part, les traits discontinus, mentionnés dans le paragraphe précédent, correspondent aussi à de faibles résonances dans ce cas.

La variation de la densité d'états $\Delta n_{Ic}(\omega)$ lorsqu'on crée les deux super-réseaux complémentaires, à partir du super-réseau infini et du substrat infini, peut de plus montrer la nouvelle distribution des états. Nous avons présenté un tel exemple dans la figure III-15, pour $k_{//} D = 1$: la perte des états due aux pics deltas de poids - 1/2 à chaque limite de la bande de volume, est compensée

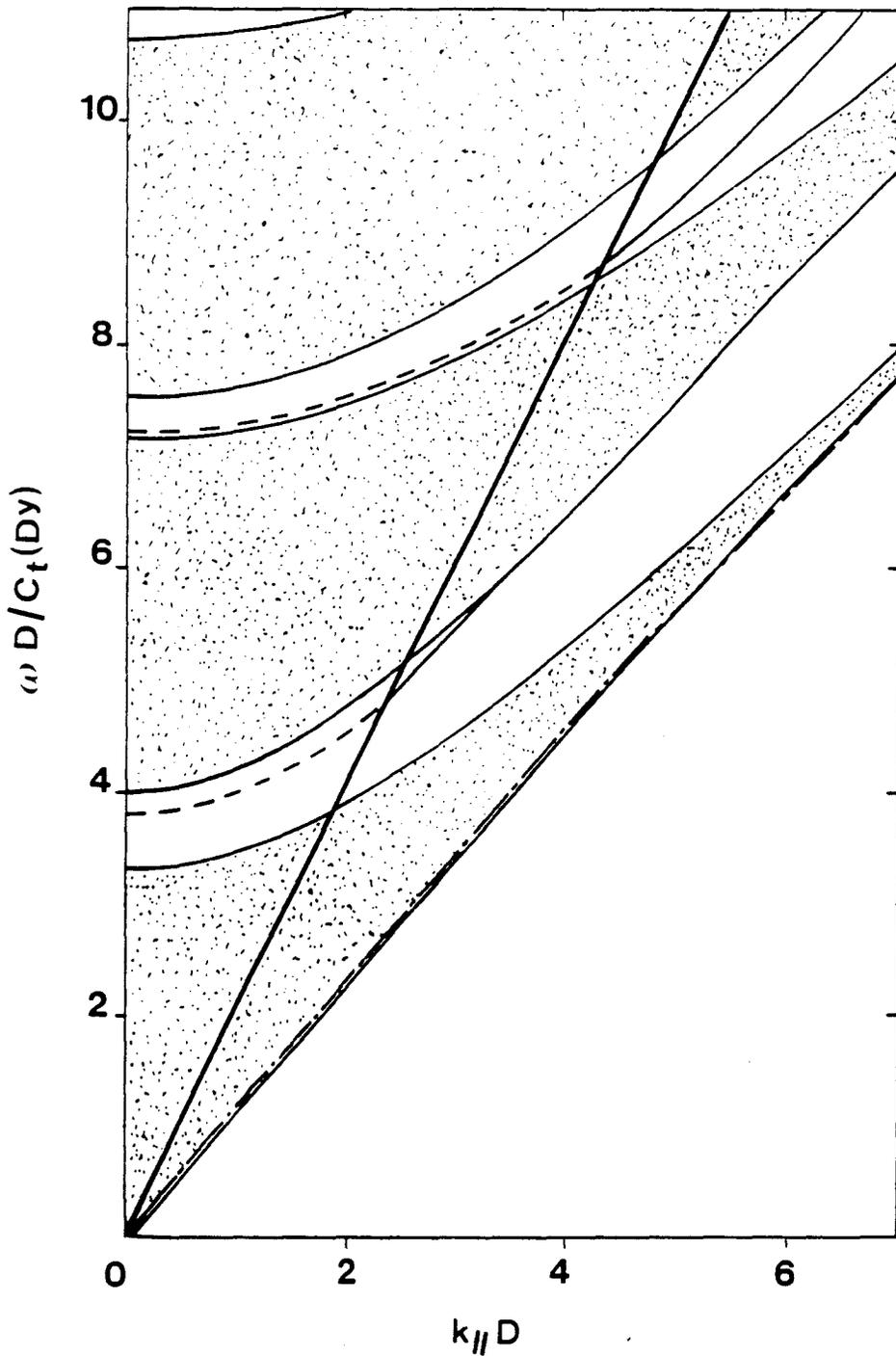


Figure III-14 Modes localisés et résonnants associés à l'interface d'un super réseau Y - Dy avec un substrat. Nous avons considéré deux super-réseaux complémentaires Y - Dy pour lesquels le substrat est en contact respectivement avec la couche Y ou Dy. Les zones hachurées représentent les bandes de volume du super réseau. La droite épaisse indique le bas de la bande de volume du substrat. Les paramètres du substrat sont définis par $C_t^{(s)} = 2 C_t^{(Dy)}$ et $\gamma = C_{44}^{(s)} / C_{44}^{(Dy)} = 0.5$. Lorsque le super-réseau se termine avec une couche d'Y, les modes localisés (resp. résonnants) sont représentés par des traits pleins (resp. discontinus). Lorsqu'il se termine par une couche de Dy, on obtient la courbe en traits discontinus avec des pointillés qui représente un état localisé pour $k_{||} D \geq 5$ et un état résonnant pour $k_{||} D \leq 5$

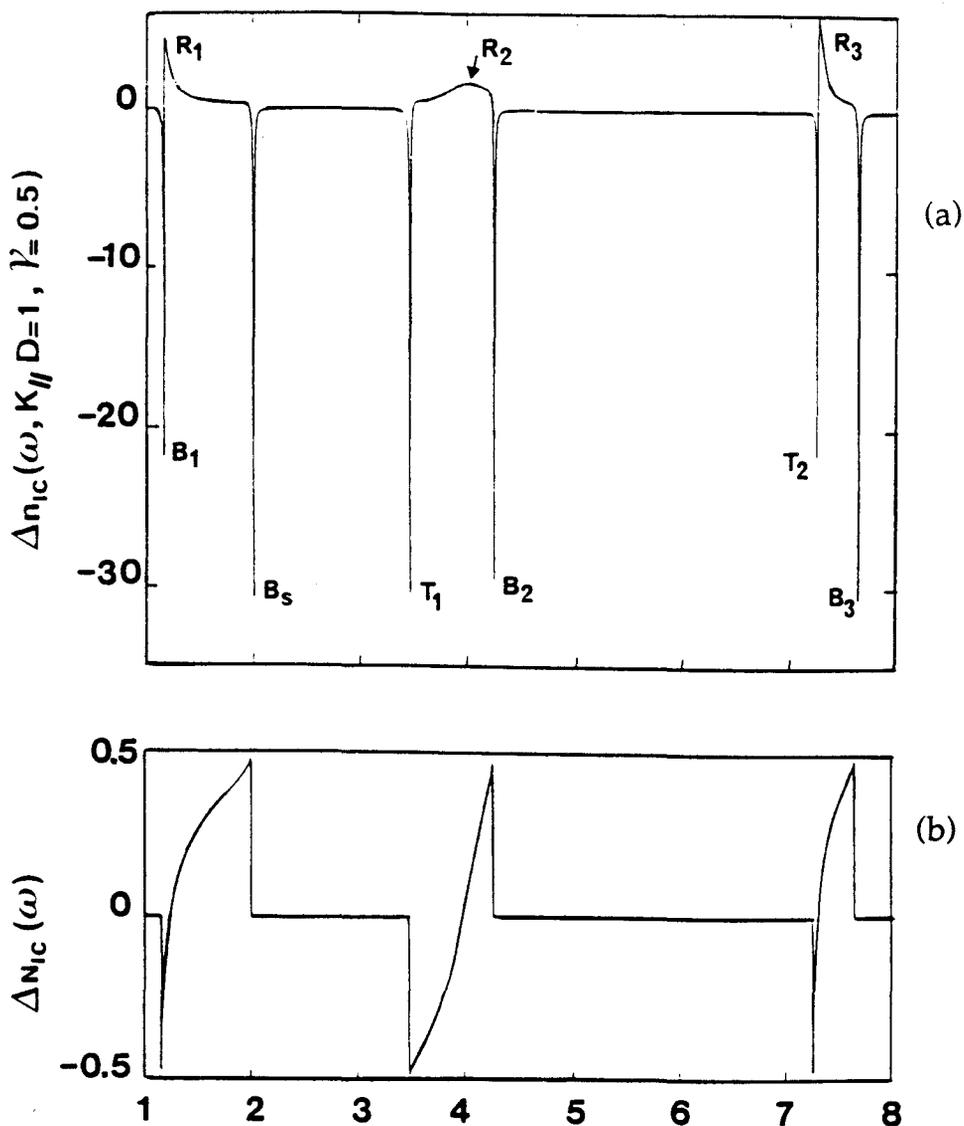


Figure III-15 Variation de densités d'états (a) et du nombre d'états (b), à $k_{||}D = 1$, pour les deux super-réseaux complémentaires de la Fig. III-14, obtenus à partir d'un super-réseau infini et d'un substrat infini. B_1 et T_1 représentent respectivement les pics delta de poids $-1/2$ qui apparaissent en bas et en haut de la bande de volume, tandis que B_s réfère au pic delta de poids $(-1/2)$ situé au bas de la bande de volume du substrat. R_2 et R_3 représentent les résonances qui apparaissent dans les gaps du super-réseau tout en étant dans la bande du substrat, tandis que R_1 est une résonance qui correspond au prolongement du mode localisé situé en bas des bandes de volume.

entièrement par les pics associés aux états résonnants (R_1, R_2, R_3). Cette compensation peut être observée plus aisément dans la figure III-15b montrant la variation du nombre d'états, définie comme $\Delta N_{Ic}(\omega) = \int_0^\omega \Delta n_{Ic}(\omega') d\omega'$. On peut vérifier aussi la validité de la règle présentée dans le sous-paragraphe III-2-2E, à savoir que $\Delta n_{Ic}(\omega^2)$ est égale à zéro lorsque ω appartient simultanément à la bande de volume du super-réseau et à celle du substrat.

(ii) Cas $\gamma = 4$. Dans la figure III-16 nous avons considéré le cas d'un super-réseau terminé par une couche de Dy. Les deux états localisés d'interface (traits pleins) continuent sous forme de résonances (traits discontinus) juste en dessous de la bande de volume du substrat. Ils ont un comportement évanescent du côté du substrat et progressif du côté du super-réseau. Notons aussi l'existence de deux autres résonances dans les minigaps du super-réseau ; ils sont localisés du côté du super-réseau et progressifs du côté du substrat. Une étude de la densité d'états montre que la résonance qui apparaît dans le premier minigap du super-réseau est aussi large en fréquence que le minigap lui-même, et par conséquent elle est moins marquée que la résonance située dans le deuxième minigap. Les fréquences de ces deux dernières résonances sont plutôt proches de celles des modes localisés de surface du super-réseau dans la limite $\gamma \rightarrow \infty$ [24] (cette condition impose au déplacement de s'annuler sur cette surface). Lorsque γ décroît, les intensités de ces résonances décroissent et elles s'étalent sur toute la largeur des minigaps.

Maintenant si le substrat est en contact avec la couche Y, les courbes en traits discontinus dans la figure III-16 apparaissent ici encore comme des états résonnants d'interface, mais avec une intensité moins importante que dans le cas où le super-réseau est terminé par une couche de Dy (bien sûr les modes localisés sont totalement différents de ceux présentés dans la figure III-16; ils sont donnés dans la référence [24]).

Dans toute la discussion précédente, les résonances sont définies comme des pics dans la densité d'états du système tout entier. Il est utile de noter que ces caractéristiques n'apparaissent pas nécessairement dans la densité d'états locale à l'interface super-réseau-substrat. Cette différence apparaît plus spécialement lorsque la rigidité du substrat (paramètre γ) est grande. En effet, dans ce cas, les fréquences des modes résonnants sont pratiquement les mêmes que celles dans le

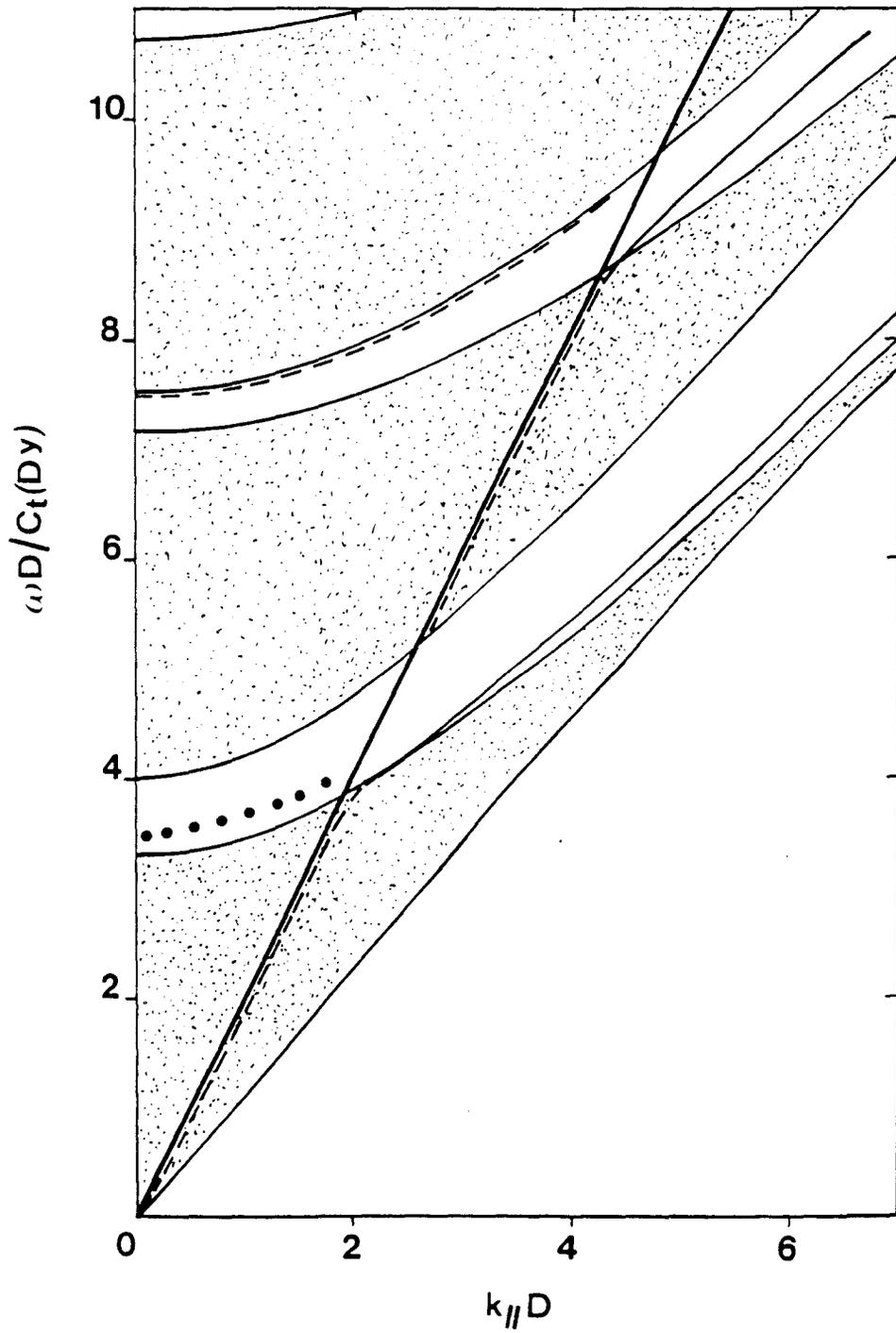


Figure III-16 Modes localisés et résonnants d'interface, comme dans la fig.III.14, mais pour un substrat, en contact avec une couche de Dy du super-réseau. Les paramètres sont $C_{44}^{(s)} = 4 C_{44}^{(Dy)}$ et $C_t^{(s)} = 2 C_t^{(Dy)}$



cas $\gamma \rightarrow \infty$; or pour ces fréquences la fonction de Green, et par conséquent la densité d'états locale, s'annulent exactement à l'interface super-réseau -substrat. (Notons plus précisément que les fréquences de ces modes sont données par l'éq. $(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1}) = 0$; en même temps la densité d'état locale (éq. III-37) s'annule exactement en ces fréquences)

III - 3. MODES LOCALISES ET RESONNANTS DE POLARISATION SAGITTALE

Dans ce paragraphe, nous abordons l'étude des modes acoustiques de polarisation sagittale pour lesquels deux directions de vibration sont couplées. Notre travail se limite au cas des super-réseaux semi-infinis, sans changement de l'épaisseur et de la nature de la couche de surface.

III -3 -1 Fonctions de Green d'un super-réseau

A - Fonction de Green d'un super-réseau infini

Le calcul de la fonction de Green de volume d'un super-réseau se fait selon le même principe que dans le paragraphe III2-1B: on construit d'abord, à la manière de l'éq. (III.8), la fonction de Green $\overset{\leftrightarrow}{g}^{-1}(M_m, M_m)$ à partir de la juxtaposition des différentes matrices $\overset{\leftrightarrow}{g}_{si}^{-1}(M_m, M_m)$ correspondant aux lames minces $i = 1$ et 2 . Ces dernières peuvent s'écrire (éq. (I.62)) sous la forme

$$\overset{\leftrightarrow}{g}_{si}^{-1}(M_m, M_m) = \begin{pmatrix} \overset{\leftrightarrow}{A}_i & \overset{\leftrightarrow}{B}_i \\ \overset{\leftrightarrow}{B}_i^* & \overset{\leftrightarrow}{A}_i^* \end{pmatrix} \quad (\text{III.38})$$

$$\text{avec } \overset{\leftrightarrow}{A}_i = \begin{bmatrix} a_i & iq_i \\ -iq_i & b_i \end{bmatrix} \quad \text{et } \overset{\leftrightarrow}{B}_i = \begin{bmatrix} d_i & if_i \\ if_i & e_i \end{bmatrix} \quad (\text{III.39})$$

$\overleftrightarrow{A}_i^*$ et $\overleftrightarrow{B}_i^*$ sont leurs complexes conjugués respectifs, tandis que a_i, b_i, d_i, e_i, f_i et q_i sont des quantités réelles définies à partir de l'éq. (I.63) pour les milieux $i=1$ et $i=2$, et $M_m \equiv (n, i, \pm \frac{d_i}{2})$.

On remarque, que les " éléments " de la fonction de Green de la lame mince $\overleftrightarrow{g}_{si}^{-1}(M_m, M_m)$ sont maintenant des matrices 2×2 (à cause des deux directions de vibrations), alors qu'ils étaient scalaires dans le cas des modes transverses (une seule direction de vibration).

En suivant la même procédure que celle présentée pour les modes transverses mais avec des calculs beaucoup plus lourds, les éléments de la fonction réponse sont obtenus dans l'appendice B; en particulier la relation de dispersion pour le super-réseau infini s'écrit

$$\cos^2(k_3 D) - 2 \delta \cos(k_3 D) + \gamma = 0 \quad (\text{III.40})$$

δ et γ sont des fonctions des paramètres réels a_i, b_i, q_i, d_i, e_i , et f_i ($i = 1, 2$). Il existe maintenant deux solutions pour $\cos(k_3 D)$ qui peuvent s'écrire sous la forme

$$\eta_1 = \delta + (\delta^2 - \gamma)^{1/2} \quad (\text{III.41})$$

et

$$\eta_2 = \delta - (\delta^2 - \gamma)^{1/2}. \quad (\text{III.42})$$

A partir de η_1 et η_2 , on déduit les expressions correspondantes de t_1 et t_2 suivant l'éq. (III.11). Rappelons qu'à chacun de ces t est associé un vecteur d'onde k_3 dans la direction x_3 tel que

$$t = e^{ik_3 D}. \quad (\text{III.43})$$

De plus, si k_3 est une solution de l'éq. (III.43), $-k_3$ (ou $\frac{1}{t}$) est aussi une solution.

Par conséquent, les deux paires de k_3 associées respectivement à t_1 et t_2 , pour $k_{//}$ et ω donnés, s'écrivent

$$K_1 + iL_1, -(K_1 + iL_1); K_2 + iL_2, -(K_2 + iL_2). \quad (\text{III.44})$$

Selon que k_3 est purement réel ou contient une partie imaginaire, l'onde correspondante se propage dans le super-réseau (bande de volume) ou est

atténuée (gap). On peut distinguer les deux cas suivants (pour ω et $k_{//}$ fixés) selon que $(\delta^2 - \gamma)^{1/2}$ est réel ou imaginaire.

i) $(\delta^2 - \gamma)^{1/2}$ réel ; alors η_1 et η_2 sont aussi réels. De plus si $|\eta_1| \leq 1$ ($|t_1| = 1$) ou $|\eta_2| \leq 1$ ($|t_2| = 1$), le k_3 correspondant est réel ($L_1 = 0$ ou $L_2 = 0$) et la fréquence appartient à la bande de volume du super-réseau ; par contre si à la fois $|\eta_1| > 1$ et $|\eta_2| > 1$, les k_3 sont soit imaginaires purs ($K_1 = K_2 = 0$) soit complexes mais avec $K_1 = K_2 = \frac{\pi}{D}$ et la fréquence se trouve dans un gap du super-réseau.

ii) $(\delta^2 - \gamma)^{1/2}$ imaginaire ; alors η_1 et η_2 sont complexes conjugués et les vecteurs d'ondes k_3 correspondant s'écrivent sous la forme :

$$K + iL, - (K + iL), K - iL, - (K - iL) \text{ avec } K \neq 0 \text{ et } L \neq 0; \quad (\text{III.45})$$

ces fréquences correspondent alors aux gaps du super-réseau.

L'ensemble des comportements possibles pour les vecteurs d'ondes k_3 est discuté dans l'appendice B à travers une illustration de la structure de bande complexe (fig. B-3).

Les 16 éléments de la fonction de Green de volume d'un super-réseau infini peuvent s'écrire formellement (voir Appendice B)

$$g_{\alpha\beta}(n, i=1, v; n', i=1, v') = \frac{2}{\alpha_0 (\eta_1 - \eta_2)} \sum_{\mu=-2}^2 R_{\alpha\beta}(v, v', \mu) \left[\frac{t_1^{|n-n'+\mu|+1}}{t_1^2 - 1} - \frac{t_2^{|n-n'+\mu|+1}}{t_2^2 - 1} \right] \quad (\text{III.46})$$

où α et β représentent les directions de vibrations x, z notées aussi 1, 3 ($\alpha, \beta \equiv x, z$ ou 1,3), v et v' indiquent les positions des interfaces de la couche $i=1$ du super-réseau ($v, v' \equiv -\frac{d_1}{2}, \frac{d_1}{2}$). $R_{\alpha\beta}(v, v', \mu)$ et α_0 sont des fonctions des paramètres a_i, b_i, d_i, e_i, q_i et f_i des lames minces $i = 1$ et $i = 2$ constituant le super-réseau (voir appendice B).

Finalement, la connaissance de \overleftrightarrow{g} dans l'espace des interfaces permet de déduire la fonction de Green \overleftrightarrow{g} (DD) dans l'espace complet à partir de l'équation (I.9).

B - Fonction de Green d'un super-réseau semi-infini

Considérons le super-réseau semi-infini situé dans le demi-espace des x_3 négatifs et terminé par une couche complète de type $i = 1$. On le réalise à partir du super-réseau infini en supprimant par exemple la couche ($n = 0, i = 2$). L'opérateur de perturbation qui permet d'effectuer cette opération s'écrit

$$\overleftrightarrow{V}_s^{(1)}(M_1, M_1) = \begin{pmatrix} \overleftrightarrow{A}_2 & \overleftrightarrow{B}_2 \\ -\overleftrightarrow{A}_2^* & -\overleftrightarrow{B}_2^* \end{pmatrix} \quad (\text{III.47})$$

\overleftrightarrow{A}_2 et \overleftrightarrow{B}_2 sont définis à partir de l'éq.(III.39) et M_1 représente l'espace des interfaces affecté par la perturbation $\overleftrightarrow{V}_s^{(1)} : M_1 \equiv \{ (n = 0, i = 1, \frac{d_1}{2}), (n = 1, i = 1, -\frac{d_1}{2}) \}$, soit

quatre états en tout en tenant compte des deux degrés de vibration.

A partir des éléments de la fonction de Green de volume (eq. (III.46)) et de ceux de l'opérateur de perturbation (eq. (III.47)), on peut déduire (voir appendice B) les expressions des éléments de l'opérateur réponse de surface (eq. (I.4)), soit

$$\overleftrightarrow{A}_s^{(1)}(M_s, M_s) = \sum_{M_1} \overleftrightarrow{V}_s^{(1)}(M_s, M_1) \overleftrightarrow{g}(M_1, M_s) \quad (\text{III.48})$$

où $M_s \equiv (n = 0, i = 1, \frac{d_1}{2})$

Dans les équations précédentes nous avons utilisé l'exposant (1) pour indiquer qu'on s'intéresse au super-réseau semi-infini situé dans le demi-espace des x_3 négatifs avec une couche $i = 1$ à la surface. On utilisera un exposant (2) pour le même calcul concernant le super-réseau semi-infini complémentaire situé dans le demi-espace des x_3 positifs avec une couche $i = 2$ à la surface.

Finalement, les éléments de la fonction réponse à la surface du super-réseau sont donnés par l'équation (I.8), soit

$$\overleftrightarrow{d}_1 (M_s, M_s) = \overleftrightarrow{g} (M_s, M_s) \left[\overleftrightarrow{\Delta}_s^{(1)} (M_s, M_s) \right]^{-1} = \begin{bmatrix} d_{xx}^{(1)} & d_{xz}^{(1)} \\ d_{zx}^{(1)} & d_{zz}^{(1)} \end{bmatrix} \quad (\text{III.49})$$

avec $\overleftrightarrow{\Delta}_s^{(1)} (M_s, M_s) = \overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_s^{(1)} (M_s, M_s)$ (éq. (I.7))

et $\overleftrightarrow{g} (M_s, M_s)$ définie à partir de l'équation (III.46).

Les expressions explicites des éléments de la fonction réponse $\overleftrightarrow{d}_1 (M_s, M_s)$ sont données dans l'appendice B.

Les équations qui suivent résument les calculs pour le super-réseau complémentaire.

$$\overleftrightarrow{d}_2 (M_s, M_s) = \overleftrightarrow{g} (M_s, M_s) \left[\overleftrightarrow{\Delta}_s^{(2)} (M_s, M_s) \right]^{-1} = \begin{bmatrix} d_{xx}^{(2)} & d_{xz}^{(2)} \\ d_{zx}^{(2)} & d_{zz}^{(2)} \end{bmatrix} \quad (\text{III.50})$$

où $\overleftrightarrow{\Delta}_s^{(2)} (M_s, M_s) = \overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_s^{(2)} (M_s, M_s)$ (III.51)

$$\overleftrightarrow{A}_s^{(2)} (M_s, M_s) = \sum_{M_2} \overleftrightarrow{V}_s^{(2)} (M_s, M_2) \overleftrightarrow{g} (M_2, M_s), \quad (\text{III.52})$$

$$M_2 \equiv \left\{ \left(n=0, i=1, \frac{d_1}{2} \right), \left(n=0, i=1, -\frac{d_1}{2} \right) \right\},$$

et $\overleftrightarrow{V}_s^{(2)} (M_2, M_2) = \begin{pmatrix} \overleftrightarrow{-A}_1 & \overleftrightarrow{-B}_1 \\ \overleftrightarrow{-B}_1^* & \overleftrightarrow{-A}_1^* \end{pmatrix}$ (III.53)

\overleftrightarrow{A}_1 et \overleftrightarrow{B}_1 sont définis par l'équation (III.39)

C- Etats localisés et densités d'états locales

A partir des pôles de la fonction $\overleftrightarrow{d}_1 (M_s, M_s)$, on trouve les fréquences des modes localisés à la surface d'un super-réseau semi-infini terminé par une couche complète de type $i = 1$. Pour une valeur donnée de $k_{//}$, ces fréquences sont obtenues à partir de l'équation

$$\det [\overleftrightarrow{\Delta}_s^{(1)} (M_s, M_s)] = 0 \quad (\text{III.54})$$

D'autre part, à partir des éléments de la fonction réponse $\overleftrightarrow{d}_1 (M_s, M_s)$ donnés dans l'appendice B, on peut déduire les composantes de la densité locale suivant les directions x et z , à savoir

$$n_x = - \frac{1}{\pi} \text{Im} (d_{xx}^{(1)}) \quad (\text{III.55})$$

$$n_z = - \frac{1}{\pi} \text{Im} (d_{zz}^{(1)}) \quad (\text{III.56})$$

D - Densité d'états totale

Le calcul de la variation de densité d'états totale due à la création d'un super-réseau semi-infini à partir du super-réseau infini est beaucoup plus compliqué dans le cas des vibrations de polarisation sagittale que dans celui des vibrations de polarisation transverse. Pour cette raison, on s'est limité, dans ce travail, à l'étude de cette quantité $\Delta n_c(\omega)$ pour deux super-réseaux semi-infinis complémentaires car $\Delta n_c(\omega)$ s'obtient alors simplement à partir des éléments de la fonction réponse sur les surfaces des deux super-réseaux complémentaires:

$\overleftrightarrow{d}_1 (M_s, M_s)$ et $\overleftrightarrow{d}_2 (M_s, M_s)$ (éqs. (III.49) et (III.50))

$$\Delta n_c(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{d}{d\omega} \ln \det [\overleftrightarrow{d}_1 (0, 1, \frac{d1}{2} ; 0, 1, \frac{d1}{2}) + \overleftrightarrow{d}_2 (0, 1, \frac{d1}{2} ; 0, 1, \frac{d1}{2})] \quad (\text{III.57})$$

où les expressions explicites de $\overleftrightarrow{d}_1 (0, 1, \frac{d1}{2} ; 0, 1, \frac{d1}{2})$ et $\overleftrightarrow{d}_2 (0, 1, \frac{d1}{2} ; 0, 1, \frac{d1}{2})$ sont données dans l'appendice B.

Evidemment, cette procédure de calcul ne nous permet pas d'étudier le comportement de la densité d'états pour chaque super-réseau pris indépendamment. Cependant, elle nous permet d'étudier le comportement des modes localisés et résonnants pour les deux super-réseaux semi-infinis complémentaires, et en particulier d'obtenir une règle générale sur l'existence de ces modes.

E- Nécessité d'existence des états localisés et résonnants

L'existence de deux polarisations dans le cas des modes sagittaux donne lieu à deux bandes de volume. Ainsi, on montre numériquement (voir ci-dessous) que la création de deux super-réseaux complémentaires, à partir du clivage d'un super-réseau infini, donne lieu à des pics δ de poids $-1/2$ aux limites de ces deux bandes. On trouve aussi que pour les fréquences appartenant simultanément à ces deux bandes , la variation de densité d'état est nulle. Ces deux résultats ensemble associés à la nécessaire conservation du nombre total d'états, montrent qu'on doit s'attendre soit à des modes localisés à l'intérieur des minigaps du super-réseau soit à des modes "semi-localisés" ou "semi-résonnants"(sans analogie en polarisation transverses) pour lesquels une composante s'atténue dans le super-réseau, tandis que l'autre composante est propagative. Certains de ces modes sont des prolongements des modes localisés à l'intérieur de l'une des deux bandes. Nous détaillons tous ces points dans les quelques applications ci-dessous.

III - 3 -2.Quelques applications

L'exemple que nous avons choisi pour l'illustration de ces résultats est celui d'un super-réseau à couches isotropes W-Al. Les paramètres élastiques des milieux constituants sont celles donnés dans la référence [22] et les épaisseurs des couches sont supposées égales: $d_1 = d_2 = \frac{D}{2}$.

La figure III-17 représente la courbe de dispersion des bandes de volume et des modes de surface de deux super-réseaux semi-infinis complémentaires, l'un se terminant par une couche complète d'Al et l'autre par une couche complète de W. Comme signalé dans le sous-paragraphe précédent les bandes de volume du super-réseau résultent de la réunion des domaines où $|t_1| = 1$ (traits horizontaux) ou $|t_2| = 1$ (traits verticaux) associés aux deux polarisations des ondes. Les régions de fréquence appartenant simultanément à ces deux bandes sont

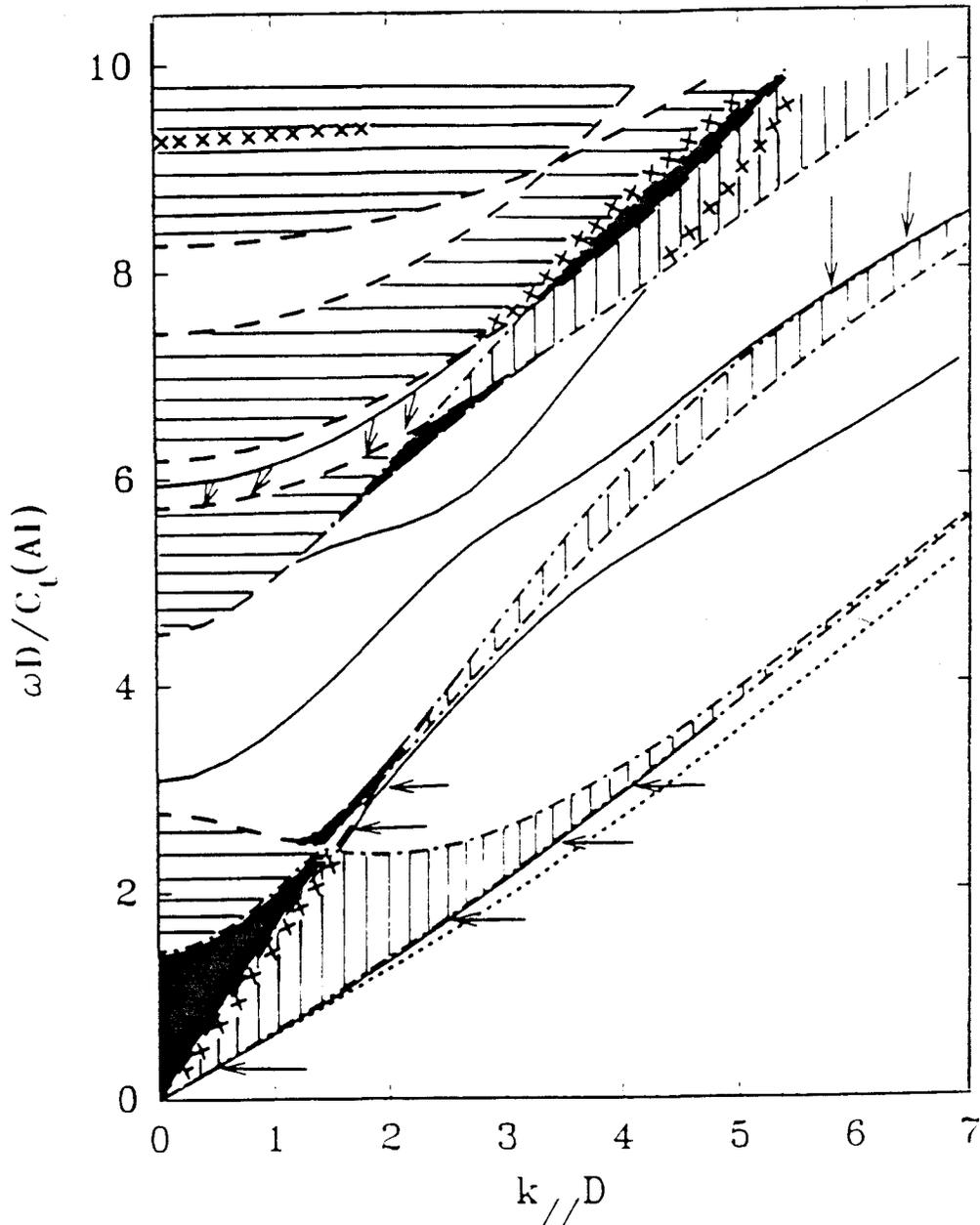


Figure III-17 Dispersion des bandes de volume et des ondes de surface d'un super-réseau W-Al avec $d(W) = d(Al)$. Les zones hachurées par des traits horizontaux et verticaux correspondent aux bandes de volume données par les deux polarisations. La zone de fréquence appartenant simultanément à ces deux bandes est représentée en noir. Les modes de surface correspondant au super-réseau semi-infini terminé par une couche Al (resp. W) sont représentés en traits pleins (resp. en pointillés). Certains des modes de surface sont très proches des limites des bandes de volume et ne peuvent pas être distingués de ces dernières à l'échelle de la figure ; leurs positions sont indiquées par des flèches, tandis que leur prolongement sous forme de résonances à l'intérieur des bandes est indiqué par des croix. Les quantités représentées sur les axes sont les mêmes que celles données sur la figure III-4. $C_t(Al)$ est la vitesse du son transverse dans Al ($C_t(Al) = (C_{44}/\rho)_{Al}^{1/2}$)



représentées en noir sur la figure III-17, tandis que les régions séparant les différentes zones hachurées représentent les gaps. A cause de la grande différence entre les paramètres élastiques de W et Al, les largeurs de ces gaps sont importantes, ce qui n'est pas le cas pour d'autres matériaux tels que Y - Dy et surtout GaAs - AlAs [22, 23]. A l'intérieur de ces gaps apparaissent les modes localisés de surface associés soit à un super-réseau semi-infini soit à son complémentaire. Certains modes de surface sont très proches des limites des bandes de volume et ne peuvent pas être distingués de ces dernières à l'échelle de cette figure (nous avons signalé leurs positions par des flèches). Le prolongement de ces modes de surface sous forme de résonances à l'intérieur des bandes de volume du super-réseau est indiqué par des croix. Ainsi, on peut remarquer que ces derniers modes peuvent être localisés par rapport à une bande et propagatifs par rapport à l'autre ou vice versa.

Pour voir le comportement de ces modes localisés et résonnants dans la densité d'états, nous avons représenté (Figs. III-18 et III-19), la variation de la densité d'états totale $\Delta n_c(\omega)$ lorsqu'on réalise les deux super-réseaux semi-infinis à partir du super-réseau infini.

Considérons d'abord les densités d'états à $k_{//} D = 0$ (Fig. III-18). Dans ce cas les modes sagittaux se découplent en modes purement longitudinaux et purement transverses et la courbe de densité d'états obtenue est tout simplement une superposition de celles pour ces deux types de modes. La description des ondes transverses a été présentée dans le paragraphe précédent; à $k_{//} D = 0$ les mêmes résultats s'appliquent aussi aux ondes de polarisation longitudinale, à condition de remplacer C_{44} par C_{11} . Ainsi sur la figure III-18, les pics (L_1, L_3, L_4, L_6) correspondent aux modes localisés de polarisation transverse, tandis que (L_2, L_5) sont associés à des modes de polarisation longitudinale. Aux limites des bandes de volume de polarisation transverse et longitudinale, on retrouve des pics δ de poids - 1/2 notés respectivement $B_i^{(1,2)}, T_i^{(1,2)}$. (Les exposants 1 et 2 indiquent les deux polarisations longitudinale et transverse, respectivement).

A $k_{//} D = 5$, on observe encore dans la variation de la densité d'états, représentée sur la figure III-19, l'existence des pics δ de poids -1/2 (notés $B_i^{(1,2)}, T_i^{(1,2)}$), aux limites des bandes de volume définies par les deux polarisations (voir figure III-17). Sur la figure III-19 on remarque aussi les modes de surface notés L_i ainsi que les résonances R_1 et R_2 qui sont les prolongements de modes

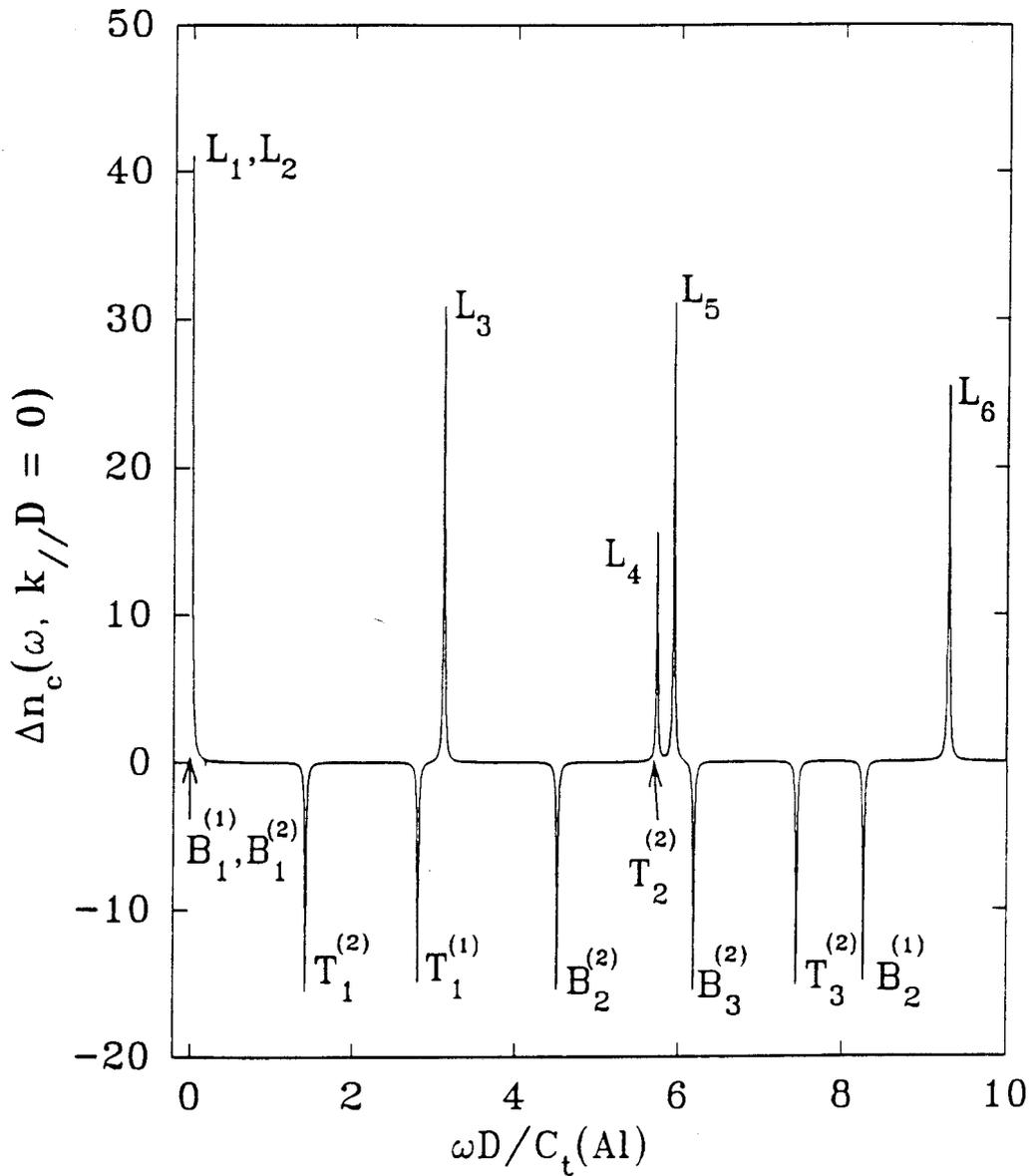


Figure III-18 Variation de densité d'états totale (en unité de $D/C_t(Al)$) entre les deux super-réseaux semi-infinis complémentaires décrits dans la figure III-17 et le super-réseau infini, à $k_{//} D = 0$. Dans ce cas on obtient un découplage entre les modes de polarisation transverse et longitudinale. A l'aide des équations (III.23) et (III.24) on peut distinguer les modes de surface transverses (notés L_1, L_3, L_4, L_6) et longitudinaux (notés L_2, L_5), ainsi que les pics deltas de poids $-1/2$ ($B_i^{(j)}$ et $T_i^{(j)}$) qui apparaissent

respectivement en bas et en haut des bandes de volume i correspondant aux deux polarisations longitudinale et transverse (notées respectivement $j=1$ et 2). Parfois les modes de surface sont situés juste aux limites des bandes de volume, ce qui cache l'apparition des pics de poids $-1/2$



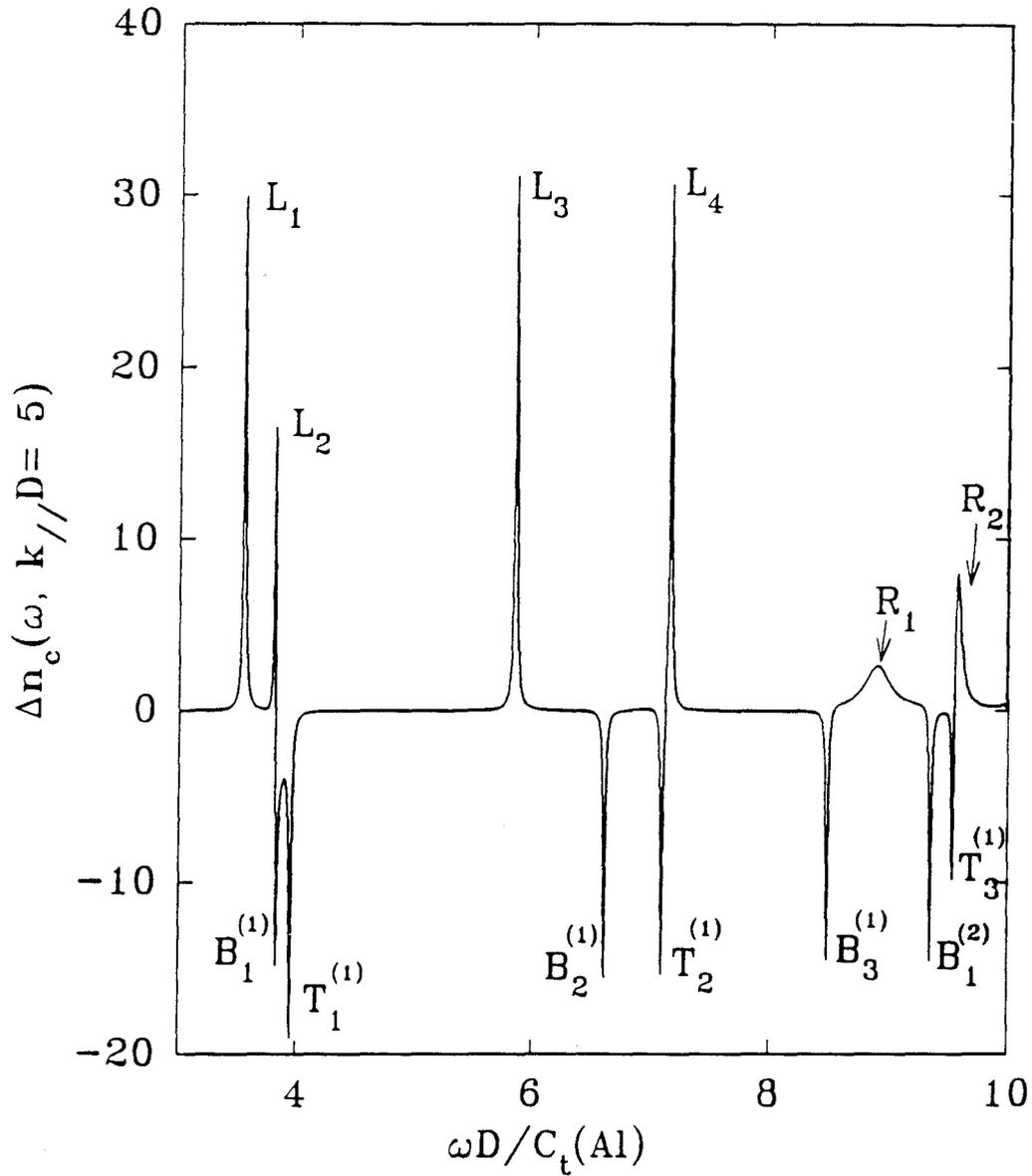


Figure III.19 Môme figure que (III-18), à $k_{//}D = 5$; dans ce cas les vibrations suivant les directions x et z sont couplées. Les ondes de surface sont notées L_i , les pics delta de poids $-1/2$ sont notés $B_i^{(j)}$, $T_i^{(j)}$ (j représente les deux polarisations appelées 1 et 2) et les résonances qui apparaissent à l'intérieur des bandes sont notées R_i .



localisés situés dans les deuxième et troisième minigaps (fig. III-17). Pour ce qui concerne les zones hachurées en noir (voir fig. III-17) où les deux types de bande se superposent, nous avons vérifié numériquement que la variation de la densité d'états est nulle dans ces régions.

A l'aide des équations (III. 49) et (III. 50) nous avons aussi étudié la densité d'états locale à la surface de chaque super-réseau, ainsi que ses composantes suivant les directions x et z . Celles-ci permettent de distinguer facilement sur les figures III-18 et III-19, les modes localisés associés à chacun des deux super-réseaux semi-infinis et leur caractère. Ainsi, pour les modes de la figure III-18, on observe clairement dans la densité locale (non montrée ici) que le mode de Rayleigh L_1 qui apparaît en bas des bandes de volume correspond au super-réseau semi-infini avec une couche de W à la surface, tandis que les autres modes sont associés au super-réseau semi-infini avec une couche d' Al à la surface. De plus, comme prévu, les modes de polarisation transverse sont de type x et les modes de polarisation longitudinale sont de type z . Dans la figure III-19, les modes L_1 , L_3 et L_4 ont un caractère prépondérant selon z , tandis que la résonance R_1 est plutôt du type x . (L_2 et R_2 apparaissent comme des pics très faibles dans les composantes x et z de la densité locale à la surface).

III - 4 CONCLUSION

En nous plaçant dans le cadre de la limite élastique, nous avons étudié en détail dans une première partie les densités d'états des ondes élastiques de polarisation transverse, pour un super-réseau semi-infini avec ou sans couche d'encapsulation à la surface, ou en contact avec un substrat.

Nous avons montré analytiquement que la création de la surface libre d'un super-réseau conduit, dans la variation de la densité d'états, à des pics δ de poids $\frac{1}{4}$ aux limites des bandes de volume du super-réseau. Une conséquence de cette propriété est que pour deux super-réseaux semi-infinis complémentaires, obtenus par clivage d'un super-réseau infini le long d'un plan parallèle aux interfaces, il existe autant d'états localisés de surface que de minigaps pour chaque valeur de $\vec{k}_{//}$.

Nous avons aussi examiné l'existence des modes localisés et résonnants dans un super-réseau semi-infini avec une couche de surface différente de celle de volume (couche d'encapsulage). En particulier, nous avons étudié la variation des fréquences de ces modes en fonction de l'épaisseur de la couche superficielle. En fait, tous ces modes apparaissent comme des pics de densités d'états, soit à l'intérieur des minigaps (modes localisés), soit à l'intérieur des bandes de volume (modes résonnants). Ces modes localisés et résonnants dépendent fortement des paramètres élastiques et de l'épaisseur relatif de la couche d'encapsulage, ainsi que de la nature de la couche du super-réseau en contact avec cette dernière.

Nous avons ensuite étudié, l'existence des modes localisés et résonnants associés à l'interface super-réseau-substrat. Nous avons aussi démontré analytiquement, dans ce cas, que la création de cette interface conduit, dans la variation de la densité d'états totale, à des pics δ de poids $-1/4$ aux limites des bandes de volume du super-réseau et du substrat. Une conséquence de ce résultat est que lorsqu'on considère deux super-réseaux complémentaires en contact avec deux substrats identiques, des résonances de poids environ égal à un apparaissent à l'intérieur des gaps des deux super-réseaux tout en étant dans la bande du substrat. Ces résonances se répartissent différemment sur chacun des deux super-réseaux. Leurs intensités dépendent fortement des paramètres relatifs du substrat, ainsi que de la nature de la couche du super-réseau en contact avec ce dernier.

Dans une seconde partie, nous avons étudié les modes élastiques de polarisation sagittale dans les super-réseaux semi-infinis, sans faire varier la nature de la couche superficielle. En particulier, nous avons montré numériquement l'existence de pics deltas de poids $-1/2$ aux limites des bandes de volume associées aux deux polarisations. A cause de ces deux polarisations, certains modes de surface peuvent avoir un comportement localisé par rapport à une polarisation (par exemple $L_1 \neq 0$, éq. (III.44)) et résonnant par rapport à l'autre ($L_2 = 0$, éq. (III.44)). Ainsi, on obtient des modes "semi-localisés" (sans analogue en polarisation transverse) et qui apparaissent sous forme de résonances bien marquées à l'intérieur des bandes de volume du super-réseau.

Finalement, signalons que les calculs présentés pour les modes de polarisation transverse, peuvent être transposés directement à la structure électronique des super-réseaux dans l'approximation de la masse effective [33]. Ce travail sera présenté au chapitre V où nous abordons les propriétés électroniques

des super-réseaux semi-infinis dans le modèle de Kronig-Penny. Ces mêmes calculs peuvent aussi être transposés à l'étude de la propagation des polaritons dans ces hétérostructures, lorsque chaque couche est caractérisée par une constante diélectrique locale $\epsilon(\omega)$ [34]. Ces transpositions sont possibles car, dans tous ces problèmes, les équations de mouvement ainsi que les conditions aux limites sont formellement décrites par les mêmes équations mathématiques.

APPENDICE B

Dans la première partie de cet appendice nous présentons les détails des calculs analytiques des fonctions réponses pour un super-réseau infini ou semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulation, dans le cas des modes acoustiques transverses. Dans la seconde partie, nous donnons les démonstrations des règles générales que nous avons établies pour les modes de surface et d'interface dans ces systèmes. La dernière partie contient les détails de calculs des fonctions réponses associées à un super-réseau infini ou semi-infini dans le cas des modes acoustiques de polarisation sagittale.

B - 1 - Fonctions réponses du super-réseau pour les vibrations de polarisation transverse :

B - 1. 1 - Super-réseau infini

a) Le calcul de la relation de dispersion d'un super-réseau infini, peut être effectué de la même façon que pour une chaîne linéaire infinie d'atomes de masse M avec deux types d'interactions entre proches voisins β_1, β_2 (Fig. III-2). En effet, soit U_n et V_n les déplacements, suivant l'axe \vec{x}_3 , des atomes de la maille n de cette chaîne linéaire.

$$U_n = U_0 e^{i(k_3 n a - \omega t)} \quad (B.1)$$

$$V_n = V_0 e^{i(k_3 n a - \omega t)} \quad (B.2)$$

où U_0, V_0 et ω représentent respectivement les amplitudes et la fréquence des vibrations. a est le paramètre de maille et k_3 , la composante du vecteur d'onde suivant l'axe \vec{x}_3 (Fig. III-2).

Les équations du mouvement, satisfaites par les deux atomes d'une maille, peuvent s'écrire sous la forme matricielle

$$\begin{bmatrix} M\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) & \beta_1 + \beta_2 e^{-ik_3 a} \\ \beta_1 + \beta_2 e^{ik_3 a} & M\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_0 \\ V_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (B.3)$$

La relation de dispersion obtenue s'écrit

$$\cos(k_3 a) = 1 - M\omega^2 \left(\frac{1}{\beta_1} + \frac{1}{\beta_2} \right) + \frac{M^2 \omega^4}{2 \beta_1 \beta_2} \quad (B.4)$$

En appliquant la même procédure à l'éq.(III.8) pour le super réseau infini, et en utilisant la transformée de Fourier le long de l'axe \vec{x}_3 du super-réseau, l'inverse de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}(M_m, M_m)$ (éq. (III.8) dans l'espace réciproque, s'écrit

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(k_3; \tilde{M}, \tilde{M}) = \begin{bmatrix} A_1 + A_2 & B_1 + B_2 e^{-ik_3 D} \\ B_1 + B_2 e^{ik_3 D} & A_1 + A_2 \end{bmatrix} \quad (B.5)$$

où \tilde{M} représente l'espace des interfaces de la couche $i = 1$ du super-réseau :

$\tilde{M} = \left\{ (i = 1, \frac{d1}{2}), (i = 1, -\frac{d1}{2}) \right\}$. En remplaçant A_i et B_i par leurs expressions respectives (éq. (III.6), la relation de dispersion obtenue (éq. (I.11)) s'écrit

$$\cos(k_3 D) = C_1 C_2 + 1/2 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) S_1 S_2 \quad (B.6)$$

où C_i , S_i et F_i ($i = 1, 2$) sont donnés par l'équation (III.7). k_3 est la composante du vecteur d'onde perpendiculaire aux couches du super-réseau, et D est la période du super-réseau. On notera η la quantité (B.6).

De plus, la fonction réponse du super-réseau dans l'espace des interfaces (dans l'espace réciproque) devient

$$\overleftrightarrow{g}(k_3; \tilde{M}, \tilde{M}) = \frac{1/2}{\cos(k_3 D) - \eta} \begin{bmatrix} \frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} & \frac{S_2}{F_2} + \frac{S_1}{F_1} e^{-ik_3 D} \\ \frac{S_2}{F_2} + \frac{S_1}{F_1} e^{ik_3 D} & \frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \end{bmatrix} \quad (B.7)$$

En utilisant la transformée de Fourier réciproque, le premier terme diagonal de la fonction réponse dans l'espace des interfaces (dans l'espace réel) est donné par :

$$g(n, 1, -\frac{d_1}{2}; n', 1, -\frac{d_1}{2}) = \frac{D}{2\pi} \int_{-\pi/D}^{\pi/D} g(k_3, -\frac{d_1}{2}, -\frac{d_1}{2}) e^{-ik_3(n'-n)D} dk_3 \quad (B.8)$$

En appliquant le théorème des résidus, on aboutit à

$$g(n, 1, -\frac{d_1}{2}; n', 1, -\frac{d_1}{2}) = (\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1}) \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1} \quad (B.9)$$

où t est défini par l'éq. (III.11).

En appliquant le même raisonnement pour les autres termes, on obtient

$$g(n, 1, -\frac{d_1}{2}; n', 1, \frac{d_1}{2}) = \frac{S_2}{F_2} \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1} + \frac{S_1}{F_1} \frac{t^{|n-n'-1|+1}}{t^2-1}, \quad (B.10)$$

$$g(n, 1, \frac{d_1}{2}; n', 1, -\frac{d_1}{2}) = \frac{S_2}{F_2} \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1} + \frac{S_1}{F_1} \frac{t^{|n-n'+1|+1}}{t^2-1}, \quad (B.11)$$

$$g(n, 1, \frac{d_1}{2}; n', 1, \frac{d_1}{2}) = (\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1}) \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1}. \quad (B.12)$$

b) La fonction réponse complète du super-réseau peut être calculée en utilisant l'équation (I.9). Exprimée sous forme d'éléments de matrice, nous avons

$$g(n, i, x_3; n', i', x'_3) = \delta_{nn'} \delta_{ii'} U_i(x_3, x'_3) + \frac{1}{S_i S_{i'}} \left[\sinh[\alpha_i (\frac{d_i}{2} - x_3)]; \sinh[\alpha_i (\frac{d_i}{2} + x_3)] \right] \leftrightarrow g(M_m, M_m) \begin{bmatrix} \sinh[\alpha_{i'} (\frac{d_{i'}}{2} - x'_3)] \\ \sinh[\alpha_{i'} (\frac{d_{i'}}{2} + x'_3)] \end{bmatrix} \quad (B.13)$$

où

$$U_i(x_3, x'_3) = -\frac{1}{2F_i} \exp[-\alpha_i |x_3 - x'_3|] + \frac{1}{2F_i S_i} \left[\sinh \left[\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} - x'_3 \right) \right] \exp \left[-\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} + x_3 \right) \right] \right. \\ \left. + \sinh \left[\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} + x'_3 \right) \right] \exp \left[-\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} - x_3 \right) \right] \right]. \quad (B.14)$$

$\overleftrightarrow{g}(M_m, M_{m'})$ est une matrice (2 x 2) formée par les éléments donnés par les équations (B.9) - (B.12) pour $m = (n, 1, \pm \frac{d_1}{2})$ et $m' = (n', 1, \pm \frac{d_1}{2})$.

B - 1 - 2 Super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulation

Le calcul des éléments de la fonction réponse dans l'espace des interfaces du super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulation nécessite, en plus des éléments de la fonction réponse de volume \overleftrightarrow{g} (éqs. (B.9) - (B.12)), le calcul de l'opérateur réponse de surface (éq. (I.4))

$$A(M_0 M_m) = \sum_{M_s} V(M_0 M_s) g(M_s M_m) \quad (B.15)$$

\overleftrightarrow{V} est la perturbation représentant les opérations i) et ii) de la fig. (III.3). Elle affecte un ensemble de trois états $M_s = \left\{ (n = 0, i = 1, \frac{d_1}{2}), (n = 1, i = 1, -\frac{d_1}{2}), (n = 1, i = 1, \frac{d_1}{2}) \right\}$. $M_0 = \left\{ (n = 0, i = 1, \frac{d_1}{2}), (n = 1, i = 1, -\frac{d_1}{2}) \right\}$ représente l'espace des interfaces perturbé par l'opération ii).

A partir des éléments de \overleftrightarrow{g} (éqs. (B.9) - (B.12)) et de ceux de \overleftrightarrow{V} (éq. (III.13)), on obtient les éléments de l'opérateur \overleftrightarrow{A} . Soit:

$$A\left(0, 1, \frac{d_1}{2}, n', 1, -\frac{d_1}{2}\right) = \frac{t^{|n'|+1}}{t^2-1} \frac{S_2}{F_2} \left(\frac{F_2 C_2}{S_2} - \frac{F_0 C_0}{S_0} \right) + \frac{t^{2-n'}}{t^2-1} \left\{ -\frac{F_0 C_0}{S_0} \frac{S_1}{F_1} - C_1 \right. \\ \left. + \frac{F_0}{S_0} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right\} \quad (B.16)$$

$$A \left(0, 1, \frac{d1}{2}, n', 1, \frac{d1}{2} \right) = \frac{t^{1-n'}}{t^2-1} \left\{ C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1} S_1 S_2 - t + \frac{F_0}{S_0} \left[\frac{S_1}{F_1} + \frac{S_2}{F_2} t - C_0 \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right] \right\} \quad (B.17)$$

$$A \left(1, 1, -\frac{d1}{2}, n', 1, -\frac{d1}{2} \right) = \frac{t^{|n'|+1}}{t^2-1} \left(\frac{F_0}{S_0} \frac{S_2}{F_2} - 1 \right) + \frac{t^{2-n'}}{t^2-1} \left\{ \frac{F_0}{S_0} \frac{S_1}{F_1} + \frac{1}{t} - \frac{F_0 C_0}{S_0} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right\} \quad (B.18)$$

$$A \left(1, 1, -\frac{d1}{2}, n', 1, -\frac{d1}{2} \right) = \frac{t^{1-n'}}{t^2-1} \left\{ \frac{F_0}{S_0} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) - \frac{F_0 C_0}{S_0} \left(\frac{S_2}{F_2} t + \frac{S_1}{F_1} \right) \right\} \quad (B.19)$$

Les éléments de la fonction réponse dans l'espace des interfaces s'obtiennent à partir de l'équation (I.6).

$$\overleftrightarrow{\Delta} (M_m, M_m) = \overleftrightarrow{g} (M_m, M_m) - \overleftrightarrow{g} (M_m, M_0) \overleftrightarrow{\Delta}^{-1} (M_0, M_0) \overleftrightarrow{A} (M_0, M_m) \quad (B.20)$$

où les éléments de $\overleftrightarrow{g} (M_m, M_m)$ sont donnés par les équations (B.9)-(B.12), et l'opération $\overleftrightarrow{\Delta} (M_0 M_0)$ par l'éq. (I.7)

$$\overleftrightarrow{\Delta} (M_0 M_0) = \begin{bmatrix} 1 + A \left(0, 1, \frac{d1}{2}, 0, 1, \frac{d1}{2} \right) & A \left(0, 1, \frac{d1}{2}; 1, 1, -\frac{d1}{2} \right) \\ A \left(1, 1, -\frac{d1}{2}; 0, 1, \frac{d1}{2} \right) & 1 + A \left(1, 1, -\frac{d1}{2}; 1, 1, -\frac{d1}{2} \right) \end{bmatrix} \quad (B.21)$$

Les nouveaux modes localisés de surface se déduisent des pôles de la fonction réponse, soit

$$\det \overleftrightarrow{\Delta} (M_0 M_0) = 0 \quad (B.22)$$

d'où l'éq. (III.29).

Afin d'obtenir les éléments de la fonction réponse dans l'espace des interfaces, nous sommes amenés à distinguer deux cas: $n=n'=0$ (les interfaces considérées sont celles de la couche $i=0$) et $n, n' \leq 0, i \neq 0$ (interfaces du super-réseau lui même).

Dans le premier cas:

$$d(0, 0 - \frac{d_0}{2}, 0, 0, \frac{d_0}{2}) = d(0, 0, \frac{d_0}{2}; 0, 0, -\frac{d_0}{2}) = \frac{1}{C_0 \Delta} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right), \quad (B.23)$$

$$d(0, 0, \frac{d_0}{2}, 0, 0, \frac{d_0}{2}) = \frac{1}{\Delta} \left[\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} + \frac{S_0}{F_0 C_0} (C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t) \right], \quad (B.24)$$

$$d(0, 0, \frac{d_0}{2}, 0, 0, -\frac{d_0}{2}) = \frac{1}{\Delta} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right), \quad (B.25)$$

Dans le deuxième cas:

$$d(n, 1, -\frac{d_1}{2}; n', 1, -\frac{d_1}{2}) = \frac{t}{t^{2-1}} \left\{ \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) t^{|n-n'|} - t^{n-n'} \left(\frac{S_1 t}{F_1} + \frac{S_2}{F_2} \right) \frac{Y}{\Delta} \right\}, \quad (B.26)$$

$$d(n, 1, -\frac{d_1}{2}; n', 1, \frac{d_1}{2}) = \frac{t}{t^{2-1}} \left\{ \frac{S_2 t^{|n-n'|}}{F_2} + \frac{S_1 t^{|n-n'-1|}}{F_1} - t^{n-n'} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \frac{Y}{\Delta} \right\}, \quad (B.27)$$

$$d(n, 1, \frac{d_1}{2}; n', 1, -\frac{d_1}{2}) = \frac{t}{t^{2-1}} \left\{ \frac{S_2 t^{|n-n'|}}{F_2} + \frac{S_1 t^{|n-n'+1|}}{F_1} - t^{n-n'} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \frac{Y}{\Delta} \right\}, \quad (B.28)$$

$$d(n, 1, \frac{d_1}{2}; n', 1, \frac{d_1}{2}) = \frac{t}{t^{2-1}} \left\{ \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) t^{|n-n'|} - t^{n-n'-1} \left(\frac{S_1}{F_1} + \frac{S_2}{F_2} t \right) \frac{Y}{\Delta} \right\}, \quad (B.29)$$

où Δ et Y sont définis respectivement par les éqs. (III.17) et (III.26).

La fonction de Green complète du système peut être obtenue en appliquant l'équation (I.9). Etant donné que nous nous intéressons au calcul des densités

d'états, nous donnons ces expressions uniquement lorsque x_3 et x'_3 sont tous les deux soit dans le super-réseau, soit dans le film mince superficiel.

Dans le super-réseau, on a

$$g(n, i, x_3 ; n', i', x'_3) = \delta_{nn'} \delta_{ii'} U_i(x_3, x'_3) + \frac{1}{S_i S_{i'}} \left[\sinh \left[\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} - x_3 \right) ; \sinh \left[\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} + x_3 \right) \right] \right] \overleftrightarrow{d} (M_m, M_{m'}) \begin{bmatrix} \sinh \left[\alpha_{i'} \left(\frac{d_{i'}}{2} - x'_3 \right) \right] \\ \sinh \left[\alpha_{i'} \left(\frac{d_{i'}}{2} + x'_3 \right) \right] \end{bmatrix} \right. \\ \left. \text{où} \right. \tag{B.31}$$

$$U_i(x_3, x'_3) = -\frac{1}{2F_i} \exp[-\alpha_i |x_3 - x'_3|] + \frac{1}{2F_i S_i} \left[\sinh \left[\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} - x'_3 \right) \right] \exp \left[-\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} + x_3 \right) \right] + \sinh \left[\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} + x'_3 \right) \right] \exp \left[-\alpha_i \left(\frac{d_i}{2} - x_3 \right) \right] \right] .$$

$\overleftrightarrow{d} (M_m, M_{m'})$ est une matrice (2×2) formée par les éléments donnés par les équations (B.9) - (B.12) pour $m = (n, 1, \pm \frac{d_1}{2})$ et $m' = (n', 1, \pm \frac{d_1}{2})$.

Dans le film mince superficiel

$$d(0, 0, x_3 ; 0, 0, x'_3) = U_0(x_3, x'_3) + \frac{1}{S_0^2} \left[\sinh \left[\alpha_0 \left(\frac{d_0}{2} - x_3 \right) \right] ; \sinh \left[\alpha_0 \left(\frac{d_0}{2} + x_3 \right) \right] \right] \overleftrightarrow{d} (M_0, M_0) \begin{bmatrix} \sinh \left[\alpha_0 \left(\frac{d_0}{2} - x'_3 \right) \right] \\ \sinh \left[\alpha_0 \left(\frac{d_0}{2} + x'_3 \right) \right] \end{bmatrix} , \tag{B.32}$$

où

$$U_0(x_3, x'_3) = -\frac{1}{2F_0} \exp[-\alpha_0 |x_3 - x'_3|] + \frac{1}{2F_0 S_0} \left[\sinh [\alpha_0 (\frac{d_0}{2} - x'_3)] \exp [-\alpha_0 (\frac{d_0}{2} + x_3)] \right. \\ \left. + \sinh [\alpha_0 (\frac{d_0}{2} + x'_3)] \exp [-\alpha_0 (\frac{d_0}{2} - x_3)] \right].$$

\vec{d} (M_0, M_0) est une matrice (2×2) formée par les éléments donnés par les équations (B.23) - (B.25) pour $m = (n, 1, \pm \frac{d_1}{2})$ et $m' = (n', 1, \pm \frac{d_1}{2})$.

B - 2 Règles générales sur l'existence des états localisés et résonnants de polarisation transverse

a) Rappelons que :

$$\eta(\omega) = C_1 C_2 + \frac{1}{2} \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) S_1 S_2 \quad (\text{éq. (B.6)})$$

ou encore

$$\eta(\omega) = \frac{1}{2} (t + 1/t).$$

Soit ω_0 la fréquence correspondant à une limite d'une bande de volume du super-réseau, $t(\omega_0) = \pm 1$. Prenons par exemple le cas où $t(\omega_0) = 1$. Le développement limité au premier ordre en $(\omega - \omega_0)$ de $\eta(\omega)$ s'écrit

$$\eta(\omega) = \eta(\omega_0) + \left(\frac{d\eta}{d\omega} \right)_{\omega_0} (\omega - \omega_0) \quad (\text{B.33})$$

En faisant le changement

$$\omega = \omega + i\varepsilon \quad (\varepsilon \rightarrow 0^+)$$

On peut écrire

$$\frac{t}{(t^2 - 1)^2} = \frac{1}{8} \left(\left(\frac{d\eta}{d\omega} \right)_{\omega_0} \right)^{-1} \left[P \left(\frac{1}{\omega - \omega_0} \right) - i\pi \delta(\omega - \omega_0) \right] \quad (\text{B.34})$$

où P désigne la partie principale et δ la distribution de Dirac.

On démontre aussi les relations suivantes :

$$\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} = \pm \left(\frac{S_1}{F_1} + \frac{S_2}{F_2} \right), \quad (\text{B.35})$$

et

$$\left(\frac{d\eta}{d\omega}\right)_{\omega_0} = \mp \omega_0 M \quad (\text{B.36})$$

où

$$M = (C_1 - C_2) \left\{ \rho^{(1)} \frac{(S_1 \pm \alpha_1 d_1)}{\alpha_1 S_1 F_1} - \rho^{(2)} \frac{(S_2 \pm \alpha_2 d_2)}{\alpha_2 S_2 F_2} \right\}. \quad (\text{B.37})$$

Par ailleurs les équations (III.23) et (III.24) deviennent

$$\Delta_1 n(\omega^2) + \Delta_2 n(\omega^2) = \mp \frac{1}{8\pi} \text{Im} \left\{ M \left(\left(\frac{d\eta}{d\omega}\right)_{\omega_0} \right)^{-1} \left[P\left(\frac{1}{\omega - \omega_0}\right) - i\pi \delta(\omega - \omega_0) \right] \right\} \quad (\text{B.38})$$

En remplaçant $\left(\frac{d\eta}{d\omega}\right)_{\omega_0}$ par sa valeur (éq. (B.36)) et en utilisant la relation

$$\Delta_1 n(\omega) + \Delta_2 n(\omega) = 2\omega (\Delta_1 n(\omega^2) + \Delta_2 n(\omega^2)),$$

on trouve

$$\Delta_1 n(\omega) + \Delta_2 n(\omega) = -\frac{1}{4} \delta(\omega - \omega_0). \quad (\text{B.39})$$

Pour $\omega \rightarrow \omega_0$, le rapport $\frac{Y}{\Delta}$ dans les équations (III.23) et (III.24) tend vers ± 1 pour un super-réseau semi-infini avec ou sans couche d'encapsulation ou en contact avec un substrat. Ainsi, la relation (B.39) reste vraie pour tous ces systèmes. La même démonstration peut être faite pour $t(\omega_0) = -1$.

b) Considérons maintenant deux super-réseaux semi-infinis complémentaires, obtenus par clivage d'un super-réseau infini le long d'un plan parallèle aux couches (fig. B-1). La position du plan de coupure est en $M_s \equiv (n = 0, i=2, x_3 = d_s)$. La variation de densité d'états entre les deux super-réseaux complémentaires (fig. B-1b) et leur système de référence (i.e. le super-réseau infini (fig. B-1a)) est donnée par l'éq. (II.9).

$$\Delta n_c(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \left[\arg \det \left(\frac{g(M_s M_s)}{d_1(M_s M_s) d_2(M_s M_s)} \right) \right] \quad (\text{B.40})$$

où $d_1(M_s M_s)$ et $d_2(M_s M_s)$ sont les fonctions réponses de surface des deux super-réseaux complémentaires.

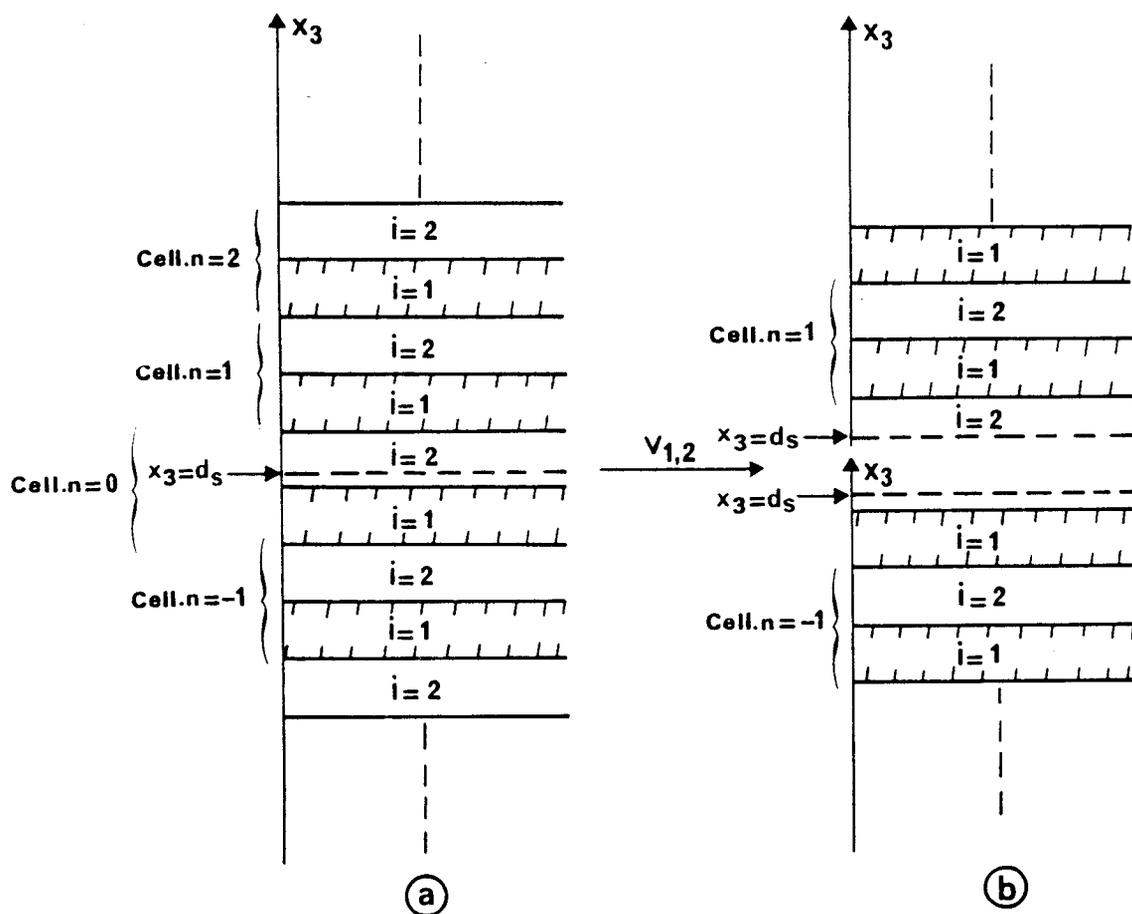


Figure B-1 Schéma de la géométrie de deux super-réseaux semi-infinis complémentaires (b), obtenus à partir du clivage d'un super-réseau infini (a) le long d'un plan parallèle aux couches, situé en $x_3 = d_s$. Les opérateurs de clivage nous permettant d'obtenir le super-réseau situé en $x_3 > d_s$ (resp. $x_3 < d_s$) sont notés V_1 (resp. V_2).

$g (M_s M_s)$ est la fonction réponse de volume du super-réseau infini (éq. (B.13)).

Or, d'après l'éq. (I.10), on a

$$g^{-1} (M_s M_s) = d_1^{-1} (M_s M_s) + d_2^{-1} (M_s M_s) \quad (B.43)$$

l'équation (B.40) devient alors

$$\Delta_{nc} (\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \left[\arg \det ((d_1 (M_s M_s) + d_2 (M_s M_s)) \right] \quad (B.44)$$

où les éléments $d_i (M_s M_s)$ ($i = 1, 2$) sont obtenus à partir de l'éq. (I.8). Soit

$$d_i (M_s M_s) = \Delta_i (M_s M_s) g_i^{-1} (M_s M_s) \quad (i = 1, 2) \quad (B.45a)$$

avec

$$g_1 (M_s M_s) = g_2 (M_s M_s) = g (M_s M_s). \quad (B.45b)$$

Les opérateurs $\Delta_i (M_s M_s)$ ($i = 1, 2$) sont obtenus à partir des équations (I.4) et (I.7)

$$\Delta_i (M_s M_s) = 1 + V_i (x_3) g (n, i, x_3; n, i, x_3) \Big|_{x_3 = d_s} \quad (B.46)$$

$V_1 (x_3)$ (resp. $V_2 (x_3)$) est l'opérateur de clivage nous permettant d'obtenir le super-réseau semi-infini situé dans le demi-espace $x_3 > d_s$ (resp. $x_3 < d_s$). Les expressions respectives de ces opérateurs sont obtenues comme pour un milieu homogène (voir la composante transverse de l'éq. (I.54)).

$$V_{1,2} (x_3) = \pm \delta(x_3 - d_s) C_{44}^{(2)} \frac{d}{dx_3} \quad (B.47)$$

$g (n, i, x_3; n, i, x_3)$ est la fonction réponse de volume du super-réseau donnée par l'éq. (B.13).

En remplaçant $V_i (x_3)$ et $g (n, i, x_3; n, i, x_3)$ par leurs valeurs respectives dans l'éq. (B.46), on obtient

$$\Delta_{1,2} (M_s M_s) = \frac{1}{2} \mp i \frac{\text{sh} (2 \alpha_2 d_s)}{4 \sin (k_3 D)} \left(\frac{F_2}{F_1} - \frac{F_1}{F_2} \right) S_1 \quad (B.48)$$

$$g(M_s M_s) = -\frac{i}{2 \sin(k_3 D) S_2^2} \left\{ 2 \operatorname{sh} \left[\alpha_2 \left(\frac{d_2}{2} + d_s \right) \right] \operatorname{sh} \left[\alpha_2 \left(\frac{d_2}{2} - d_s \right) \right] \left[\cos(k_3 D) \frac{S_2}{F_2} + \frac{S_1}{F_1} \right] \right. \\ \left. + \left[\operatorname{sh}^2 \left[\alpha_2 \left(\frac{d_2}{2} - d_s \right) \right] + \operatorname{sh}^2 \left[\alpha_2 \left(\frac{d_2}{2} + d_s \right) \right] \right] \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right\}. \quad (\text{B.49})$$

On remarque alors que la somme $\Delta_1(M_s M_s) + \Delta_2(M_s M_s)$ est égale à 1 et que $g(M_s M_s)$ est une quantité imaginaire pure. Par conséquent, d'après l'équation (B.45),

$$\arg \det(d_1(M_s M_s) + d_2(M_s M_s)) = \arg \det(g^{-1}(M_s M_s))$$

est égale à $\frac{\pi}{2}$ (modulo π). Ainsi, on déduit à partir de l'éq. (B.44) que

$$\Delta n_c(\omega) = 0. \quad (\text{B.50})$$

En tenant compte de la perte d'un quart d'état à la limite de chaque minibande d'un super-réseau (eq. (B.39)) (soit un demi-état pour les deux super-réseaux complémentaires ou un état pour chaque minibande) et de la nécessaire conservation du nombre total d'états (eq. (B.50)), nous pouvons conclure qu'on doit avoir autant d'états localisés que de minibandes.

c) Considérons maintenant la variation de densité d'états $\Delta n_I^{(1)}(\omega)$ entre un super-réseau semi-infini en contact avec un substrat homogène (fig. B-2b) et ces deux systèmes découplés (fig. B-2a). Cette quantité est donnée par l'éq. (B.44) en remplaçant $d_2(M_s M_s)$ par $g_s(M_s M_s)$ où g_s est la fonction réponse du substrat semi-infini.

$$\Delta n_I^{(1)}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \left[\arg \det(d_1(M_s M_s) + g_s(M_s M_s)) \right] \quad (\text{B.51})$$

où $d_1(M_s M_s)$ est donné par l'éq. (B.45) et $g_s(M_s M_s)$ est obtenu à partir de la composante transverse de l'éq. (I.55).

$$g_s(M_s M_s) = \frac{1}{\alpha_s C_{44}(s)} \quad (\text{B.52})$$

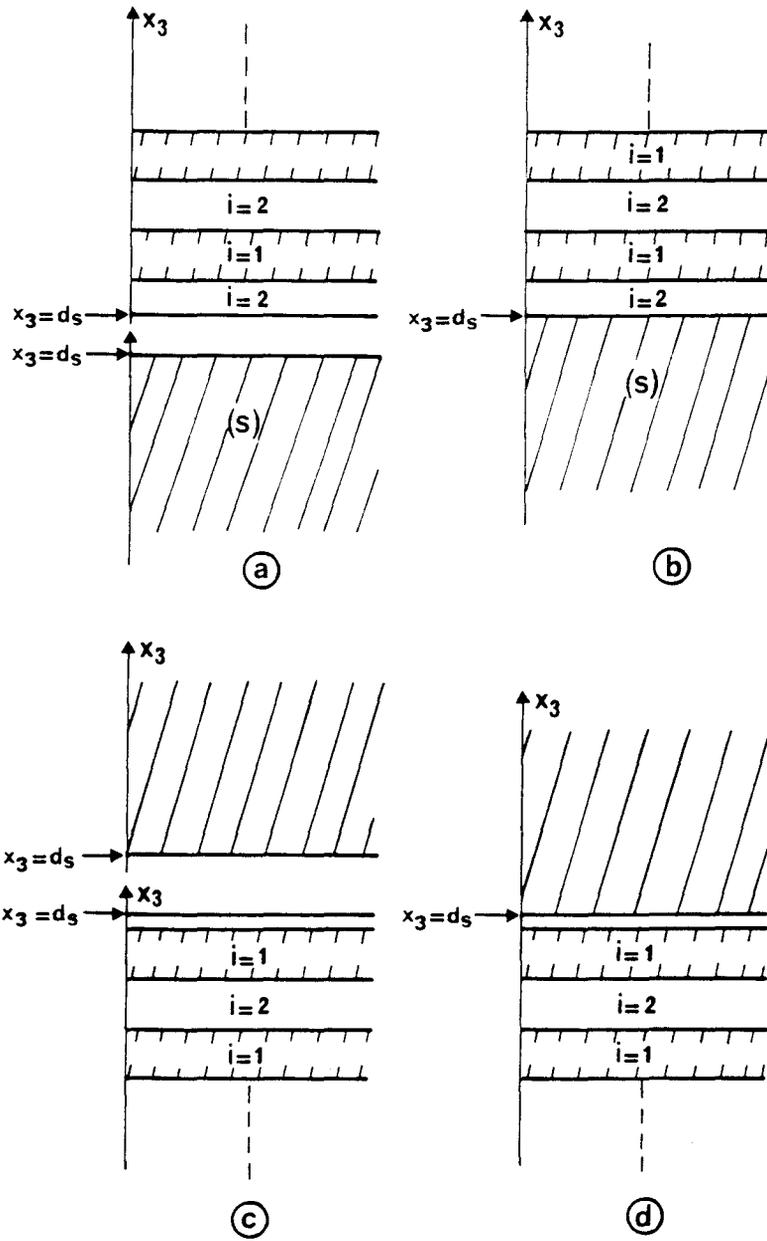


Figure B-2 Schéma de la géométrie de deux super-réseaux semi-infinis complémentaires en contact avec deux substrats complémentaires (b, d) et leurs systèmes de référence (a, c) comme utilisé dans les éqs. (B.51) et (B.55).



$$\text{avec } \alpha_s = \begin{cases} \left(k_{//}^2 \left(\frac{C_{11}-C_{12}}{2 C_{44}} \right) - \frac{\rho \omega^2}{C_{44}} \right)^{1/2} & \text{si } \omega \leq \left(\frac{C_{11}-C_{12}}{2 \rho} \right) k_{//} \\ -i \left(\frac{\rho \omega^2}{C_{44}} - k_{//}^2 \left(\frac{C_{11}-C_{12}}{2 C_{44}} \right) \right)^{1/2} & \text{si } \omega > \left(\frac{C_{11}-C_{12}}{2 \rho} \right) k_{//} \end{cases}$$

En remplaçant $d_1 (M_s M_s)$ et $g_s (M_s M_s)$ par leurs valeurs respectives (éqs. (B.45), (B.48), (B.49) et (B.52)), on obtient pour des fréquences ω appartenant simultanément aux bandes de volume du super-réseau et du substrat :

$$\Delta n_I^{(1)}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} [\arg(a + ib)] \quad (\text{B.54})$$

où a et b sont des quantités réelles.

Considérons maintenant le super-réseau semi-infini et le substrat complémentaires des précédents (fig. B-2c) (obtenus respectivement à partir du clivage du même super-réseau infini et du même substrat infini). Le calcul de la variation de la densité d'états $\Delta n_I^{(2)}(\omega)$ correspondant au couplage de ce super-réseau semi-infini avec le substrat (fig. B-2d), s'effectue de la même façon que précédemment

$$\Delta n_I^{(2)}(\omega) = \frac{d}{d\omega} [\arg \det(d_2 (M_s M_s) + g_s (M_s M_s))]. \quad (\text{B.55})$$

En remplaçant $d_2 (M_s M_s)$ et $g_s (M_s M_s)$ par leurs valeurs respectives (éqs. (B.45), (B.48), (B.49) et B.52), on obtient

$$\Delta n_I^{(2)}(\omega) = \frac{d}{d\omega} [\arg(a - ib)]. \quad (\text{B.56})$$

Comme

$$\arg(a + ib) + \arg(a - ib) = 0 \quad (\text{B.57})$$

On trouve alors que

$$\Delta n_I^{(1)}(\omega) + \Delta n_I^{(2)}(\omega) = 0 \quad (\text{B.58})$$

En peut déduire des équations (B.50) et (B.58) que la densité d'états totale des deux systèmes des figs. (B-2b) et (B-2d), obtenus à partir du clivage d'un super-réseau infini (fig. B-1a) et d'un substrat infini, est égale à zéro pour des fréquences ω appartenant simultanément aux bandes de volume du super-réseau et du substrat.

La perte d'un quart d'état à la limite de chaque minibande (éq. (B.39) (soit un état en tout pour chaque minibande des deux super-réseaux) associée à la nécessaire conservation du nombre total d'états (éqs. (B.50) et (B.58)), nous permet de conclure qu'on doit s'attendre à des résonances qui tombent à l'intérieur des minigaps du super-réseau tout en étant à l'intérieur de la bande de volume du substrat.

B -3 Fonctions réponses d'un super-réseau pour les vibrations de polarisation saggitale

B - 3 - 1 Super-réseau infini

L'inverse de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}(M_m, M_m)$, dans l'espace des interfaces, est obtenue par une juxtaposition des différentes matrices $\overleftrightarrow{g}_{si}^{-1}(M_m, M_m)$ (éq. (III.38)). Son expression a la même forme que la matrice (III.8). La transformée de Fourier le long de l'axe \vec{x}_3 , conduit à la matrice réduite suivante :

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(k_3; \tilde{M}, \tilde{M}) = \begin{bmatrix} \overleftrightarrow{A}_1 + \overleftrightarrow{A}_2^* & \overleftrightarrow{B}_1 + \overleftrightarrow{B}_2^* e^{-ik_3 D} \\ \overleftrightarrow{B}_1^* + \overleftrightarrow{B}_2 e^{ik_3 D} & \overleftrightarrow{A}_1^* + \overleftrightarrow{A}_2 \end{bmatrix} \quad (B.59)$$

qu'on peut écrire sous la forme (éqs. (III.38), (III.39))

$$\vec{g}^{-1}(k_3; \tilde{M}, \tilde{M}) = \begin{bmatrix} a_1 + a_2 & i(q_1 - q_2) & d_1 + d_2 e^{-ik_3 D} & i(f_1 - f_2 e^{-ik_3 D}) \\ -i(q_1 - q_2) & b_1 + b_2 & i(f_1 - f_2 e^{-ik_3 D}) & e_1 + e_2 e^{-ik_3 D} \\ d_1 + d_2 e^{ik_3 D} & -i(f_1 - f_2 e^{ik_3 D}) & a_1 + a_2 & -i(q_1 - q_2) \\ -i(f_1 - f_2 e^{ik_3 D}) & e_1 + e_2 e^{ik_3 D} & i(q_1 - q_2) & b_1 + b_2 \end{bmatrix} \quad (\text{B.60})$$

où a_i, b_i, d_i, e_i, f_i , et q_i sont des quantités réelles définies à partir des éqs. (I.63).

La relation de dispersion est obtenue à partir de l'éq. (I.11), soit

$$\cos^2(k_3 D) - 2 \delta \cos(k_3 D) + \gamma = 0 \quad (\text{B.61})$$

où δ et γ sont des paramètres réels fonctions des termes a_i, b_i, d_i, e_i, f_i et q_i ($i = 1, 2$). On obtient ainsi deux paires de solutions pour le vecteur d'onde k_3 , données par l'éq. (III.44).

$$K_1 + iL_1, -(K_1 + iL_1); K_2 + iL_2, -(K_2 + iL_2) \quad (\text{B.62})$$

Chaque paire de k_3 (la première par exemple) peut prendre quatre formes différentes. Elle peut être

- (i) réelle pure ($L_1 = 0$)
- (ii) imaginaire pure ($K_1 = 0$)
- (iii) complexe, mais avec $K_1 = \pm \frac{\pi}{D}$ (B.63)
- (iv) complexe, avec $k_1 \neq \pm \frac{\pi}{D}$

Cependant, dans le cas (iv) les deux paires de k_3 deviennent nécessairement

$$K + iL, -(K + iL), K - iL, -(K - iL). \quad (\text{B.64})$$

Pour détailler davantage ces différents cas, nous avons représenté la structure de bande complexe correspondant à la figure III-17, pour $k_{//} D = 3$ (fig. B-

3a). En combinant les différents cas possibles pour le comportement des deux paires de k_3 (éq. (B.63)), on peut distinguer les quatre situations typiques:

i) La première possibilité est d'avoir les deux paires de k_3 réel ($L_1 = L_2 = 0$), comme dans le domaine $6.93 \leq \frac{\omega D}{C_t(AI)} \leq 6.96$ (voir figure B-3b agrandie).

ii) L'autre possibilité est d'avoir l'une des paires réelle ($L_1 = 0$ ou $L_2 = 0$) et la partie réelle de la seconde paire égale à 0 ou $\frac{\pi}{D}$, comme dans le domaine

$$2.15 \leq \frac{\omega D}{C_t(AI)} \leq 2.61 \text{ (} (L_2 = 0, K_1 = 0) \text{ ou } 7.48 \leq \frac{\omega D}{C_t(AI)} \leq 8.62 \text{ (} L_1 = 0, K_2 = \frac{\pi}{D} \text{)}).$$

iii) La troisième possibilité est d'avoir chaque paire de K_3 soit égale à 0 soit à $\frac{\pi}{D}$,

$$\text{comme dans le domaine } \frac{\omega D}{C_t(AI)} \leq 2.14 \text{ (} K_1 = K_2 = 0 \text{) ou } 2.62 \leq \frac{\omega D}{C_t(AI)} \leq 4.4 \text{ (} K_1 = 0, K_2 = \frac{\pi}{D} \text{)}.$$

iv) Dans la quatrième et dernière possibilité les quatre valeurs de k_3 sont complexes et prennent la forme donnée dans l'équation (B.64), comme dans le domaine $4.73 \leq \frac{\omega D}{C_t(AI)} \leq 6.92$ où les quantités $|K|$ et $|L|$ sont représentées. Ces deux dernières possibilités correspondent aux gaps du super-réseau, tandis que les deux premières représentent les bandes de volume (voir aussi fig. III.17, pour $k_{//D} = 3$).

En inversant la matrice $\vec{g}^{-1}(k_3; \tilde{M}, \tilde{M})$ donnée par l'éq. (B.60), les éléments de la fonction réponse dans l'espace des interfaces (dans l'espace réciproque) peuvent s'écrire formellement sous la forme :

$$g_{\alpha\beta}(k_3; v, v', \mu) = \frac{1}{\alpha_0 (\cos(k_3 D) - \eta_1)(\cos(k_3 D) - \eta_2)} \sum_{\mu=-2}^2 R_{\alpha\beta}(v, v', \mu) e^{i\mu k_3 D} \tag{B.65}$$

où α et β représentent les directions de vibrations x, z notées aussi 1, 3 ($\alpha, \beta = x, z$ ou 1,3); v et v' indiquant les positions des interfaces de la couche $i = 1$ du super-réseau ($n, n' = -\frac{d_1}{2}, \frac{d_1}{2}$). $R_{\alpha\beta}(v, v', \mu)$ et α_0 sont des fonctions des paramètres $a_i, b_i, d_i, q_i, d_i, e_i, f_i$ des lames minces $i = 1$ et $i = 2$ qui constituent le super-réseau (éq. (I.63)). η_1 et η_2 sont donnés par les équations (III.41) et (III.42).

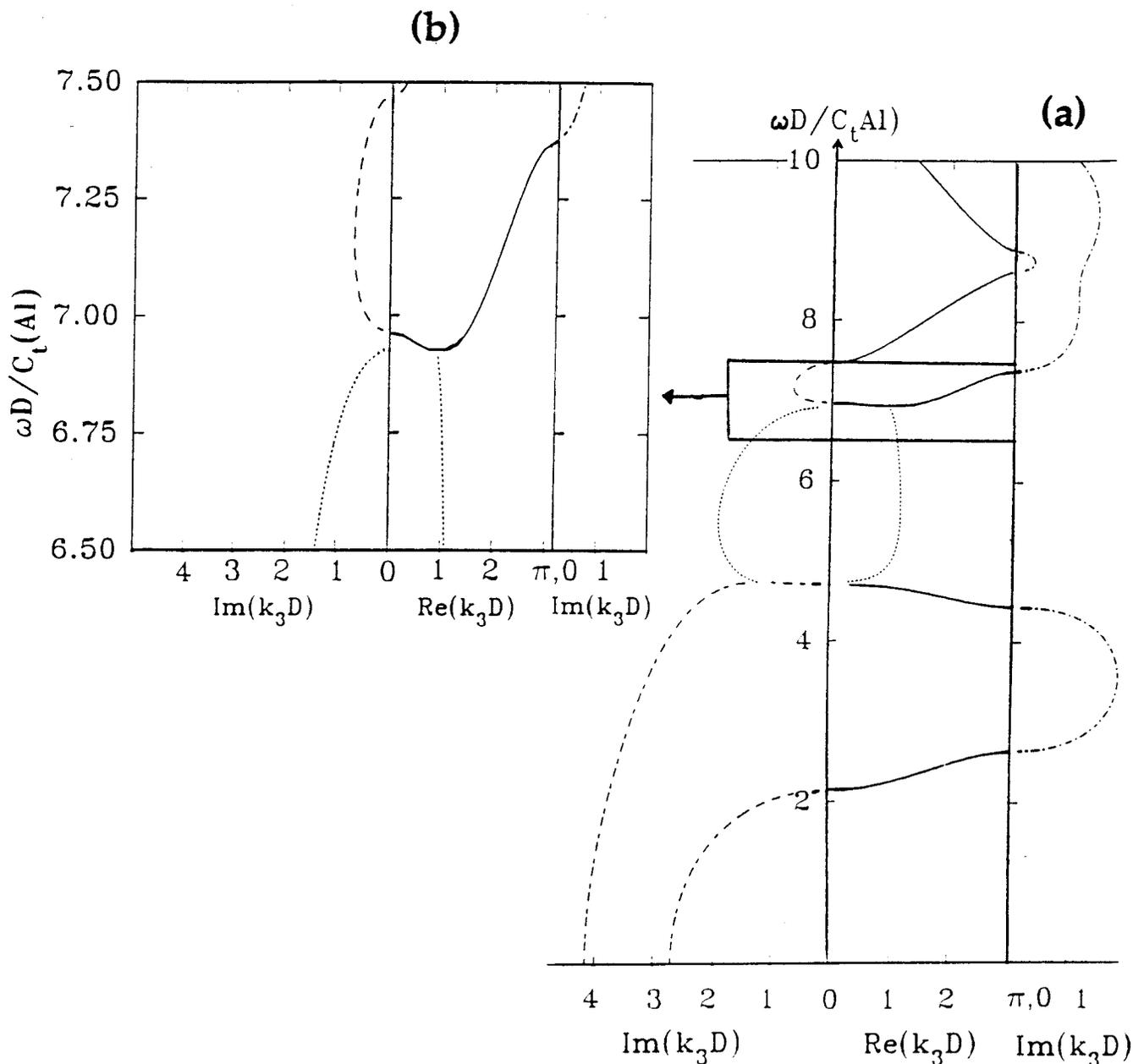


Figure B-3

a) Structure de bandes complexe des ondes sagittale dans le super-réseau W-Al à $k_{//}D = 3$. Les courbes en traits pleins correspondent à k_3 réel (zone comprise entre 0 et $\frac{\pi}{D}$). Les courbes en traits discontinus correspondent à k_3 purement imaginaire (partie gauche de la figure). Les courbes en traits discontinus avec des points correspondent à k_3 imaginaire, lorsque sa partie réelle est égale à $\frac{\pi}{D}$ (partie à droite de la figure). Lorsque k_3 est une quantité complexe (voir éq. (III.45)), les courbes en pointillés donnent sa partie réelle et imaginaire ; dans ce cas la partie imaginaire est représentée sur la partie gauche de la figure.

b) Même figure agrandie dans la région où apparaît le gap indirect.



En utilisant la transformée de fourier réciproque et le théorème des résidus, les éléments de la fonction réponse dans l'espace des interfaces (dans l'espace réel) s'écrivent

$$g_{\alpha\beta}(n, i=1, v; n', i=1, v') = \frac{2}{\alpha_0(\eta_1 - \eta_2)} \sum_{\mu=-2}^2 R_{\alpha\beta}(v, v', \mu) \left[\frac{t_1^{|\mu|+1}}{t_1^2 - 1} - \frac{t_2^{|\mu|+1}}{t_2^2 - 1} \right] \quad (B.66)$$

t_1 et t_2 s'obtiennent à partir de η_1 et η_2 à l'aide de l'éq. (III.11). Ils représentent les deux facteurs $e^{ik_3 D}$ tels que $|e^{ik_3 D}| \leq 1$.

B - 3 - 2 Super-réseau semi-infini

Considérons le super-réseau semi-infini situé dans le demi-espace des x_3 négatifs et terminé par une couche complète de type $i = 1$. Le calcul de la fonction réponse de surface (éq. (III.49)) nécessite, en plus de la connaissance de la fonction réponse de volume \overleftrightarrow{g} (éq. (B.66)), la détermination de l'opérateur réponse de surface $\overleftrightarrow{A}_s^{(1)}(M_s M_s)$ (éq. (III.48)) où $M_s = (n = 0, i = 1, \frac{d_1}{2})$ est la position de la surface perturbée du super-réseau semi-infini.

A partir des équations (III.47) et (III.48), l'opérateur $\overleftrightarrow{A}_s^{(1)}(M_s M_s)$ peut s'écrire sous la forme matricielle :

$$\overleftrightarrow{A}_s^{(1)}(M_s M_s) = \begin{bmatrix} A_{s11}^{(1)} & A_{s13}^{(1)} \\ A_{s31}^{(1)} & A_{s33}^{(1)} \end{bmatrix} \quad (B.67)$$

Les éléments de cet opérateur peuvent s'écrire formellement

$$A_{s\alpha\beta}^{(1)}(M_s M_s) = \frac{2}{\alpha_0(\eta_1 - \eta_2)} \sum_{\mu=0}^2 K_{\alpha\beta}(M_s M_s) \left[\frac{t_1^{\mu+1}}{t_1^2 - 1} - \frac{t_2^{\mu+1}}{t_2^2 - 1} \right] \quad (B.68)$$

où

$K_{\alpha\beta} (M_s M_s)$ est fonction des paramètres a_i, b_i, d_i, e_i, q_i et f_i des lames minces $i = 1$ et $i = 2$ constituant le super-réseau.

Par conséquent, les éléments de la fonction réponse de surface (éq.(III.49) peuvent s'écrire sous forme matricielle

$$\overleftrightarrow{d}_1 (M_s M_s) = \frac{1}{W_1} \begin{bmatrix} g_{11} (1 + A_{s11}^{(1)}) - g_{13} A_{s31}^{(1)} & g_{13} (1 + A_{s11}^{(1)}) - g_{11} A_{s13}^{(1)} \\ g_{31} (1 + A_{s33}^{(1)}) - g_{33} A_{s31}^{(1)} & g_{33} (1 + A_{s11}^{(1)}) - g_{31} A_{s13}^{(1)} \end{bmatrix} \quad (\text{B.69})$$

où

$$W_1 = \det [\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_s^{(1)} (M_s M_s)], \text{ I est la matrice identité,}$$

$g_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 3$) sont obtenus à partir de l'éq. (B.66) et $A_{s\alpha\beta}^{(1)}$ se déduisent à partir de l'éq. (B.68)

En suivant le même raisonnement pour le super-réseau complémentaire, situé dans le demi-espace des x_3 positifs et terminé par une couche complète de type $i = 2$, on obtient l'expression de la fonction réponse de surface $d_2 (M_s M_s)$ (éqs. (III.50) - (III.53)).

Bibliographie du Chapitre III

1. M.V. Klein, I.E.E.E. J. Quant. Elec. QE-22, 1760 (1986).
2. J. Sapriel and B. Djafari-Rouhani, Surface Science Reports 10, 189 (1989).
3. B. Jusserand and M. Cardona, in "Light Scattering in Solids", V, ed. M. Cardona and G. Güntherodt (Springer, Berlin, 1989) p. 49.
4. M. Cardona, in : Proc. Nato ARW on Spectroscopy of Semiconductor Microstructures, ed. G. Fasol, A. Fasolino and P. Lugli (Plenum, New York, 1990).
5. M. Cardona, Superlattices and Microstructures 4, 27 (1989).
6. A. Huber, T. Egeler, W. Etmüller, H. Rothfritz, G. Tränkle and G. Abstreiter, Superlattices and Microstructures 9, 309 (1991).
7. Voir aussi : "Light Scattering in Semiconductor Structures and Superlattices", Ed. D.J. Lockwood and J.F. Young, Plenum Press, New York, 1991.
8. A. Kueny, M. Grimsditch, K. Miyano, I. Banerjee, Charles M. Falco, and Ivan K. Schuller. Phys. Rev. Letters 48, 166 (1982)
9. M.R. Khan, C.S.L. Chun, G. Felcher, M. Grimsditch, A. Kueny, C.M. Falco and I.K. Schuller, Phys. Rev. B 27, 718 (1983).
10. R. Danner, R.P. Huebener, C.S.L. Chun, M. Grimsditch, and Ivan K. Schuller, Phys. Rev. B 33, 3696 (1986).
11. P. Bisanti, M.B. Brodsky, G.P. Felcher, M. Grimsditch, and L.R. Sill, Phys. Rev. B 35, 7813 (1987).
12. J.A. Bell, W.R. Bennett, R. Zanoni, G.I. Stegeman, C.M. Falco and C.T. Seaton, Solid State Communications 64, 1339 (1987).
13. J.A. Bell, W.R. Bennett, R. Zanoni, G.I. Stegeman, C.M. Falco, and F. Nizzoli, Phys. Rev. B 35, 4127 (1987).
14. P. Baumgart, B. Hillebrands, R. Mock, G. Güntherodt, A. Boufelfel and C.M. Falco, Phys. Rev. B 34, 9004 (1986).

15. Sudha Kumar, R. Bhadra, A. Fartash, M. Grimsditch, C. Kim, S.B. Qadri and A.S. Edelstein, Phys. Rev. B 44, 5905 (1991)
16. J.A. Bell, R.J. Zanoni, C.T. Seaton, G.I. Stegeman, W.R. Bennett and C.M. Falco, Appl. Phys. Lett. 51, 652 (1987).
17. J. Sapriel, J.C. Michel, J.C. Tolédano, R. Vacher, J. Kervarec and A. Regreny, Phys. Rev. B 28, 2007 (1983)
18. M. Grimsditch, R. Bhadra, Ivan K. Shuller, F. Chambers and G. Devane, Phys. Rev. B 42, 2923 (1990).
19. H.J. Trodahl, P.V. Santos, G.V.M. Williams and A. Bittar, Phys. Rev. B 40, 8577 (1989).
20. D.J. Lockwood, M.W.C. Dharma - Wardona, G.C. Aers and J.M. Baribeau, Appl. Phys. Lett. 52, 2040 (1988).
21. R.E. Camley, B. Djafari-Rouhani L. Dobrzynski, and A.A. Maradudin, Phys. Rev. B 27, 7318 (1983).
J. Sapriel, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, Surface Science 126, 197 (1983).
22. B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, O. Hardouin Duparc, R.E. Camley and A.A. Maradudin, Phys. Rev. B 28, 1711 (1983).
A. Nougaoui and B. Djafari-Rouhani, Surface Science 185, 125 (1987).
23. A. Nougaoui and B. Djafari-Rouhani, Surface Science 199, 638 (1988) ;
J. Electron. Spectroscopy and related Phenomena 45, 197 (1987).
24. E.M. Khourdifi and B. Djafari-Rouhani, Surface Science, 211/212, 361 (1989).
B. Djafari-Rouhani and E.M. Khourdifi dans la référence III.7, page 139.
25. E.M. Khourdifi and B. Djafari-Rouhani, J. Phys. (Condensed Matter) 1, 7543 (1989).
S. Tamura, Phys. Rev. B 39, 1261 (1989).
26. J. Mendialdua, T. Szwacka, A. Rodriguez and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 39, 10674 (1989) and B 37, 8027 (1988).
E.M. Khourdifi, Thèse de l'Université de Haute Alsace, France (1990).

27. E.H. El Boudouti, B. Djafari Rouhani, E.M. Khourdifi and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 48, 10987 (1993).
28. B. Djafari-Rouhani, E.H. El Boudouti and E.M. Khourdifi, Vacuum 45, 341 (1994).
29. B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 14, 2296 (1976)
B. Djafari-Rouhani, Thèse d'état, Orsay, (1978)
30. L Dobrzynski, Surface Science Reports 11, 139 (1990).
31. L. Esaki and R. Tsu, I.B.M.J. Res. Develop. 14, 61 (1970).
32. M.B. Salamon, Sinha Shanton, J.J. Rhyne, J.E. Cunningham, R.W. Erwin, J. Brocher and C.P. Flynn, Phys. Rev. Letters 56, 259 (1986).
33. Voir par exemple : Hung-Sik Cho and Paul R. Prucnal, Phys. Rev. B 36, 3237 (1987).
L. Dobrzynski, Surface Science 200, 435 (1988).
M. Steslicka, R. Kucharczyk and M.L. Glasser, Phys. Rev. B 42, 1458 (1990).
34. M.L. Bah, A.Akjouj and L. Dobrzynski, Surface Science Rep. 16, 95 (1992).
A. Dereux, J.P. Vigneron, P. Lambin and A.A. Lucas, Phys. Rev. B 38, 5438 (1988) ; Physica Scripta 38, 462 (1988).

Chapitre IV

CHAPITRE IV

ONDES ACOUSTIQUES TRANSVERSES DANS UN SUPER-RESEAU FINI

IV- 1. INTRODUCTION

Dans les expériences de diffusion de la lumière par les phonons acoustiques dans les super-réseaux, l'intérêt principal est en général porté sur les modes repliés qui sont des modes de volume du super-réseau [1,2], tandis que les effets de la taille finie du super-réseau, du substrat (qui sert de support) et de la couche d'encapsulation (qui sert de couche de protection) sont souvent ignorés. Des expériences Raman réalisées sur des super-réseaux ultraminces $\text{Si-Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [3] ont montré l'existence de pics de phonons résonnants, qui ont été interprétés à l'aide d'un modèle de chaîne linéaire comme étant induits par la couche d'encapsulation et par le substrat. Des expériences similaires effectuées très récemment sur des super-réseaux à couches plus épaisses [4] ont révélé l'existence de petits pics Raman résultant de la taille finie du super-réseau: le nombre de ces pics, qui apparaissent entre les structures principales correspondant aux phonons repliés, est en rapport avec le nombre N de périodes dans le super-réseau. Pour cette raison N ne doit pas être trop grand pour que l'espacement entre les modes, du à la taille finie, reste supérieur à la résolution expérimentale de l'ordre de 0.2 cm^{-1} . Lockwood et al [4] ont interprété leurs résultats à partir d'un calcul numérique sur une chaîne linéaire très longue.

Indépendamment de ce travail très récent, nous avons entrepris l'étude des phonons acoustiques de polarisation transverse dans les super-réseaux finis [5] afin d'obtenir de façon exacte les densités locales et totales qui permettent de déduire les différents modes de ces systèmes. En particulier, on peut ainsi repérer les fréquences des modes résultants de la taille finie du super-réseau qui correspondent aux petits pics observés dans l'expérience de Lockwood et al. De plus, à cause de l'interaction substrat - super-réseau - couche d'encapsulation, différents types de modes localisés et résonnants discrets ont été trouvés et leurs propriétés examinées.

Dans ce chapitre, nous présentons la méthode de calcul des fonctions réponses pour un super-réseau fini déposé sur un substrat avec une couche d'encapsulation à la surface (paragraphe IV-2). Les expressions détaillées de ces fonctions sont données dans l'appendice C. Puis nous donnons les expressions analytiques des densités d'états locales et totales obtenues pour un tel super-réseau en fonction de la fréquence ω et du vecteur d'onde $\vec{k}_{//}$ parallèle aux couches (paragraphe IV-3). Dans le paragraphe (IV-4), nous discutons ces résultats à travers quelques illustrations.

IV- 2. FONCTION DE GREEN D'UN SUPER RESEAU FINI DEPOSE SUR UN SUBSTRAT

Considérons la géométrie de la fig. IV-1 où un super réseau mince, composé de N périodes, est déposé sur un substrat homogène. La couche de surface (couche d'encapsulation) est supposée de nature différente des couches en volume.

La procédure de réalisation d'un tel système est la même que celle présentée dans le chapitre III, à savoir

i) On crée, d'abord, le super-réseau fini à partir d'un super-réseau infini en découplant les couches ($n = - 1, i = 2$) et ($n = N + 1, i = 1$).

ii) On remplace la couche ($n = N, i = 2$) par une couche superficielle différente ($i = c$), de paramètres élastiques $\rho^{(c)}, C_{44}^{(c)}$ et d'épaisseur d_c .

iii) On couple le super-réseau obtenu à un autre matériau homogène (substrat) de paramètres élastiques $\rho^{(s)}, C_{44}^{(s)}$ et occupant le demi-espace $x_3 \leq 0$.

Remarquons que dans cette configuration le substrat et la couche d'encapsulation sont tous les deux en contact avec une couche $i = 1$ du super-réseau.

Soit $\overleftrightarrow{d}(M_m, M_m)$ la fonction réponse du système final (Fig. VI-1). Son inverse $\overleftrightarrow{d}^{-1}(M_m, M_m)$ dans l'espace des interfaces M_m est donné par les équations (I.10) et (III.5).

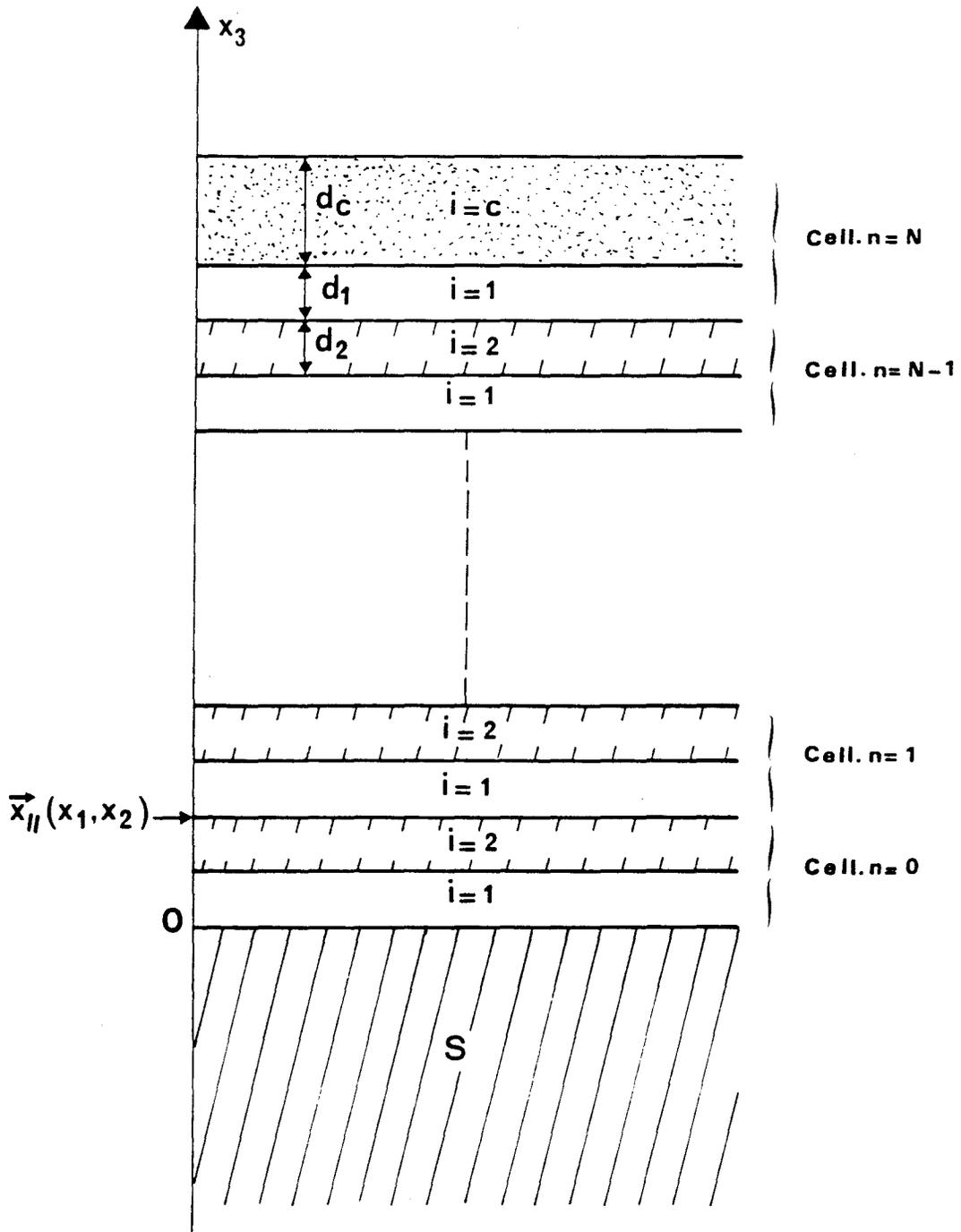
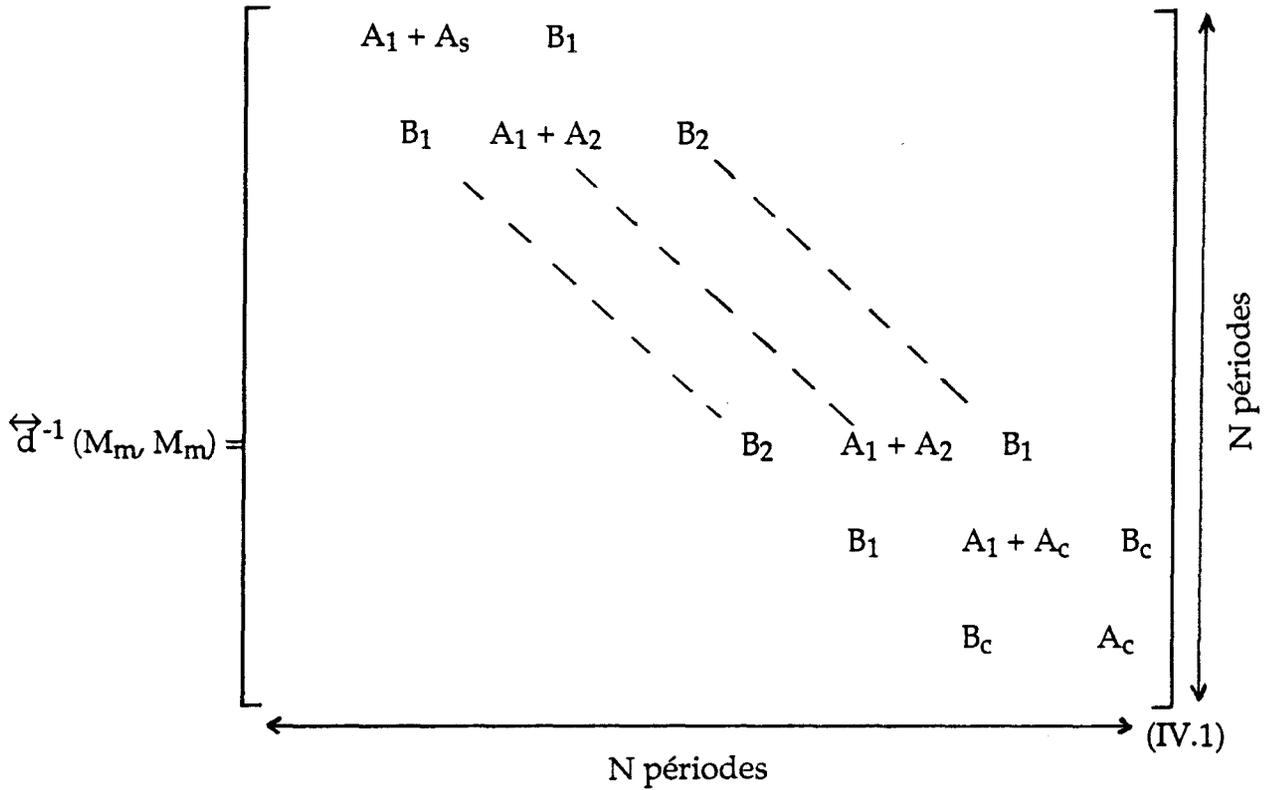


Figure IV-1 Schéma de la géométrie d'un super-réseau fini composé de N périodes, avec la couche de surface ($i = c$) différente de celles de volume ($i = 1, 2$) ; l'ensemble est déposé sur un substrat (s). Les épaisseurs des couches ($i = 1, 2$ et c) sont respectivement d_1 , d_2 et d_c . $D = d_1 + d_2$ est la période du super-réseau et n indique le numéro de maille.



où A_c et B_c sont définis comme A_i et B_i donnés par l'éq. (III.6), tandis que $A_s = -F_s$, où F_s est défini comme F_i donné par l'éq. (III.7).

L'opérateur de perturbation $\overleftrightarrow{V}(M_s, M_s)$ représentant les trois opérations précédentes est obtenu comme dans l'éq. (III.13)

$$\overleftrightarrow{V}(M_s, M_s) = \begin{bmatrix} \frac{F_2 C_2}{S_2} & -\frac{F_2}{S_2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{F_2}{S_2} & \frac{F_2 C_2}{S_2} - F_s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{F_c C_c}{S_c} + \frac{F_2 C_2}{S_2} & \frac{F_c}{S_c} - \frac{F_2}{S_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{F_c}{S_c} - \frac{F_2}{S_2} & -\frac{F_c C_c}{S_c} + \frac{F_2 C_2}{S_2} + \frac{F_1 C_1}{S_1} & -\frac{F_1}{S_1} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{F_1}{S_1} & \frac{F_1 C_1}{S_1} \end{bmatrix} \quad (IV.2)$$

où $M_s = \left\{ (n = -1, i = 1, \frac{d_1}{2}), (n = 0, i = 1, -\frac{d_1}{2}), (n = N, i = 1, \frac{d_1}{2}), (n = N+1, i = 1, -\frac{d_1}{2}), (n = N+1, i = 1, \frac{d_1}{2}) \right\}$

et C_i, S_i, F_i ($i = 1, 2, s, c$) sont définis à partir de l'éq. (III.7).

La connaissance des éléments de la fonction réponse dans l'espace des interfaces du super-réseau infini (éq. (III.10)) et de ceux de l'opérateur de perturbation $\vec{V}(M_s, M_s)$, nous permettent de déduire (éqs. (I.6) et (I.9)) tous les éléments de la fonction de Green nécessaires pour le calcul des densités d'états locales et totales.

IV-3 DENSITES D'ETATS

Connaissant les fonctions réponses données dans l'appendice C, on obtient pour une valeur donnée de $\vec{k}_{//}$, les densités d'états locales et totales pour un super-réseau fini déposé sur un substrat avec une couche d'encapsulation à la surface. Nous indiquerons à la fin de ce paragraphe, comment on peut obtenir à partir de ces quantités des résultats similaires pour deux cas limites, à savoir le cas du super-réseau fini déposé sur un substrat sans la couche d'encapsulation ou placé entre deux substrats homogènes.

IV-3-1 Densités d'états locales

A partir des éléments de la fonction réponse donnés dans l'appendice C, nous obtenons l'expression explicite suivante pour la densité d'états locale à la surface de la couche d'encapsulation ($n = N, i = c$)

$$n_s(\omega^2, k_{//}, N, 0, \frac{d_0}{2}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \left[\frac{S_c}{F_c C_c} (C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t) + \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right] \times \right. \\ \left. \left(\frac{t^2 - 1}{t} + Y_1^s \right) - t^{2N} \left[\frac{S_c}{F_c C_c} (C_1 t - C_2) + \frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right] Y_2^s \right\} \Delta^{-1} \quad (\text{IV.3})$$

$$\text{où} \quad \Delta = \left(\frac{t^2 - 1}{t} + Y_1^s \right) \left(\frac{t^2 - 1}{t} + Y_1^c \right) - t^{2N} Y_2^s Y_2^c, \quad (\text{IV.4})$$

$$Y_1^s = C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1} S_1 S_2 - t - F_s \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right), \quad (\text{IV.5})$$

$$Y_2^s = C_2 - C_1 t - F_s \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right), \quad (\text{IV.6})$$

$$Y_1^c = C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1} S_1 S_2 - t - \frac{F_c S_c}{C_c} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right), \quad (\text{IV.7})$$

$$\text{et } Y_2^c = C_2 - C_1 t - F_c \frac{S_c}{C_c} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) \quad (\text{IV.8})$$

De même les densités d'états locales aux interfaces super-réseau-couche d'encapsulation ou super-réseau-substrat sont données respectivement par

$$n_i(\omega^2) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \left(\frac{t^2 - 1}{t} + Y_1^s \right) - t^{2N} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) Y_2^s \right] \Delta_-^{-1} \quad (\text{IV.9})$$

$$\text{et } n'_i(\omega^2) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \left(\frac{t^2 - 1}{t} + Y_1^c \right) - t^{2N} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) Y_2^c \right] \Delta_-^{-1} \quad (\text{IV.10})$$

VI-3-2 Densités d'états totales

L'expression de la densité d'états totale peut être écrite comme la somme de quatres contributions.

$$n(\omega^2) = n_1(\omega^2) + n_2(\omega^2) + n_c(\omega^2) + n_s(\omega^2)$$

où $n_1(\omega^2)$ et $n_2(\omega^2)$ sont respectivement les contributions des couches 1 et 2 du super-réseau, $n_c(\omega^2)$ et $n_s(\omega^2)$ correspondent respectivement à la couche d'encapsulation et au substrat. Comme la contribution du substrat est une quantité infinie, nous avons soustrait sa partie de volume $n_v(\omega^2)$; ainsi $n_s(\omega^2) = n_v(\omega^2) + \Delta_s n(\omega^2)$

On obtient alors :

$$n_1(\omega^2) = -\frac{\rho^{(1)}}{\pi} \text{Im} \frac{t}{(t^2-1)\Delta_-} \left\{ Y \frac{(1-t^{2(N+1)})}{(t^2-1)} \left\{ \frac{S_1}{\alpha_1 F_1} \left[C_2 S_1 + \frac{1}{2} C_1 S_2 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{d_1 S_2}{2F_2} \left(1 - \frac{F_2^2}{F_1^2} \right) \right\} + (N+1) \Delta_+ \left\{ \frac{d_1}{F_1} \left[C_2 S_1 + \frac{1}{2} C_1 S_2 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{S_1 S_2}{2\alpha_1 F_2} \left(1 - \frac{F_2^2}{F_1^2} \right) \right\} \right\} \quad (\text{IV.11})$$

$$n_2(\omega^2) = -\frac{\rho^{(2)}}{\pi} \text{Im} \frac{t}{(t^2-1)\Delta_-} \left\{ Y \frac{(1-t^{2N})t}{(t^2-1)} \left\{ \frac{S_2}{\alpha_2 F_2} \left[C_1 S_2 + \frac{1}{2} C_2 S_1 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{d_2 S_1}{2F_1} \left(1 - \frac{F_1^2}{F_2^2} \right) \right\} + N \Delta_+ \left\{ \frac{d_2}{F_2} \left[C_1 S_2 + \frac{1}{2} C_2 S_1 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{S_1 S_2}{2\alpha_2 F_1} \left(1 - \frac{F_1^2}{F_2^2} \right) \right\} \right\} \quad (\text{IV.12})$$

$$n_c(\omega^2) = -\frac{\rho^{(c)}}{2\pi} \text{Im} \frac{1}{\Delta_-} \left\{ \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) \left\{ \frac{S_c}{\alpha_c C_c} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) + d_c \left[\left(C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t \right) \frac{S_c}{F_c C_c} + \frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right] \right\} \right. \\ \left. - t^{2N} Y_2^s \left\{ \frac{S_c}{\alpha_c C_c} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) + d_c \left[\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} + \frac{S_c}{\alpha_c C_c} (C_1 t - C_2) \right] \right\} \right\} \quad (\text{IV.13})$$

$$\Delta_{sn}(\omega^2) = -\frac{\rho^{(s)}}{\pi} \text{Im} \frac{1}{2\alpha_s} \left\{ \frac{1}{2F_s} + \frac{1}{\Delta_-} \left[\left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^c \right) - t^{2N} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) Y_2^c \right] \right\} \quad (\text{IV.14})$$

où

$$Y = \frac{(t^2-1)}{t} (Y_2^s + Y_2^c) + 2 Y_1^s Y_2^c \quad (\text{IV.15})$$

et

$$\Delta_+ = \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^c \right) + t^{2N} Y_2^s Y_2^c \quad (\text{IV.16})$$

Les ondes localisées sont données par les pôles de la fonction de Green, à savoir

$$\Delta_- = 0 \quad (\text{IV.17})$$

VI-3-3 Cas particuliers

A partir de ces expressions générales (IV.11) - (IV.14), on peut déduire facilement deux cas limites correspondant à un super-réseau fini sans la couche d'encapsulation (i.e. $d_c = 0$, donc $S_c = 0$) ou déposé entre deux substrats semi-infinis (i.e. $d_c \rightarrow \infty$, donc $\frac{S_c}{C_c} \rightarrow 1$). Cependant, dans ce dernier cas, on soustrait à nouveau la contribution de volume du second substrat ; à la place de $n_c(\omega^2)$ nous aurons alors une quantité $\Delta_{cn}(\omega^2)$ dont l'expression est la même que celle de $\Delta_{sn}(\omega^2)$ (éq.(IV.14)) en remplaçant l'indice "s" par "c".

Une autre configuration possible est celle où le substrat est en contact avec le matériau 1 du super-réseau, et la couche d'encapsulation est en contact avec le matériau 2. Les densités d'états locales et totales correspondant à ce deuxième cas sont différentes de celles données précédemment. Nous avons simplement donné leurs expressions dans l'appendice C.

Les différentes expressions analytiques amènent à penser qu'à priori certaines ondes acoustiques dans les super-réseaux finis vont dépendre fortement de la nature du substrat et de la couche d'encapsulation, ainsi que de la nature des couches du super-réseau en contact avec ces matériaux. Nous discuterons tous ces points en détail dans les applications numériques ci-dessous.

IV.4 ILLUSTRATIONS ET DISCUSSIONS DES RESULTATS

Dans ce qui suit, nous donnons quelques illustrations relatives à un super-réseau fini GaAs-AlAs déposé sur un substrat de Si, avec ou sans couche d'encapsulation de GaAs d'épaisseur différente (sous-paragraphes IV-4-1 et IV-4-2). Puis nous considérons un tel super-réseau fini placé entre deux substrats de Si (sous-paragraphe IV-4-3). Les épaisseurs des couches d_1 et d_2 du super-réseau sont supposées égales, la période étant $D = d_1 + d_2$. Les paramètres élastiques des matériaux GaAs, AlAs, et Si sont donnés dans le tableau III-1.

IV.4.1 Super-réseau fini sans la couche d'encapsulation

La figure IV-2 donne les modes de Love, que l'on peut déduire à partir des pics de densités d'états (voir aussi fig. IV-3), pour un super-réseau fini GaAs-AlAs déposé sur un substrat de Si, en supposant qu'une couche complète AlAs est en surface et à l'interface avec le substrat. Afin de bien illustrer les modes discrets de ce super-réseau, nous avons choisi sur la fig. IV-2 un super-réseau mince avec $N = 5$ couches de GaAs et $N+1 = 6$ couches d'AlAs seulement. Les branches situées au-dessous de la bande de volume du substrat correspondent aux ondes de Love confinées dans le super-réseau fini et décroissant exponentiellement dans le substrat ; elles apparaissent comme des fonctions δ dans la densité d'états. L'extension de ces courbes dans la bande du substrat représente les modes résonnants (appelés aussi Leaky waves) associés à l'adsorption du super-réseau fini sur le substrat homogène. Les structures fines observées récemment [4] dans des expériences Raman sur les super-réseaux Si-Si_{1-x}Ge_x, semblent être les analogues de ces modes, dans le cas des vibrations longitudinales et pour $k_{//} D = 0$.

Les courbes de la figure IV-2 peuvent aussi être classées, suivant leur caractère oscillatoire (courbes en traits pleins) ou localisé dans le super-réseau. Les branches à caractère localisé décroissent soit à partir de la surface (branche en traits discontinus avec des points, notée aussi s comme surface) ou à partir de l'interface super-réseau-substrat (branches en traits discontinus, notées i comme interface). Le

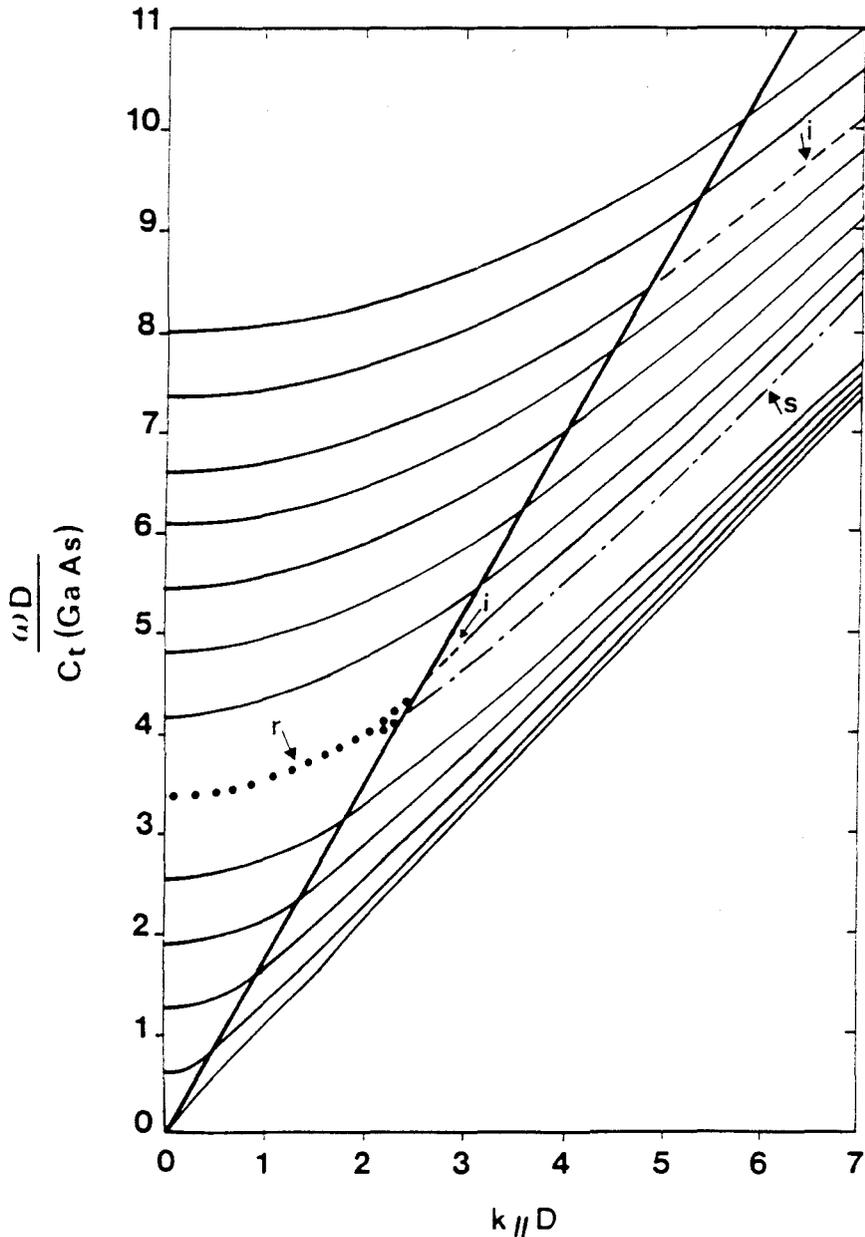


Figure IV-2 Dispersion des ondes de Love correspondant à un super-réseau fini GaAs-AlAs déposé sur un substrat de Si. le super-réseau contient $N = 5$ couches de GaAs et 6 couches d'AlAs. La droite épaisse correspond à la vitesse du son dans le substrat, séparant les modes de Love confinés à l'intérieur du super-réseau et leur prolongement sous forme de résonance à l'intérieur de la bande de volume du substrat. Lorsque les courbes de dispersion appartiennent aux minibandes du super-réseau, elles sont représentées avec des lignes continues. Au contraire, lorsqu'elles sont situées à l'intérieur des minigaps, elles sont représentées soit par des traits discontinus avec des points (appelées s), soit par des traits discontinus (appelées i) décrivant les ondes atténuées dans le super-réseau, respectivement à partir de la surface libre et à partir de l'interface super-réseau-substrat. La résonance obtenue par le mélange d'un état de surface et d'un état d'interface est notée r. Des quantités sans dimension sont reportées sur les deux axes. C_t (GaAs) est la vitesse du son transverse dans GaAs.

nombre de branches correspondant aux ondes oscillatoires dans le super-réseau augmente avec le nombre de périodes N (voir aussi fig. IV-6 pour $N = 20$ qui sera discutée plus loin), conduisant aux bandes de volume d'un super-réseau infini dans la limite $N \rightarrow \infty$. D'autre part, les modes localisés de surface et d'interface qui apparaissent sur la fig IV-2 pour $N = 5$, varient relativement peu avec N lorsqu'on tend vers la limite d'un super-réseau semi-infini ($N \rightarrow \infty$). Cependant, en raison du caractère fini du super-réseau, deux branches de surface et d'interface peuvent interagir, lorsqu'elles tombent à l'intérieur du même minigap du super-réseau. ceci se produit, par exemple, pour $k_{//} D \cong 2.3$ sur la fig. IV-2 (courbe en pointillés).

Le comportement général des états résonnants dans la densité d'états est illustré dans la fig. IV-3 où les largeurs des pics sont dues à l'interaction entre les états du super-réseau et le substrat. Nous constatons, en particulier, un mélange des états de surface et d'interface (autour de $k_{//} D \cong 2.3$ sur la fig. IV-2) en un pic résonnant r dont le poids est environ égal à deux états. Ce pic reste très proche du mode de surface du super-réseau semi-infini. L'interaction entre les états de surface et d'interface disparaît lorsqu' on augmente N . Ce découplage se produit dans cet exemple pour N de l'ordre de 10 à 15.

Afin de compléter cette étude, nous avons examiné aussi la distribution spatiale de cette résonance r dans le super-réseau en présentant (Fig. IV-4) la densité d'états locale intégrée sur chaque période du super-réseau dans le cas $N = 5$ et $N = 20$. Les deux séries de résultats présentent à la fois des similitudes et des différences. Dans les deux cas, l'intensité des pics dans la densité d'états décroît à partir de la surface en pénétrant dans le super-réseau. C'est une conséquence de l'atténuation de l'onde acoustique de surface. De même, dans les deux cas, la densité d'états au voisinage de l'interface avec le substrat reste très large couvrant tout le minigap du super-réseau. Par contre, en augmentant N la densité d'états à côté de la surface devient très étroite et presque similaire à une fonction delta (Fig. IV-4b). A côté de l'interface, la densité d'états perd quelques petites structures qu'elle contenait dans le cas d'un super-réseau mince ($N = 5$). La modification de la densité d'états à l'intérieur du substrat, due à la déposition du super-réseau sur sa surface, est une faible quantité oscillant autour du zéro.

Afin de voir l'influence de la nature des couches du super-réseau qui sont en surface et à l'interface, nous avons représenté (Fig. IV-5) la courbe de dispersion du super-réseau fini terminé par une couche AlAs à la surface, tandis que la couche en

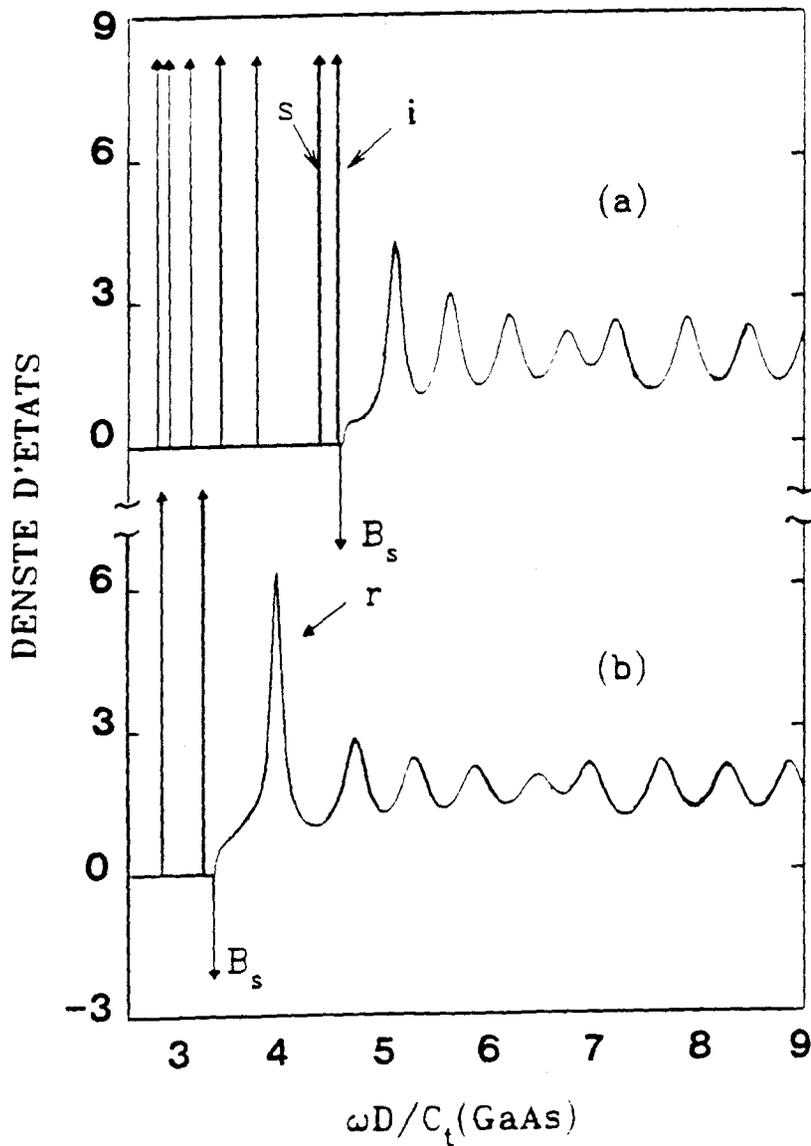


Figure IV-3 Densité d'états $n(\omega, k_{//})$, en unité de D/C_t (GaAs), pour $k_{//} D = 2.6$ (a) et $k_{//} D = 1.9$ (b) de la fig. IV-2. les modes de Love localisés dans le super-réseau donnent lieu à des pics δ représentés par des flèches. Les symboles s, r et i ont la même signification que sur la fig. IV-2. (La contribution de volume du substrat à la densité d'états est soustraite. B_s est la fonction delta de poids $-\frac{1}{4}$ qui apparaît en bas de la bande de volume du substrat).



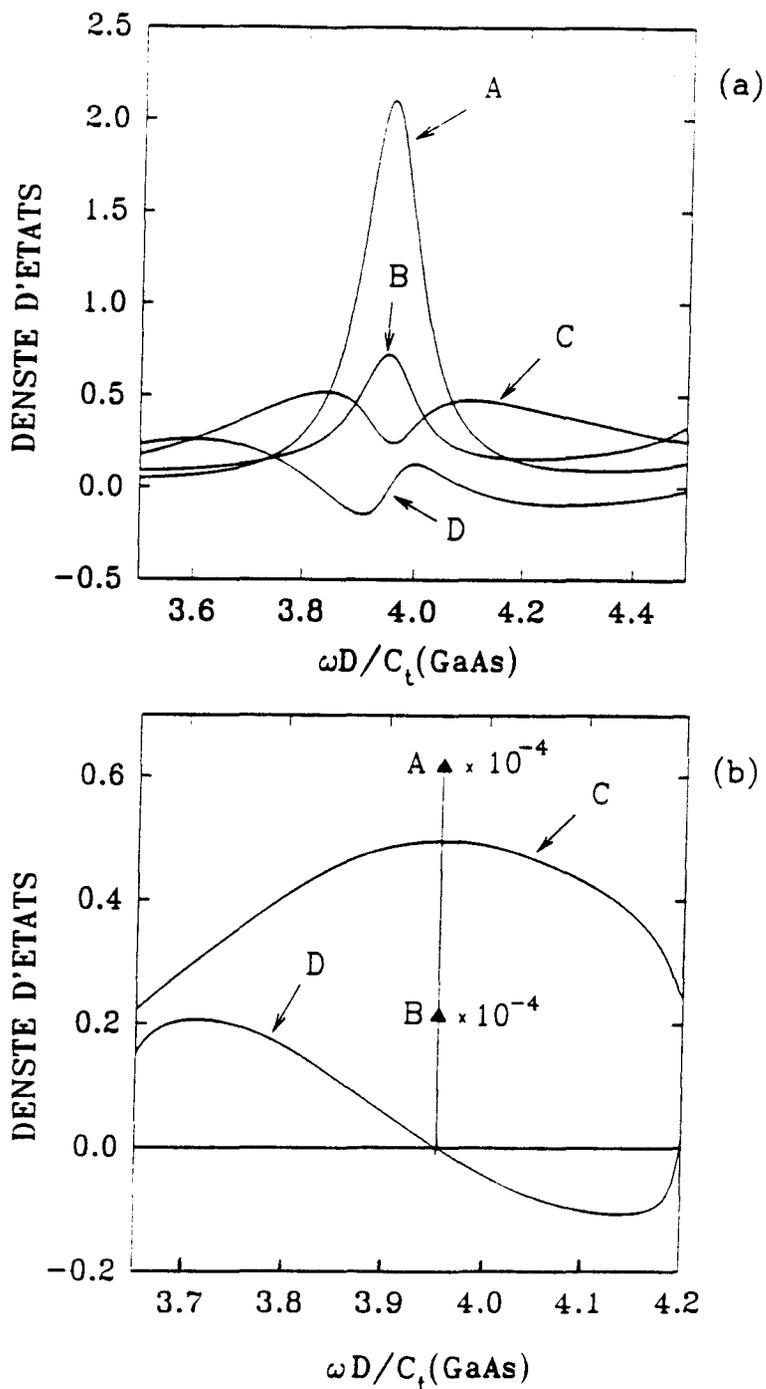


Figure IV-4 a) Distribution spatiale de la résonance r décrite dans la fig. IV-3 b : Les courbes A et B représentent respectivement la densité d'état locale intégrée sur la première et la troisième période du super-réseau à partir de la surface. La courbe C se réfère à la même quantité pour la période en contact avec le substrat, tandis que la courbe D donne la modification de la densité d'états du substrat après la déposition du super-réseau sur sa surface.

b) Même chose que a) mais pour un super-réseau contenant $N = 20$ couches de GaAs et 21 couches d'AlAs. Notons que la densité d'états locale à la surface devient maintenant comme une fonction delta.



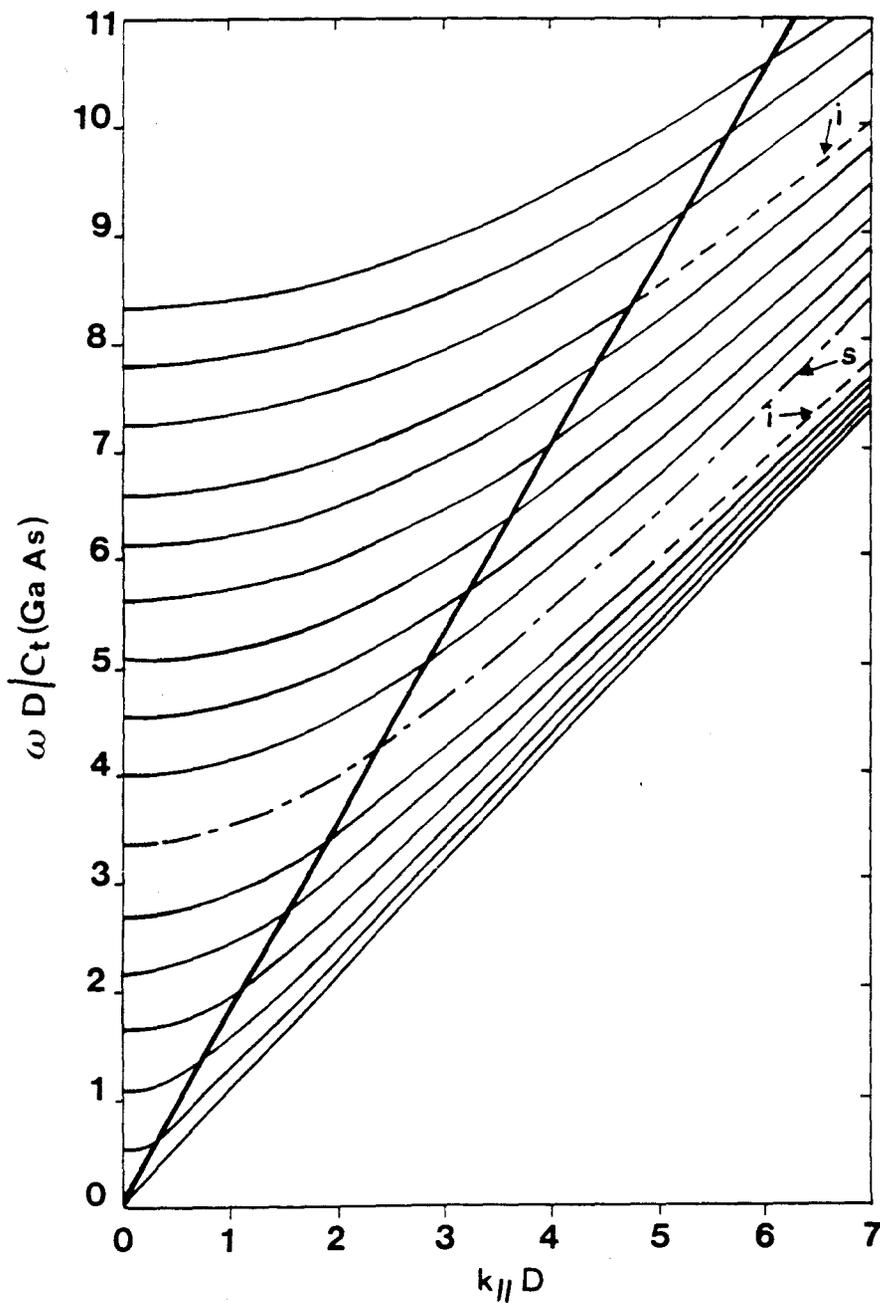


Figure IV-5 : Même chose que la fig. IV-2, mais lorsqu'une couche AlAs du super-réseau est à la surface et une couche GaAs est en contact avec le substrat. Le nombre de couches GaAs et AlAs dans le super-réseau est $N = 5$.

contact avec le substrat est de type GaAs. Le nombre de couches GaAs et AlAs dans le super-réseau est $N = 5$. On trouve sur la fig. (IV-5) le mode de surface (noté s) qui est très proche de celui discuté précédemment, et qui pénètre dans la bande du substrat sous forme de résonance bien définie. Par contre les modes d'interface sont différents de ceux de la fig. IV-2. Les modes de surface et d'interface restent ici séparés les uns des autres et ne présentent aucune interaction entre eux. Les mêmes constatations peuvent être faites dans les deux autres cas, à savoir, le cas où la couche GaAs du super-réseau est à la fois en surface et à l'interface avec le substrat et le cas où la couche GaAs est à la surface et la couche AlAs est en contact avec le substrat.

VI.4.2 Super réseau-fini avec une couche d'encapsulation à la surface

Nous avons montré dans le chapitre précédent [6] que les modes localisés de surface dans les super-réseaux semi-infinis, sont très sensibles à la nature et à l'épaisseur de la couche superficielle (couche d'encapsulation). Considérons maintenant le cas d'un super-réseau fini avec $N = 20$ périodes et une couche d'encapsulation de GaAs d'épaisseur d_c variable. La figure IV-6 représente la fréquence des modes discrets en fonction de d_c , pour une valeur donnée de $k_{//}$, à savoir $k_{//} D = 3$. La classification de ces courbes est similaire à celles des figs. IV-2 et IV-5. Nous nous sommes intéressés surtout aux branches L et R (courbes en traits discontinus avec des points) associées à la surface libre du super-réseau et qui sont plutôt proches des modes de surface d'un super-réseau semi-infini (voir aussi fig. III-6). Les branches L correspondent aux ondes qui s'atténuent dans le substrat. Elles apparaissent quand la branche la plus basse située dans la bande de volume émerge à partir de celle-ci (un effet qui se reproduit périodiquement en fonction de d_c). Ces branches interagissent avec celle correspondant au mode localisé à l'interface super-réseau-substrat (courbe en trait discontinu), donnant lieu à une levée de dégénérescence aux points de croisement autour de $\frac{d_c}{d_2} \cong 1.45, 3.1, \text{etc.}$ Cette interaction est plus importante pour des valeurs faibles de N , comme illustrée sur la figure IV-7 autour de $\frac{d_c}{d_2} \cong 1.45$. Les branches R sont résonnantes avec la bande de volume du substrat ; les pics correspondants dans la densité d'états deviennent larges et décroissent en intensité lorsque N décroît, comme illustrée sur la fig. IV-8, pour $\frac{d_c}{d_2} = 1.8$. Ce comportement peut être attribué au caractère fini du super-réseau et à l'interaction des modes du super-réseau encapsulé avec le substrat. En effet, dans la limite $N \rightarrow \infty$, le mode résonnant à $\frac{d_c}{d_2} = 1.8$ devient un mode localisé de surface du super-réseau semi-infini (voir aussi fig. III-6) et apparaît comme un pic delta dans la densité d'états. Nous pouvons pousser plus loin cette discussion en considérant aussi

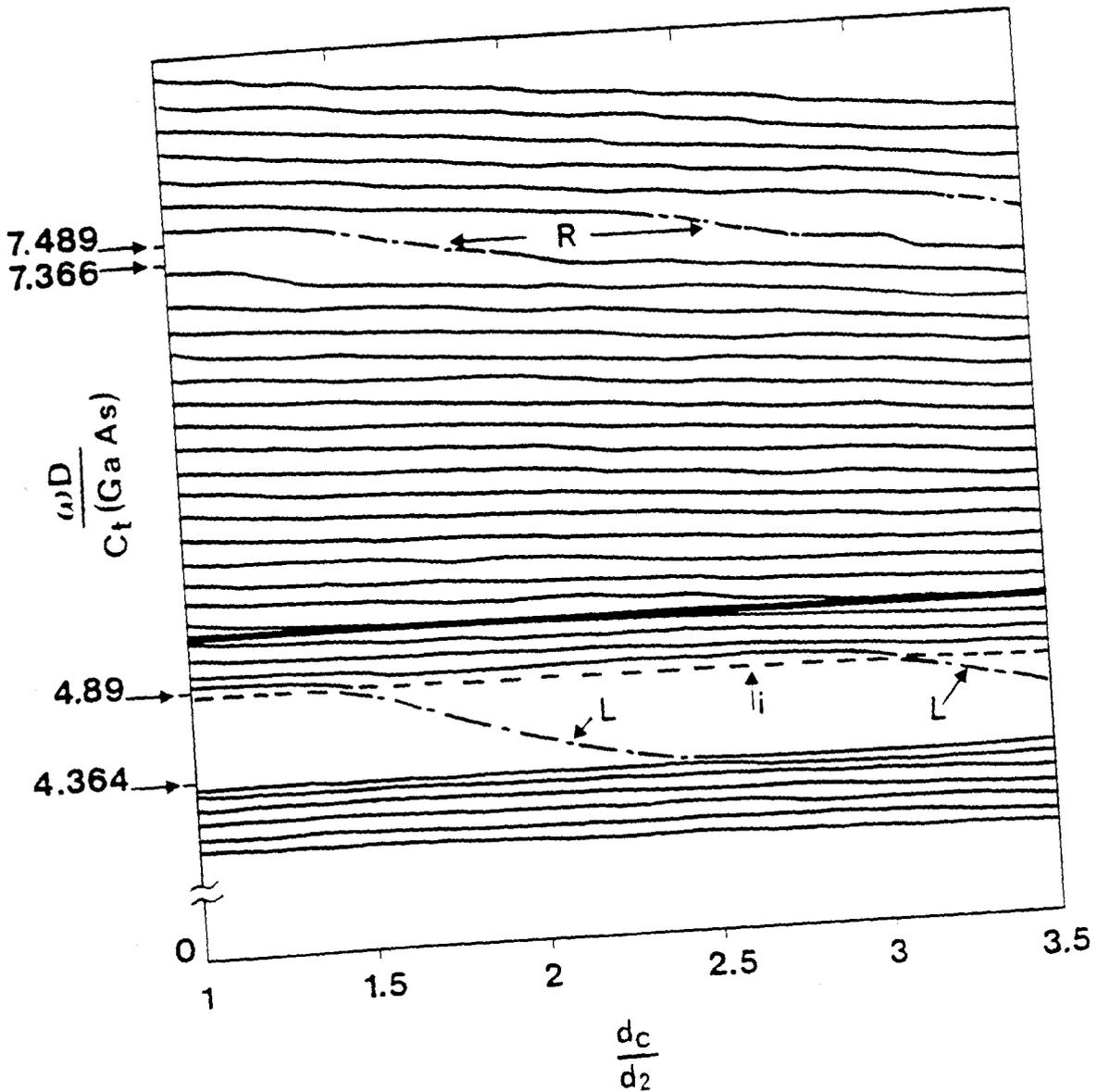


Figure IV-6 : Variation des fréquences des modes de Love en fonction de l'épaisseur de la couche d'encapsulation. Le super-réseau contient $N = 20$ périodes de GaAs-AlAs, avec une couche GaAs d'épaisseur d_c variable à la surface. Le vecteur d'onde $k // D = 3$. Le symbole i réfère au mode localisé à l'interface super-réseau sur substrat. L et R indiquent les modes de la surface libre du super-réseau qui sont respectivement, soit évanescent soit propagatifs dans le substrat. La droite épaisse indique la vitesse du son dans la substrat ; les flèches donnent les limites des minigaps du super-réseau.

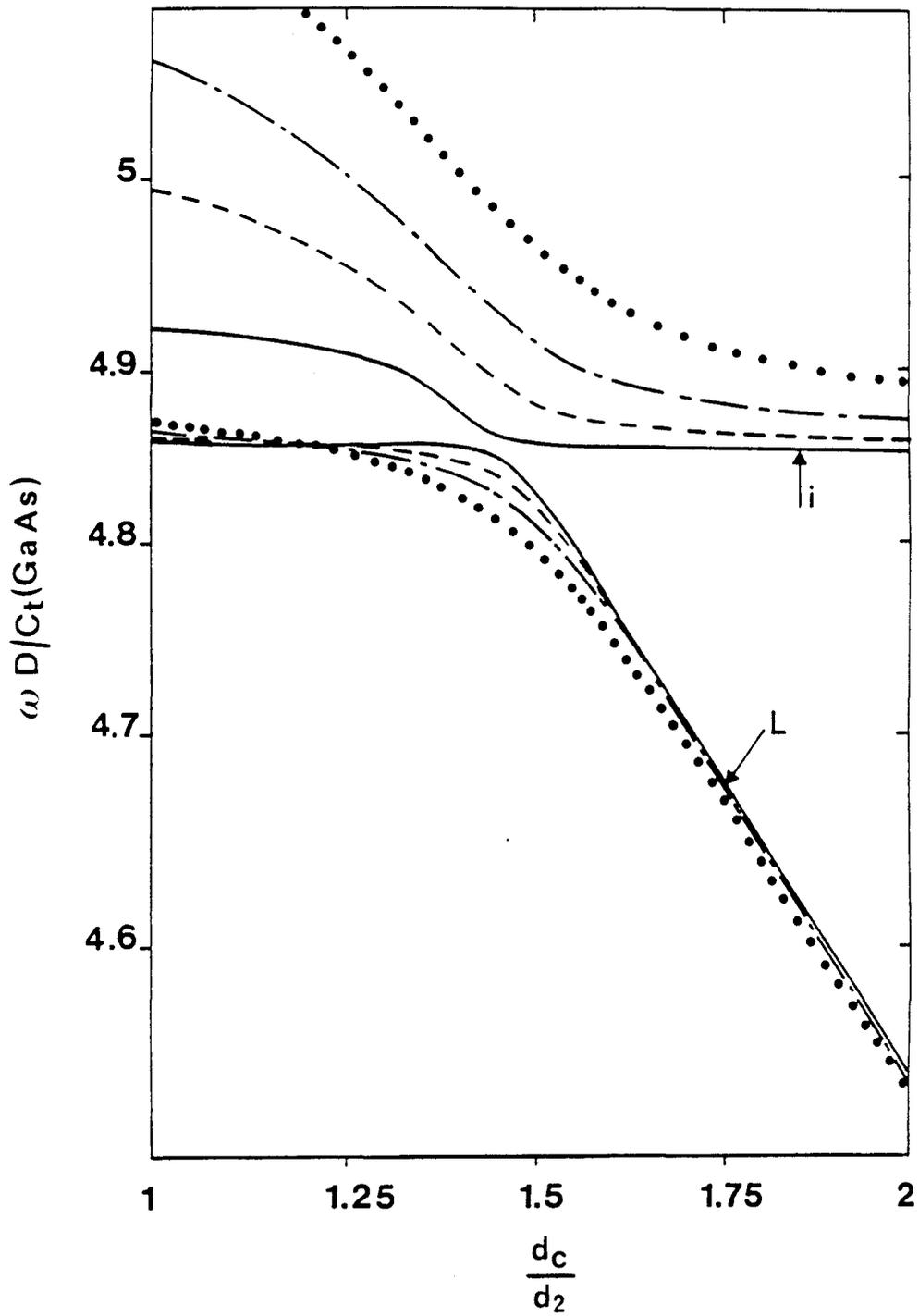


Figure IV-7 : L'interaction entre l'état de surface et l'état d'interface au voisinage de $\frac{d_c}{d_2} = 1.45$ dans la fig. IV-6 ; cette interaction est illustrée pour plusieurs valeurs du nombre de périodes N du super-réseau : $N = 20$ (—), 10 (---), 7 (-·-·-) et 5 (····).

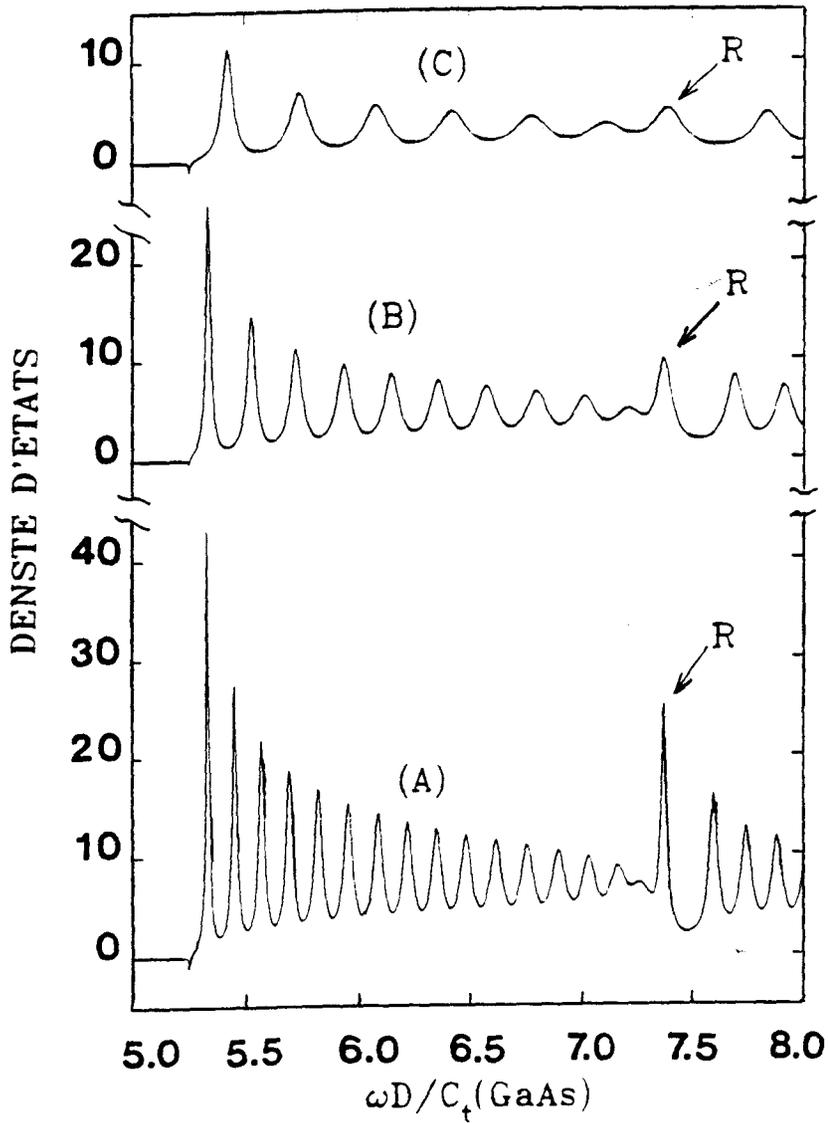


Figure IV-8 : Densité d'états $n(\omega, k_{//})$, à $k_{//} D = 3$ et $\frac{d_c}{d_2} = 1.8$, et pour plusieurs valeurs de N : $N = 20$ (A), 12 (B) et 7 (C). R correspond à la résonance décrite dans la fig. IV-6. Dans cette figure, nous avons omis la représentation des pics deltas.

la densité locale intégrée sur chaque période du super-réseau (fig. IV-9); le mode de surface R à $\frac{d_c}{d_2} = 1.8$ s'étend sur 10 à 15 périodes du super-réseau, et par conséquent son interaction avec le substrat est significative tant que N n'excède pas cet ordre de grandeur.

IV.4.3 Super réseau fini placé entre deux substrats homogènes

Nous avons finalement, illustré dans les figures (IV-10 et IV-11) les courbes de dispersion d'un super-réseau fini GaAs-AlAs déposé entre deux substrats homogènes de Si. Cette géométrie, qui a aussi été étudiée dans la référence [7] par la méthode de la matrice de transfert, est intéressante pour la transmission résonnante des ondes acoustiques d'un substrat à l'autre.

La figure IV-10 se réfère à un super-réseau avec $N = 5$ périodes, lorsque les deux substrats de Si sont en contact avec les couches AlAs du super-réseau (sandwich symétrique). A part, les modes oscillatoires à l'intérieur des bandes du super-réseau (courbes en traits pleins), on peut observer encore les modes associés à l'interface super-réseau-substrat (courbes en traits discontinus). Ces modes qui sont deux fois dégénérés pour un super-réseau épais, interagissent ensemble pour un super-réseau mince, lorsqu'ils tombent à l'intérieur du même minigap. Cela se produit dans la figure IV-10 à la fois dans le premier et le second minigap du super-réseau. Cependant, la résonance r qui résulte du mélange de deux états d'interface est plutôt large et difficile à caractériser.

Sur la figure IV-11 nous avons représenté les courbes de dispersion dans le cas d'un super-réseau fini terminé par une couche AlAs d'un côté et GaAs de l'autre (sandwich asymétrique). On peut distinguer sur cette figure aussi les modes oscillatoires dans le super-réseau et les modes d'interface; cependant aucune interaction entre ces derniers modes n'existe dans ce cas.

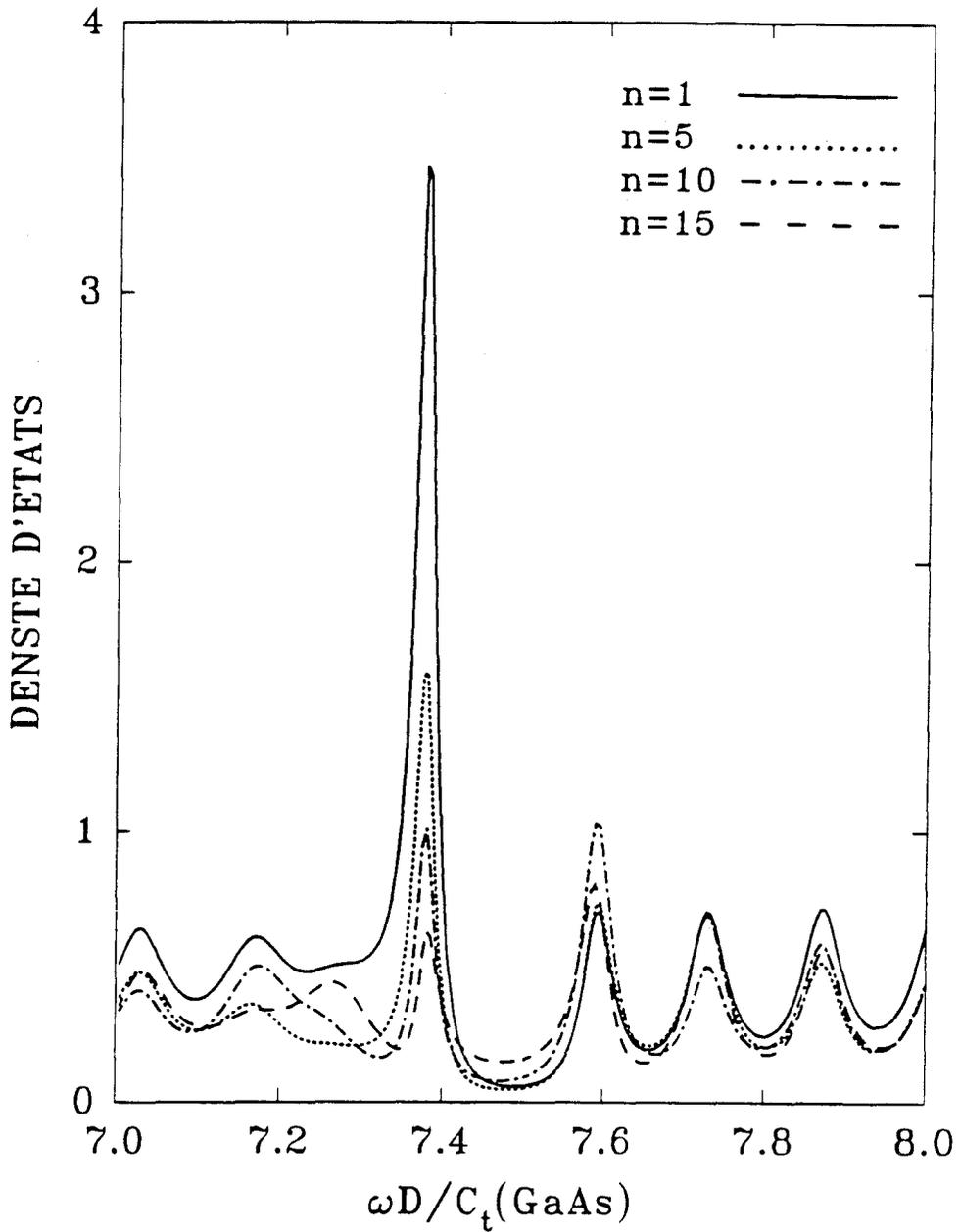


Figure IV-9 : Distribution spatiale de la résonance R décrite dans les figs (IV-6) et (IV-8A). Les quatre courbes représentent respectivement la densité d'états locale intégrée sur la période $n = 1$ (—), 5 (.....), 10 (- . - . - .) et 15 (- - - - -), à partir de la surface d'un super-réseau fini, contenant $N = 20$ périodes GaAs-AlAs, déposé sur un substrat de Si.

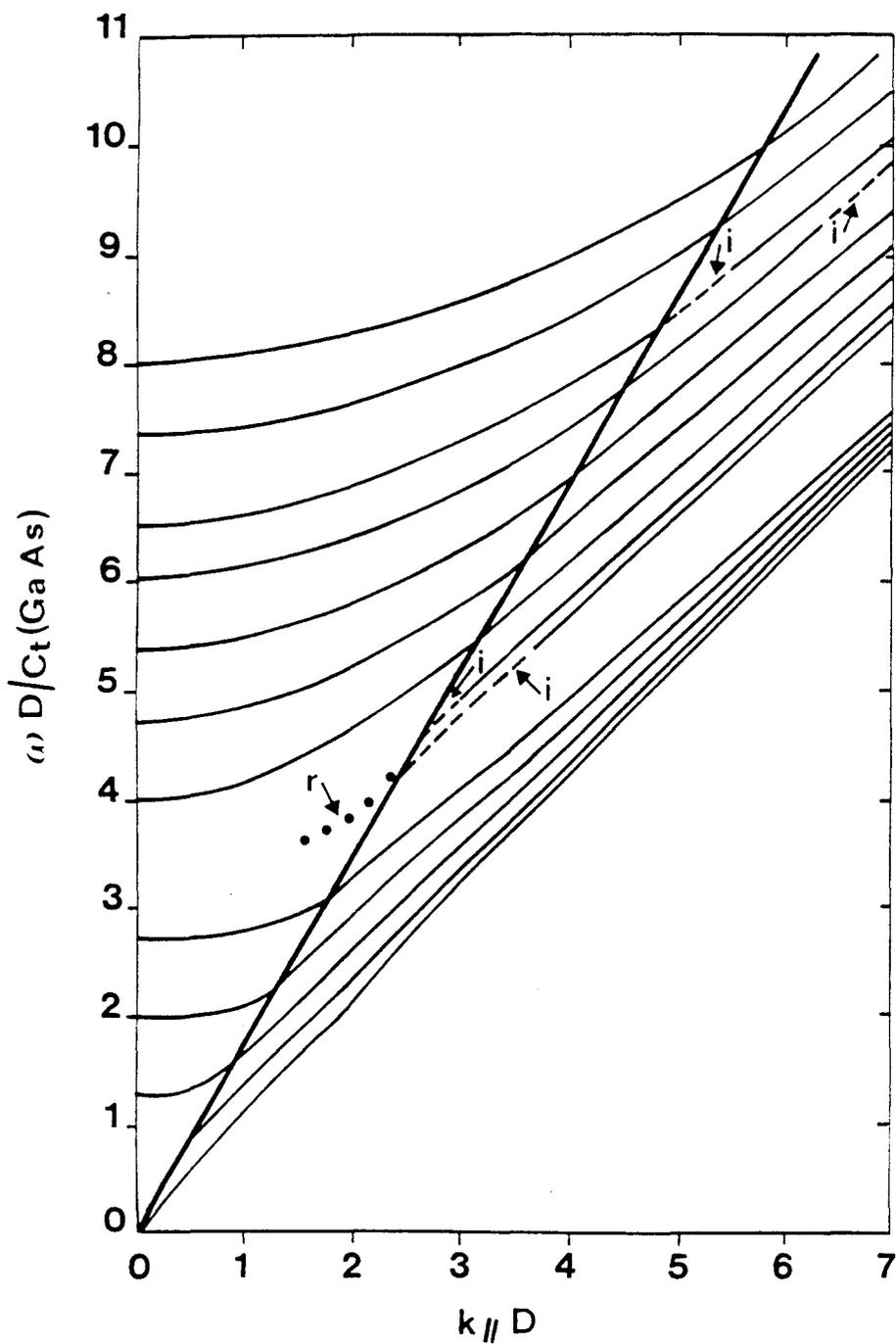


Figure IV-10: Dispersion des ondes localisées et résonnantes associées au super-réseau fini GaAs-AlAs déposé entre deux substrats de Si. Les deux couches du super-réseau en contact avec les deux substrats sont supposées de type AlAs (sandwich symétrique). Les paramètres et symboles utilisés sont les mêmes que ceux des figs. (IV-2) et (IV-5).

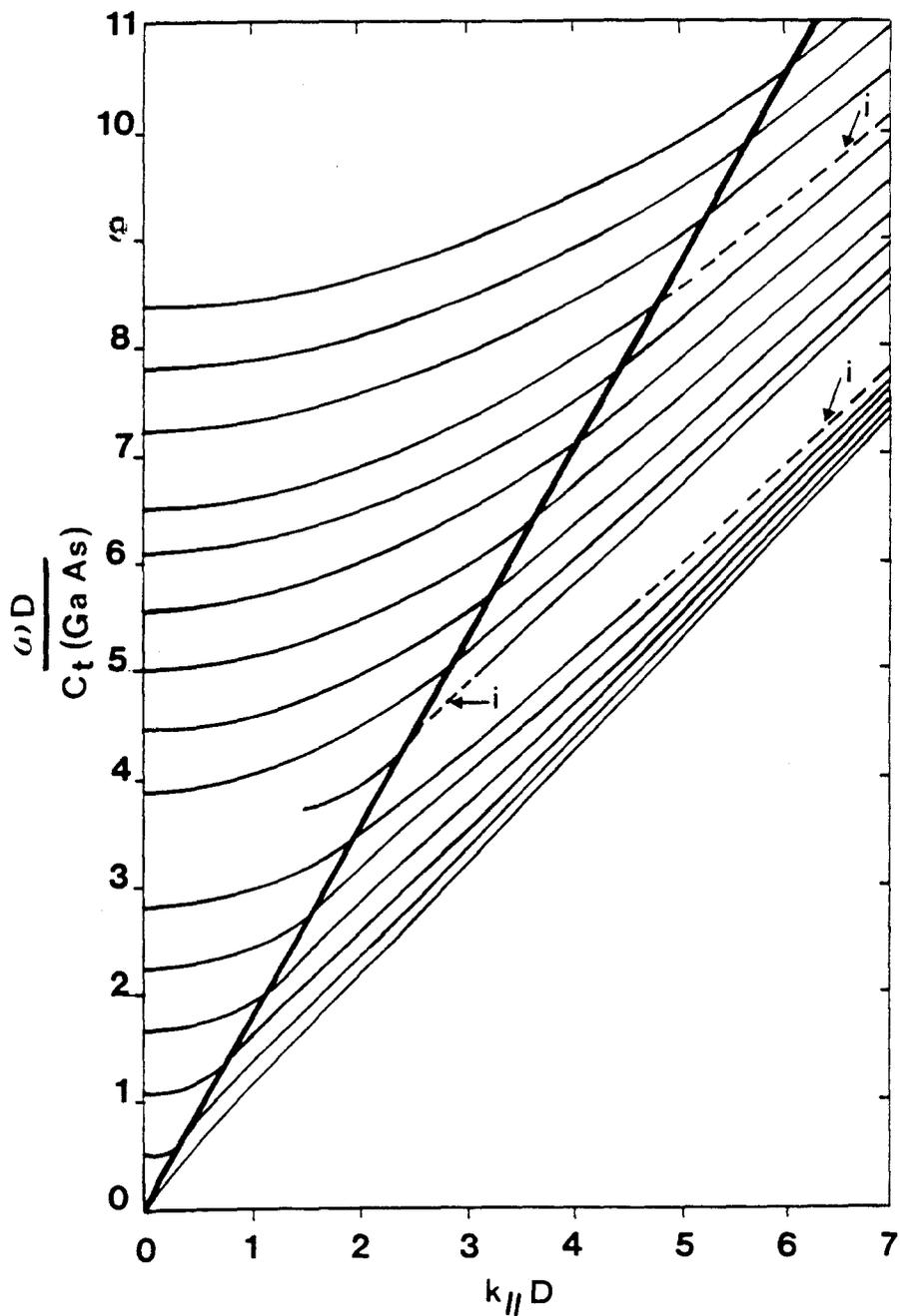


Figure IV-11: Même chose que la fig. IV.10, mais lorsque les deux couches du super-réseau en contact des deux substrats sont respectivement de type AlAs et GaAs (sandwich asymétrique).



IV.5 CONCLUSION

Les expressions analytiques des densités d'états locales et totales que nous avons obtenues pour un super-réseau fini déposé sur un substrat, avec ou sans couche d'encapsulation à la surface ou placé entre deux substrats homogènes, nous ont permis d'étudier de façon globale les ondes acoustiques du système substrat-super-réseau fini-couche d'encapsulation, ainsi que celles du système sandwich substrat-super-réseau fini-substrat. En effet, les modes discrets du super-réseau fini isolé deviennent, à cause de leur interaction avec le substrat, soit des modes localisés dans le super-réseau (décroissant dans le substrat), soit des états résonnants à l'intérieur de la bande de volume du substrat. La dispersion des ondes et leur distribution spatiale sont discutées en fonction du nombre de période N du super-réseau et de la nature du substrat et de la couche d'encapsulation. En augmentant N , on retrouve la bande de volume du super-réseau, ainsi que les modes localisés associés à la surface libre d'un super-réseau ou à son interface avec un substrat. Pour un super-réseau mince, ces derniers modes interagissent ensemble lorsqu'ils sont localisés dans le même minigap.

Très récemment, des expériences Raman de haute résolution effectuées sur des super-réseaux finis $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, ont montré l'existence d'une structure fine formée d'un ensemble de pics équidistants qui séparent les phonons acoustiques longitudinaux repliés du super-réseau. Ces petits pics semblent être les analogues des ondes discrètes du super-réseau fini étudié dans ce chapitre.

Finalement, signalons qu'une autre limite souvent utilisée dans des expériences en diffusion Brillouin [8 - 16] ou par d'autres techniques acoustiques [13], est celle où les longueurs d'ondes acoustiques sont grandes par rapport à la période D du super-réseau ($k_{//} D \ll 1$). Dans ce cas, le super-réseau se comporte comme un milieu effectif homogène dont les paramètres élastiques sont des combinaisons de ceux des milieux constituants [17, 18]. Par conséquent, notre système devient tout simplement équivalent à une couche adsorbée sur un substrat. Nous avons largement détaillé ce problème dans le chapitre II, à la fois pour les ondes de Love et de Sezawa.

APPENDICE C

En suivant le même raisonnement que pour les super-réseaux semi-infinis, on trouve les éléments de la fonction réponse dans l'espace des interfaces du super-réseau fini déposé sur un substrat et recouvert avec une couche d'encapsulation à la surface.

Lorsque les couches du super-réseau en contact avec le substrat et la couche d'encapsulation sont de type 1, on obtient pour $n = n' = N$ et $i = c$ (Fig. IV-1)

$$d \left(N, c, -\frac{dc}{2}; N, c, -\frac{dc}{2} \right) = \frac{\left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) - t^{2N} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) Y_2^s}{\Delta^-}$$

$$d \left(N, c, -\frac{dc}{2}; N, c, +\frac{dc}{2} \right) = d \left(N, c, \frac{dc}{2}; N, c, -\frac{dc}{2} \right) =$$

$$\frac{\left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) - t^{2N} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) Y_2^s}{C_c \Delta^-}$$

$$d \left(N, c, +\frac{dc}{2}; N, c, +\frac{dc}{2} \right) = \left\{ \left[\frac{S_c}{F_c C_c} (C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t) + \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right] \times \right. \\ \left. \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) - t^{2N} \left[\frac{S_c}{F_c C_c} (C_1 t - C_2) + \frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right] Y_2^s \right\} \frac{1}{\Delta^-}$$

tandis que pour $0 \leq n, n' \leq N$ et $i \neq c$, on obtient :

$$d \left(n, 1, -\frac{d_1}{2}; n, 1, -\frac{d_1}{2} \right) = \frac{t}{t^2-1} \left\{ \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) t^{|n-n'|} - \frac{1}{\Delta} \left[\left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^c \right) Y_1^s t^{n+n'} - \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) Y_2^c Y_2^s t^{2N} (t^{n-n'} + t^{n'-n}) + \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \left. \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) \times Y_2^c t^{2N-n-n'} \right] \right\}$$

$$d(n, 1, -\frac{d_1}{2}, n', 1, \frac{d_1}{2}) = \frac{t}{t^2-1} \left\{ \frac{S_2}{F_2} t^{|n-n'|} + \frac{S_1}{F_1} t^{|n-n'-1|} - \frac{1}{\Delta} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) \left[\left(\frac{t^{2-1}}{t} + Y_1^C \right) Y_1^S \right. \right. \\ \left. \left. t^{n+n'} - t^{2N} \left(t^{n-n'} Y_1^C Y_1^S + t^{n'-n} Y_2^C Y_2^S \right) + \left(\frac{t^{2-1}}{t} + Y_1^S \right) Y_1^C t^{2N-n-n'} \right] \right\},$$

$$d(n, 1, +\frac{d_1}{2}, n', 1, -\frac{d_1}{2}) = d(n', 1, -\frac{d_1}{2}, n, 1, \frac{d_1}{2}),$$

$$d(n, 1, \frac{d_1}{2}, n', 1, \frac{d_1}{2}) = \frac{t}{t^2-1} \left\{ \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) t^{|n-n'|} - \frac{1}{\Delta} \left[\left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) \left(\frac{t^{2-1}}{t} + Y_1^C \right) Y_2^S \right. \right. \\ \left. \left. t^{n+n'} - \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) Y_2^S Y_2^C t^{2N} (t^{n-n'} + t^{n'-n}) + \left(\frac{S_2}{F_2} t + \frac{S_1}{F_1} \right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \left(\frac{t^{2-1}}{t} + Y_1^S \right) Y_2^C t^{2N-n-n'-1} \right] \right\},$$

où Δ , Y_1^S , Y_2^S , Y_1^C et Y_2^C sont obtenus à partir des équations (IV.4) - (IV.8).

En suivant le même raisonnement que dans l'appendice B, on peut obtenir l'expression complète de la fonction réponse (éqs. (B.31), (B.32)) et par suite l'expression des densités d'états totales (éqs. (IV.11) - (IV.14))

Lorsque la couche du super-réseau en contact avec le substrat est de type 1 et celle en contact avec la couche d'encapsulation est de type 2, un calcul similaire à celui présenté précédemment donne les expressions des densités d'états $n'_1(\omega^2)$ et $n'_2(\omega^2)$ des couches 1 et 2 du super-réseau, ainsi que les expressions des densités d'états de la couche d'encapsulation $n'_c(\omega^2)$ et du substrat $\Delta n_s(\omega^2)$:

$$n'_1(\omega^2) = -\frac{\rho^{(1)}}{\pi} \text{Im} \frac{t}{(t^2-1)\Delta_-} \left\{ Y' \left(\frac{1-t^{2(N+1)}}{(t^2-1)} \right) \left\{ \frac{S_1}{\alpha_1 F_1} \left[C_2 S_1 + \frac{1}{2} C_1 S_2 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{d_1 S_2}{2 F_2} \left(1 - \frac{F_2^2}{F_1^2} \right) \right\} \right. \\ \left. + (N+1) \Delta'_+ \left\{ \frac{d_1}{F_1} \left[C_2 S_1 + \frac{1}{2} C_1 S_2 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{S_1 S_2}{2 \alpha_1 F_2} \left(1 - \frac{F_2^2}{F_1^2} \right) \right\} \right\},$$

$$n'_2(\omega^2) = -\frac{\rho^{(2)}}{\pi} \operatorname{Im} \frac{t}{(t^2-1)\Delta'_-} \left\{ Y'' \left(\frac{1-t^{2(N+1)}}{(t^2-1)} \right) \left\{ \frac{S_1}{\alpha_1 F_1} \left[C_1 S_2 + \frac{1}{2} C_2 S_1 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{d_2 S_1}{2F_1} \left(1 - \frac{F_1^2}{F_2^2} \right) \right\} \right. \\ \left. + (N+1) \Delta'_+ \left\{ \frac{d_2}{F_2} \left[C_1 S_2 + \frac{1}{2} C_2 S_1 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) + \frac{S_1 S_2}{2\alpha_2 F_1} \left(1 - \frac{F_1^2}{F_2^2} \right) \right] \right\} \right\}$$

$$n'_c(\omega^2) = -\frac{\rho^{(c)}}{2\pi} \operatorname{Im} \left\{ \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) \left(\frac{S_c}{\alpha_c C_c} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) + d_c \left[(C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1} S_1 S_2 - t) \frac{S_c}{F_c C_c} + \frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right] \right) \right\} \\ - t^{2N+1} Y_2^s \left\{ \frac{S_c}{\alpha_c C_c} \left(\frac{S_2}{F_2} t + \frac{S_1}{F_1} \right) + d_c \left[\frac{S_2}{F_2} t + \frac{S_1}{F_1} + \frac{S_c}{F_c C_c} (C_2 t - C_1) \right] \right\}$$

$$\Delta'_{sn}(\omega^2) = -\frac{\rho^{(s)}}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{2\alpha_s} \left\{ \frac{1}{2F_s} + \frac{1}{\Delta'_-} \left[\left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^{c'} \right) - t^{2N+1} Y_2^{c'} \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} \right) \right] \right\}$$

où

$$Y' = \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^{c'} \right) Y_2^s + \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) t Y_2^{c'}$$

$$Y'' = \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^{c'} \right) Y_2^s + \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) \frac{Y_2^{c'}}{t}$$

$$\Delta'_{\pm} = \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^s \right) + \left(\frac{t^2-1}{t} + Y_1^{c'} \right) \pm t^{2N+1} Y_2^s Y_2^{c'}$$

Les éléments $Y_1^{c'}$ et $Y_2^{c'}$ sont obtenus respectivement à partir de Y_1^c et Y_2^c en invertissant les indices 1 et 2.

Bibliographie du chapitre IV

1. C. Colvard, T.A. Gant, M.V. Klein, R. Merlin, R. Fisher, H. Morko and A.C. Gossard, Phys. Rev. B 31, 2080 (1985).
2. S.M. Rytov, Akoust. Zh. 2, 71 (1956) [Sov. Phys. Acoust. 2, 68 (1956)]
3. D.J. Lockwood, M.W.C. Dharma-Wardana, G.C. Aers and J.M. Baribeau, Appl. Phys. Lett. 52, 2040 (1988).
4. P.X. Zhang, D.J. Lockwood, J.M. Baribeau, Can. J. Phys. 70, 843 (1992) ; Appl. Phys. Lett. 62, 267, (1993) ;
P.X. Zhang, D.J. Lockwood, H.J. Labbé and J.M. Baribeau, Phys. Rev. B 46, 9881 (1992) ; M.W.C. Dharma Wardana, P.X. Zhang, and D.J. Lockwood, Phys. Rev. B 48, (1993).
5. E.H. El Boudouti and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. B 49, 4586 (1994).
6. E.H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani, M. Khourdifi and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 48, 10987 (1993) ; B. Djafari-Rouhani, E.H. El Boudouti and E.M. Khourdifi, Vacuum, 45, 341 (1994)
7. S. Tamura, Phys. Rev. B 43, 12646 (1991).
8. J.A. Bell, R.J. Zanoni, C.T. Seaton, G.I. Stegeman, W.R. Bennett and C.M. Falco, Appl. Phys. Lett. 51, 652 (1987).
9. P. Baumgart, B. Hillebrands, R. Mock, G. Güntherodt, A. Boufelfel and C.M. Falco, Phys. Rev. B 34, 9004 (1986).
10. J.A. Bell, W.R. Bennett, R. Zanoni, G.I. Stegeman, C.M. Falco and F. Nizzoli, Phys. Rev. B. 35, 4127 (1986).
11. J.A. Bell, W.R. Bennett, R. Zanoni, G.I. Stegeman, C.M. Falco and C.T. Seaton, Solid State Communications 64, 1339 (1987).
12. P. Bisanti, M.B. Brodsky, G.P. Felsher, M. Grimsditch and L.R. Sill, Phys. Rev. B 35, 7813 (1987).
13. R. Danner, R.P. Huebener, C.S.L. Chun, M. Grimsditch and Ivan K. Schuller, Phys. Rev. B 33, 3696 (1985).
14. A. Kueny, M. Grimsditch, K. Miyano, I. Banerjee, Charles, M. Falco, and Ivan K. Schuller. Phys. Rev. Letters 48, 166 (1982)
15. Sudha Kumar, R. Bhadra, A. Fartash, M. Grimsditch, C. Kim, S.B. Qadri and A.S. Edelstein, Phys. Rev. B 44, 5905 (1991).

16. M. Grimsditch, R. Bhadra, Ivan K. Schuller, F. Chalmers and G. Devane, Phys. Rev. B 42, 2923 (1990).
17. B. Djafari-Rouhani, J. Sapriel, A. Nougouai, L. Dobrzynski, M. Proc. 2nd Int. Conf. on Phonon Physics, Budapest (World Scientific, Singapore) P. 555 (1985).
18. M. Grimsditch and F. Nizzoli, Phys. Rev. B 33, 5891 (1986) ;
M. Grimsditch, Phys. Rev. B 31, 6818 (1985).

Chapitre V

CHAPITRE V

ETATS ELECTRONIQUES DE SURFACE DANS LES SUPER-RESEAUX SEMICONDUCTEURS

V-1 INTRODUCTION

Dans la structure électronique d'un super-réseau, les premières bandes d'énergie résultent de l'interaction entre les états des puits quantiques constituants. La structure électronique de ces matériaux a été étudiée en utilisant l'approche de la fonction-enveloppe [1], les méthodes de pseudo-potentiels et l'approximation des liaisons fortes [2]. Dans une série d'articles [3-5], il a été montré que le modèle classique de Kronig-Penney peut être considéré comme une approche raisonnable pour traiter les propriétés électroniques des hétérostructures semiconductrices, au point Γ de la bande de conduction.

Cependant, un super-réseau se termine toujours par une surface, d'où l'importance de tenir compte aussi bien théoriquement qu'expérimentalement de l'effet de la création de la surface libre du super-réseau ou de son interface avec un substrat.

Ainsi, récemment, Ohno et al [6, 7] ont réussi à observer pour la première fois, à travers des expériences de mesures optiques (spectres de photoluminescence, spectres de photocourant sous un champ électrique), des états localisés du genre Tamm [8] associés à la surface interne du super-réseau (c'est-à-dire, l'interface super-réseau-substrat) et situés à l'intérieur des minigaps du super-réseau. Leurs résultats expérimentaux ont été interprétés à l'aide de l'approximation de la fonction-enveloppe. Par ailleurs le comportement de ces états a été examiné [2, 9-15], ainsi que leur interaction avec les états propagatifs du super-réseau [9, 14, 15]. Ces études présentent au-delà d'un intérêt fondamental, un moyen de caractérisation de la qualité des surfaces et interfaces de ces matériaux.

Dans ce travail, nous apportons une nouvelle contribution à ces travaux en examinant en détail les propriétés électroniques des super-réseaux semi-

infinis, par le moyen du calcul des densités d'états. Celles-ci sont obtenues par une simple transposition des expressions données dans le chapitre III, pour les modes acoustiques transverses, au cas des propriétés électroniques.

La même étude a été abordée en parallèle par M. Steslicka et R. Kucharczyk de l'Université de Wrocław, en utilisant la méthode directe d'adaptation des fonctions d'ondes aux interfaces du super-réseau [11] (direct matching procedure). Ainsi, dans le cadre d'une collaboration avec cette équipe, nous avons examiné les états localisés et résonnants induits par l'interface entre des super-réseaux du type GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs et des substrats Ga_{1-y}Al_yAs.

Notons néanmoins, que les expressions analytiques compactes des densités d'états et des relations de dispersion nous permettent d'obtenir les résultats numériques avec un temps de calcul très réduit en comparaison avec la méthode classique d'adaptation des fonctions d'ondes. De plus, on a pu déceler et éviter [16] de faux états de surface obtenus par cette dernière méthode [11], ainsi que par la méthode de la matrice de transfert [17]. Il s'agit d'énergies pour lesquelles le numérateur et le dénominateur de la fonction de Green s'annulent simultanément et ne sont donc pas de vrais pôles de cette fonction de Green.

Ce chapitre est structuré de la façon suivante. Dans le paragraphe V-2, nous décrivons le modèle de Kronig-Penney utilisé dans ce travail, et montrons la transposition des résultats obtenus dans le chapitre III, pour les phonons acoustiques transverses, au cas des propriétés électroniques. Dans le paragraphe V-3 nous examinons le comportement des états localisés et résonnants associés à l'interface entre des super-réseaux semiconducteurs GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs et des substrats de type Ga_{1-y}Al_yAs, suivant les paramètres relatifs du super-réseau et du substrat, ainsi que la nature et l'épaisseur de la couche du super-réseau en contact avec le substrat.

V - 2. MODELE DE KRONIG-PENNEY APPLIQUE A DES SUPER-RESEAUX SEMICONDUCTEURS

Le modèle de Kronig-Penney utilisé récemment par Steslicka et al [11], s'avère approprié pour l'étude des super-réseaux semi-infinis, traités dans l'approximation de modulation de la masse et du potentiel de leurs couches constituantes. Dans ce modèle (fig. V-1), chaque matériau est caractérisé par une masse effective et par la valeur du potentiel au bas de la bande de conduction. Nous nous intéressons plus particulièrement aux super-réseaux GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs en contact avec un substrat du type Ga_{1-y}Al_yAs. Dans ce cas nous désignerons les masses effectives par m_1 , $m_2(x)$, $m_s(y)$ et les potentiels par E_1 , $E_2(x)$, $E_s(y)$. Dans la suite, nous prenons l'origine des énergies en E_1 ($E_1 = 0$) de sorte que E_2 et E_s représentent les discontinuités des bandes de conduction entre les matériaux considérés.

En se basant sur les paramètres utilisés dans le travail expérimental d'Ohno et al [6, 7], nous obtenons les valeurs suivantes des potentiels $E_2(x)$ dans le super-réseau (resp. $E_s(y)$ dans le substrat):

$$E_2(x) = 944 x \text{ meV} \quad (\text{resp. } E_s(y) = 944 y \text{ meV}). \quad (\text{V.1})$$

La masse effective m_1 de l'électron dans les puits GaAs est égale à 0.067 (en unité de masse de l'électron), tandis que la masse effective pour les barrières Ga_{1-x}Al_xAs (resp. dans le substrat Ga_{1-y}Al_yAs) prend la forme [3, 5]

$$m_2(x) = m_1 + 0.083 x \quad (\text{resp. } m_s(y) = m_1 + 0.083 y). \quad (\text{V.2})$$

Tous les calculs et résultats que nous avons obtenus dans le chapitre III, pour les modes acoustiques de polarisation transverse [18], peuvent être transposés directement à l'étude de la structure électronique des super-réseaux semi-infinis dans le modèle de Kronig-Penney [19]. En effet, soit H_i l'hamiltonien d'un électron dans un milieu i . Dans l'approximation des électrons libres

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{d^2}{dx^2} + E_i \quad (\text{V.3})$$

où m_i est la masse effective de l'électron dans le milieu i , E_i le potentiel de base et h la constante de Planck.

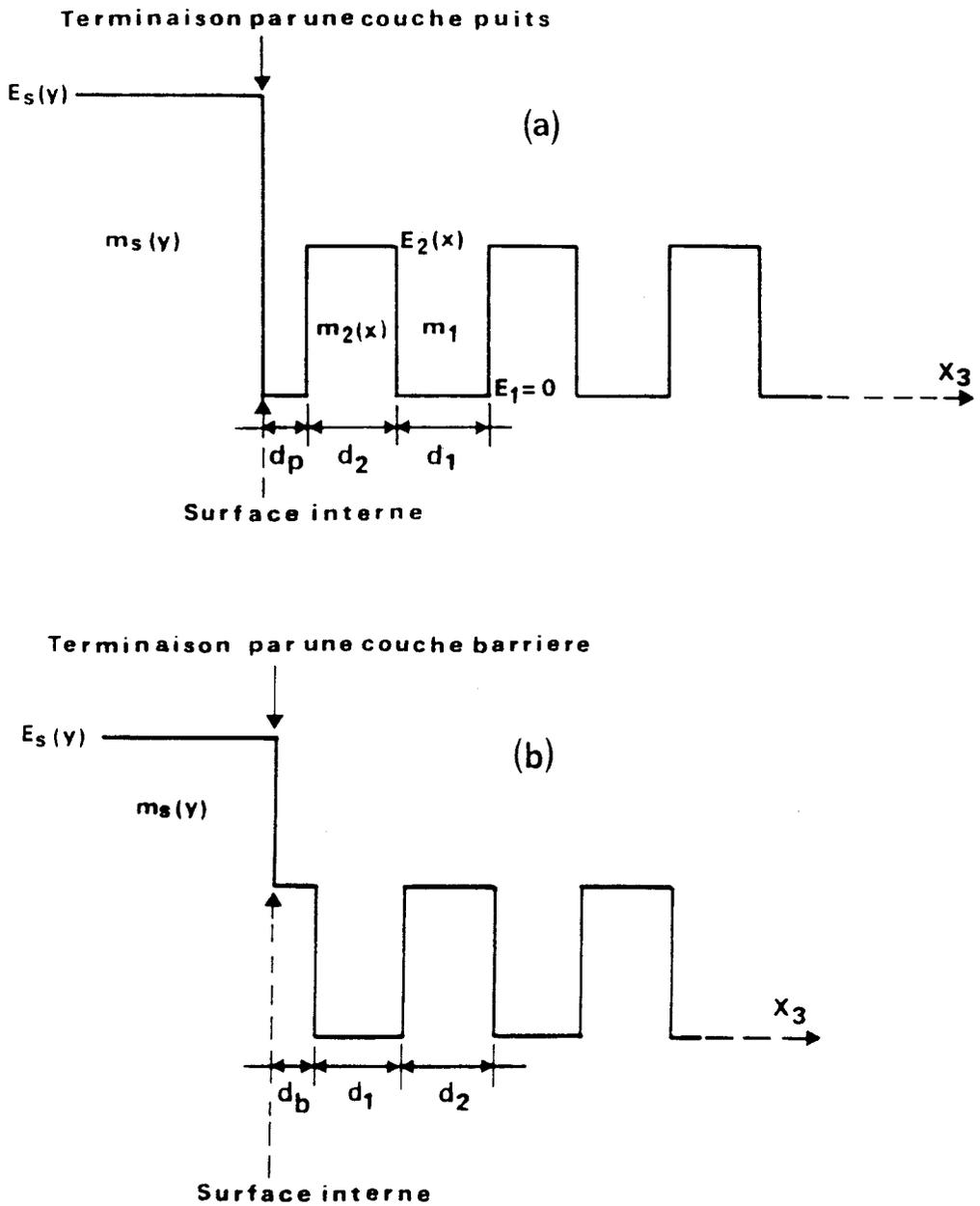


Figure V-1 Représentation schématique du profil du potentiel d'un super-réseau semi-infini GaAs- Ga_{1-x}Al_xAs en contact avec un substrat Ga_{1-y}AlyAs. Les électrons à l'intérieur de la couche du super-réseau d'épaisseur d_i sont caractérisés par leur masse effective m_i et leur énergie fondamentale E_i ($i = 1,2$). Cette dernière est prise égale à zéro à l'intérieur des couches puits GaAs ($E_1 = 0$). La dernière couche du super-réseau en contact avec le substrat peut être de type barrière (Fig. V-1b) ou de type puits (Fig. V-1a); son épaisseur (d_b ou d_p) pouvant être différente de celles des couches en volume.

La fonction de Green correspondante (éq. (I.1)) s'écrit

$$G_i(E; x_3, x'_3) = - \frac{e^{-\alpha_i |x_3 - x'_3|}}{2 F_i} \quad (V.4)$$

$$\text{où } F_i = \frac{\hbar^2}{m_i} \alpha_i \quad (V.5)$$

$$\text{et } \alpha_i^2 = - \frac{2m_i}{\hbar^2} (E - E_i) . \quad (V.6)$$

On retrouve ainsi l'analogie avec les expressions correspondant aux phonons acoustiques transverses [18] lorsque $k_{//} = 0$ (voir les éqs. (III.3) et (III.4)). De même les conditions aux limites aux interfaces sont données formellement par les mêmes équations mathématiques [20]. En particulier, la structure de bande de volume du super-réseau est obtenue à partir de la relation de dispersion de Kronig-Penney (éq. (III.9), que nous rappelons ici

$$-\cos(k_3 D) = C_1 C_2 + \frac{1}{2} \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) S_1 S_2 \quad (V.7)$$

$$\text{où } C_i = \text{ch}(\alpha_i d_i) \quad (V.8)$$

$$\text{et } S_i = \text{sh}(\alpha_i d_i) \quad (V.9)$$

d_i ($i = 1, 2$) représente l'épaisseur des couches i du super-réseau et $D = d_1 + d_2$ est la période. k_3 est la composante du vecteur d'onde perpendiculaire aux couches.

Les états localisés et résonnants induits par la surface interne du super-réseau (i.e. l'interface super-réseau-substrat) dépendent des paramètres relatifs du super-réseau et du substrat, ainsi que de la nature et de l'épaisseur de la couche du super-réseau en contact avec le substrat. Les expressions respectives de la relation de dispersion et des densités d'états sont similaires à celles données dans le chapitre III pour un super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulation à la surface [18], à condition de tenir compte dans ces expressions de la présence du substrat [21] (fig. V-1).

Afin d'étudier la localisation des états de surface, nous introduisons pour la suite un facteur $R = |t|^2$ (où $t = \exp(i k_3 D)$), décrivant la décroissance de la

fonction d'onde d'un mode localisé au bout d'une période du super-réseau à partir de la surface.

V - 3 QUELQUES APPLICATIONS ET DISCUSSIONS DES RESULTATS

Nous discutons dans une première partie, l'existence des états localisés et résonnants de surface en fonction des paramètres des matériaux qui constituent le super-réseau et le substrat, c'est-à-dire leurs concentrations x et y en aluminium respectivement. Dans une seconde partie, nous examinons l'influence de l'épaisseur de la couche du super-réseau en contact avec le substrat sur les états de surface.

V.3.1. Effets des paramètres de composition du super-réseau et du substrat sur les états électroniques de surface

a) Nous étudions d'abord l'évolution des états de surface avec la composition x de l'alliage $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ dans les barrières du super-réseau, la composition y de l'alliage $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ constituant le substrat étant fixé [22]. Remarquons que la variation de x entraîne simultanément celle de la masse effective $m_2(x)$ et du potentiel $E_2(x)$.

Une telle approche nous permet de passer de la situation où les puits sont fortement couplés (du genre électron presque libre) pour $x \ll 1$ à celle où les puits sont presque indépendants (du genre liaison forte) pour $x \approx 1$.

Dans notre exemple, nous choisissons $y = 0.6$ d'où $m_s(y) = m_s = 0.1168$ (éq. (V.2)) et $E_s(y) = E_s = 566.4$ meV (éq. (V.1)), tandis que les paramètres du super-réseau sont donnés respectivement par les équations (V.1) et (V.2). Nous avons choisi d'autre part, des épaisseurs des couches du super-réseau telles que $d_1 = d_2 = 40 \text{ \AA}$ (ces paramètres sont identiques à ceux utilisés dans le travail expérimental d'Ohno et al [6, 7])

La figure V-2 montre les bandes de volume (zone hachurée) et les états de surface, lorsque la couche du super-réseau en contact avec le substrat est de type puits (GaAs) ou de type barrière ($\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$). Ainsi, on peut remarquer que les

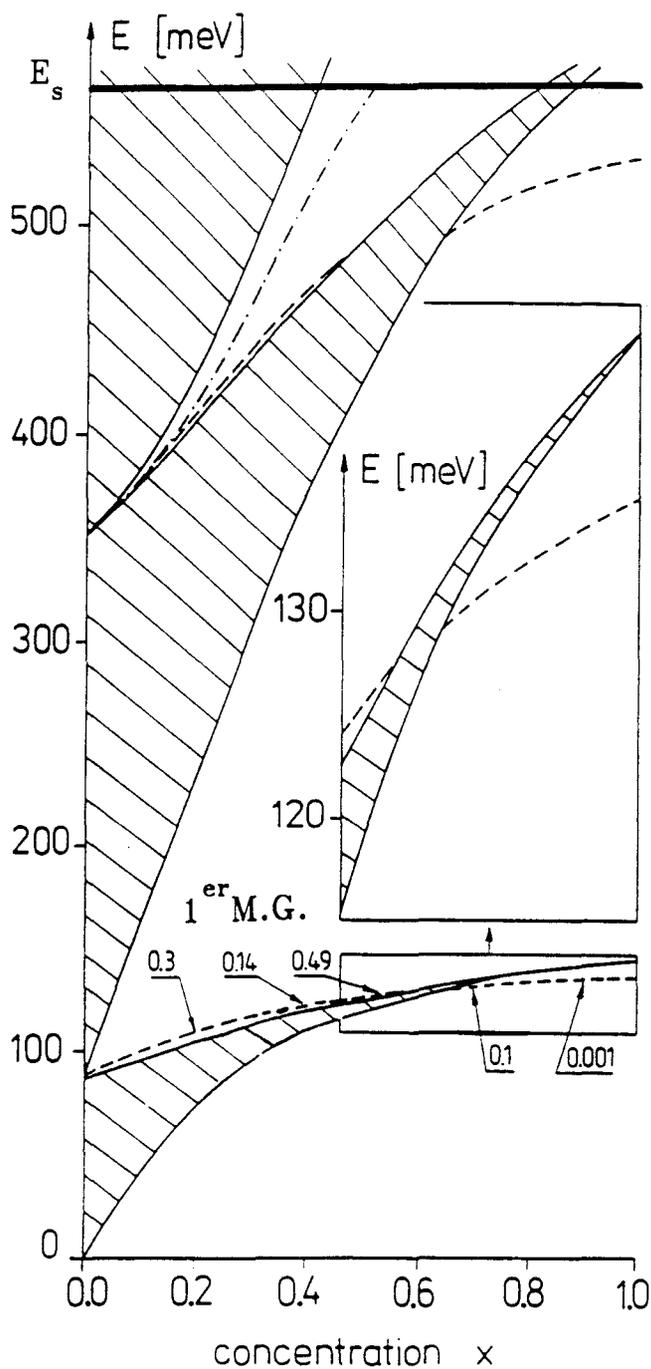


Figure V-2

Structure électronique du super-réseau GaAs- Ga_{1-x}Al_xAs en contact avec un substrat Ga_{0,4}Al_{0,6}As, en fonction de la concentration x d'Al dans les couches barrières du super-réseau. Les zones hachurées correspondent aux minibandes (MBs). Les courbes en traits discontinus (resp. en traits discontinus avec des points) décrivent les états de surface à l'intérieur des minigaps (MGs), lorsque le super-réseau se termine par un puits (resp. par une barrière). Les chiffres soulignés indiquent les valeurs du facteur de localisation R . La droite épaisse représente la limite de la bande du substrat.



états de surface dépendent fortement de la nature de la couche du super-réseau en contact avec le substrat.

Lorsque le super-réseau se termine par un puits GaAs, deux branches d'états localisés de surface apparaissent pour $x \lesssim 0.5$ (et donc $E_2(x) < E_s$) dans le premier et le deuxième minigaps du super-réseau. Pour les valeurs de x autour de $x \approx y = 0.6$ (la concentration d'Al dans le substrat), les deux branches croisent les minibandes correspondantes, donnant lieu à une absence d'états localisés. Lorsqu'on continue à augmenter x ($x \gtrsim 0.65$ et donc $E_2(x) > E_s$) les états de surface apparaissent encore, mais au-dessous de ces bandes de volume.

Concernant les propriétés de localisation de ces états de surface, il existe deux paramètres principaux déterminant le facteur d'atténuation R . Le premier est lié à la hauteur de la barrière de potentiel $E_2(x)$, et par conséquent au rapport entre les largeurs des minigaps et des minibandes (pour un minigap large et une minibande étroite, R est petite). Le deuxième est lié à la différence entre l'énergie de l'état de surface et la limite de la minibande (c'est-à-dire à la quantité $|E_s - E_2(x)|$). Comme pour $x \leq 0.5$ ces deux facteurs entre en compétition, R change de façon non monotone sur cet intervalle de x (voir fig. V-2). Par contre, pour $x \geq 0.65$ ces deux facteurs engendrent une décroissance rapide de R ; ainsi pour $x = 0.9$ il atteint une valeur aussi faible que 10^{-3} (voir fig. V-2). Dans ce cas l'état de surface est complètement localisé dans la première période du super-réseau en contact avec le substrat.

Lorsque le super-réseau se termine par une couche barrière $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, une seule branche d'états de surface apparaît dans le deuxième minigap (voir fig. V-2).

Notons que pour l'instant, on s'est intéressé uniquement aux états localisés et résonnants situés au-dessous de la bande de volume du substrat, c'est-à-dire les états non propagatifs dans ce dernier. Nous reviendrons sur la discussion des états propagatifs dans le substrat dans le sous-paragraphe V-3-2.

Afin de suivre le comportement des états de surface de la fig. V-2 lorsqu'ils croisent les minibandes, nous avons présenté (fig. V-3) la variation de la densité d'états totale (définie de la même façon que dans le chapitre III) pour des énergies correspondant à la première minibande et pour quelques valeurs de x autour de

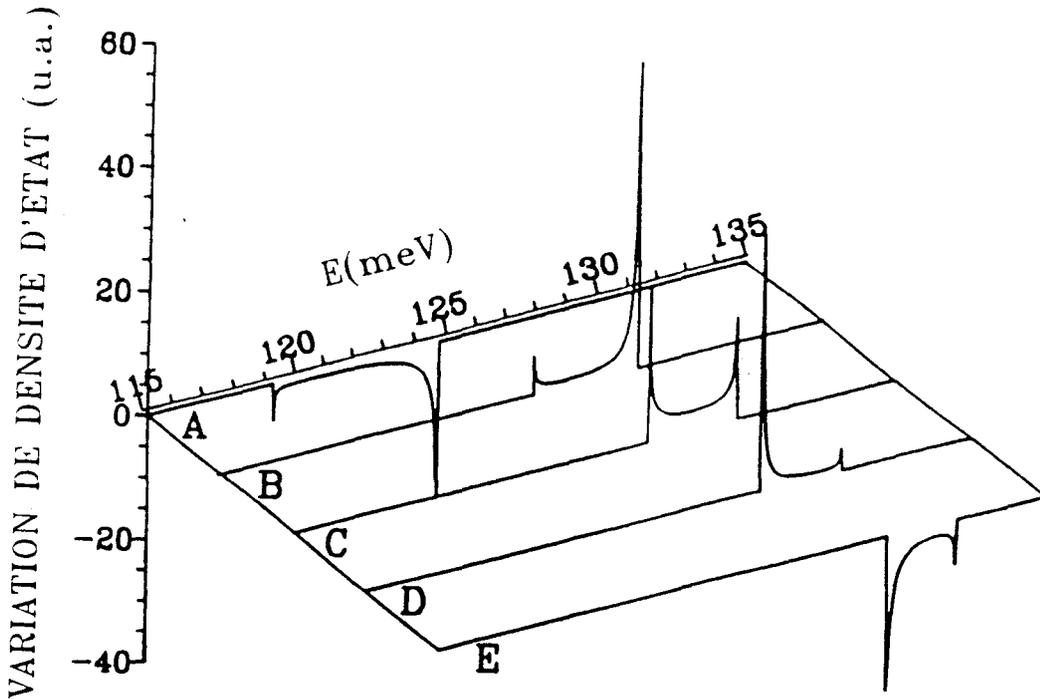


Figure V-3 Variation de la densité d'états totale (comme définie dans le chapitre III) pour des énergies relatives à la première minibande de la figure V-2, et pour différentes valeurs de x correspondant au croisement de l'état de surface avec cette minibande (voir la partie agrandie de la figure V-2) : A : $x = 0.5$, B : $x = 0.58$, C : $x = 0.6$, D : $x = 0.62$ et E : $x = 0.65$.



$x = 0.6$. Pour $x = 0.5$, lorsque l'état localisé est encore au-dessus de la minibande, la courbe de variation de densité d'états montre un comportement divergent du genre $(\Delta E)^{-1/2}$ aux limites des minibandes (comme dans tout système à une dimension) avec des valeurs négatives (voir courbe A). (Notons que dans cette représentation, nous n'avons pas ajouté de partie imaginaire à l'énergie E , c'est pourquoi on ne voit pas les pics δ de poids $-\frac{1}{4}$ aux limites des minibandes, ainsi que les pics deltas correspondant aux états localisés de surface). Pour $x = 0.58$, l'état de surface commence à pénétrer dans la minibande et change totalement le signe de la variation de densité d'états, qui devient positive et très prononcée vers le haut de la minibande (voir courbe B). Lorsqu'on continue à augmenter x , on observe un déplacement de la variation de densité d'états vers le bas de la minibande (voir les courbes C et D pour $x = 0.6$ et $x = 0.62$, respectivement) ; pour $x = 0.65$, l'état de surface émerge à partir de la minibande et la variation de densité d'états devient à nouveau négative (voir la courbe E), comme pour le cas $x = 0.5$ (courbe A). Cependant, maintenant elle atteint de larges valeurs plutôt vers le bas que vers le haut de la minibande, puisque l'état localisé apparaît au-dessous de celle-ci.

Notons que l'aire sous les courbes B, C, D garde à peu près la même valeur. La différence entre celle-ci et l'aire sous les courbes A ou E est de l'ordre d'un état, ce qui représente l'état de surface qui s'est détaché de la minibande.

b) Nous considérons maintenant le cas où les paramètres du super-réseau sont fixés, tandis que la composition y du substrat varie. Nous illustrons ce cas en choisissant un super-réseau $\text{GaAs-Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$, ($x = 0.2$) en contact avec le substrat $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$, ($0 \leq y \leq 1$). Dans ce cas les paramètres du super-réseau deviennent : $m_1 = 0.067$, $m_2(x) = m_2 = 0.0836$ et $E_2(x) = E_2 = 188.8$ meV. Les épaisseurs des couches du super-réseau sont telles que $d_1 = d_2 = 50 \text{ \AA}$. Du côté du substrat les paramètres sont donnés par les équations (V.2) et (V.1). (Rappelons que ces paramètres correspondent à ceux utilisés dans le travail expérimental d'Ohno et al [6, 7]).

La structure de bande et les niveaux localisés sont illustrés sur la fig. V-4 en fonction de y , à la fois lorsque le super-réseau se termine par une couche puits GaAs ou une couche barrière $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$. On retrouve sur cette figure les mêmes aspects que ceux discutés précédemment. Cependant, lorsque le super-réseau se termine par une couche GaAs, le croisement des états de surface à

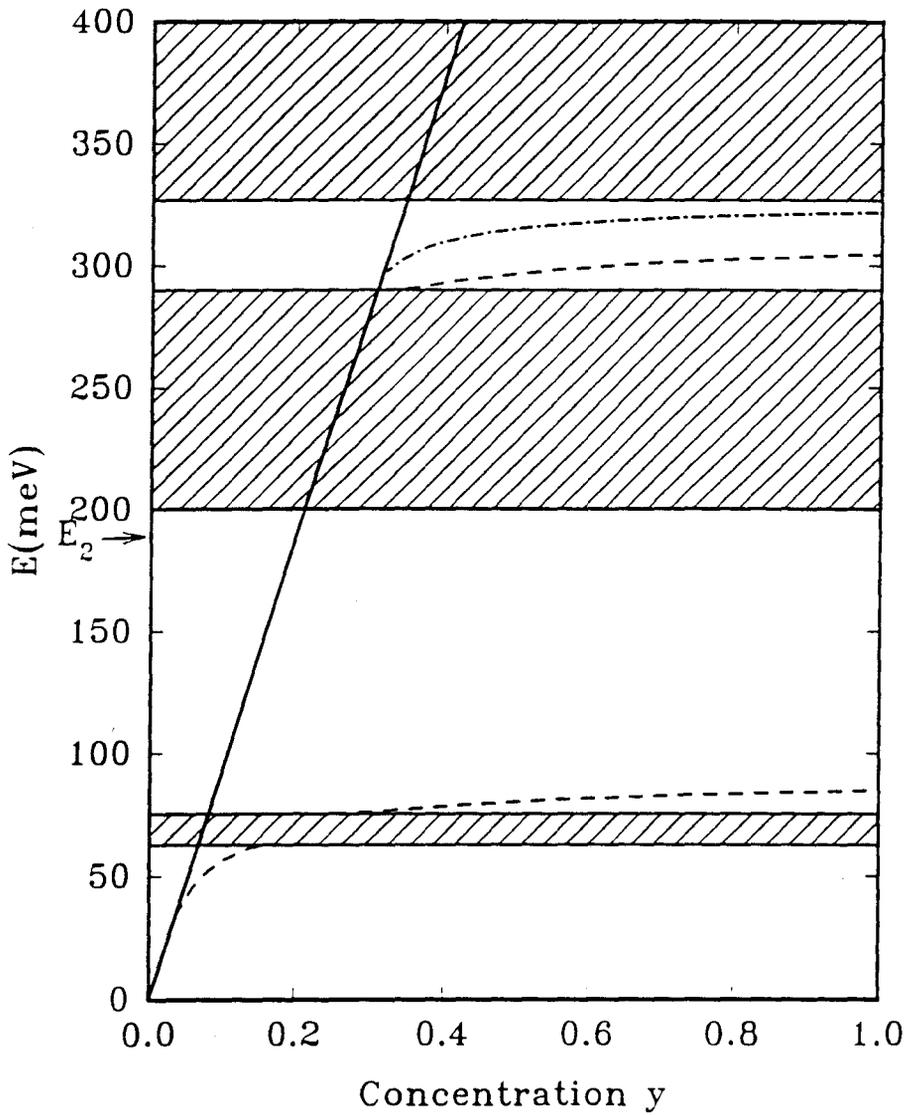


Figure V-4 Structure des niveaux électroniques d'un super-réseau GaAs- Ga_{0.8} Al_{0.2} As en contact avec un substrat Ga_{1-y} Aly As, en fonction de la concentration y d'Al dans le substrat. Toutes les courbes ont la même signification que dans la figure V-2. La flèche indique le niveau de la barrière de potentiel à l'intérieur du super-réseau.

travers les minibandes a lieu seulement au niveau de la première minibande autour de $y \approx x = 0.2$ (la concentration d'Al dans le super-réseau). La deuxième branche située dans le deuxième minigap devient un état résonnant à $x = y = 0.2$ en pénétrant dans la bande du super-réseau (voir fig. V-4). Les densités d'états et le facteur de localisation R présentent, dans ce cas aussi, les mêmes caractéristiques que celles données précédemment.

V-3 -2 Effets d'une couche à l'interface super-réseau-substrat sur les états électroniques de surface

Considérons maintenant un super-réseau GaAs - $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ terminé par une couche d'épaisseur variable en contact avec un substrat $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$. Lorsque celle-ci est de type barrière (fig. V-1a) nous appelons son épaisseur d_b ($0 \leq d_b \leq 50 \text{ \AA}$), tandis que lorsqu'elle est de type puits (fig. V-1b) nous l'appellerons d_p ($0 \leq d_p \leq 50 \text{ \AA}$). Nous avons examiné l'influence de l'épaisseur des couches (d_p et d_b) sur les états localisés et résonnants de surface, pour trois valeurs typiques de la barrière de potentiel du substrat $E_s(y)$ [23] :

- (i) $E_s(y) > E_2(x)$
- (ii) $E_s(y) = E_2(x)$
- (iii) $E_s(y) < E_2(x)$

(i) Dans le premier cas, nous avons choisi un super-réseau GaAs - $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ ($x = 0.2$) en contact avec un substrat $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ ($y = 0.7 > x$). Par conséquent, les paramètres du super-réseau deviennent : $m_1 = 0.067$, $m_2(x) = m_2 = 0.0836$ et $E_2(x) = E_2 = 188.8 \text{ meV}$, tandis que ceux du substrat s'écrivent : $m_s(y) = m_s = 0.1251$ et $E_s(y) = E_s = 660.8 \text{ meV}$. Les épaisseurs des couches du super-réseau sont $d_1 = d_2 = 50 \text{ \AA}$.

La figure V-5 présente la variation de l'énergie des états localisés en fonction des épaisseurs d_b et d_p correspondant respectivement à une couche barrière $\text{Ga}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{As}$ (côté gauche de la fig. V-5) et à un puits GaAs (côté droit de la fig. V-5) à l'interface entre le super-réseau et le substrat. Les zones hachurées correspondent aux quatre premières bandes de volume du super-réseau. On peut noter que pour une valeur donnée de l'énergie, les branches correspondant aux états de surface se reproduisent de façon périodique en fonction de d_b et d_p , un

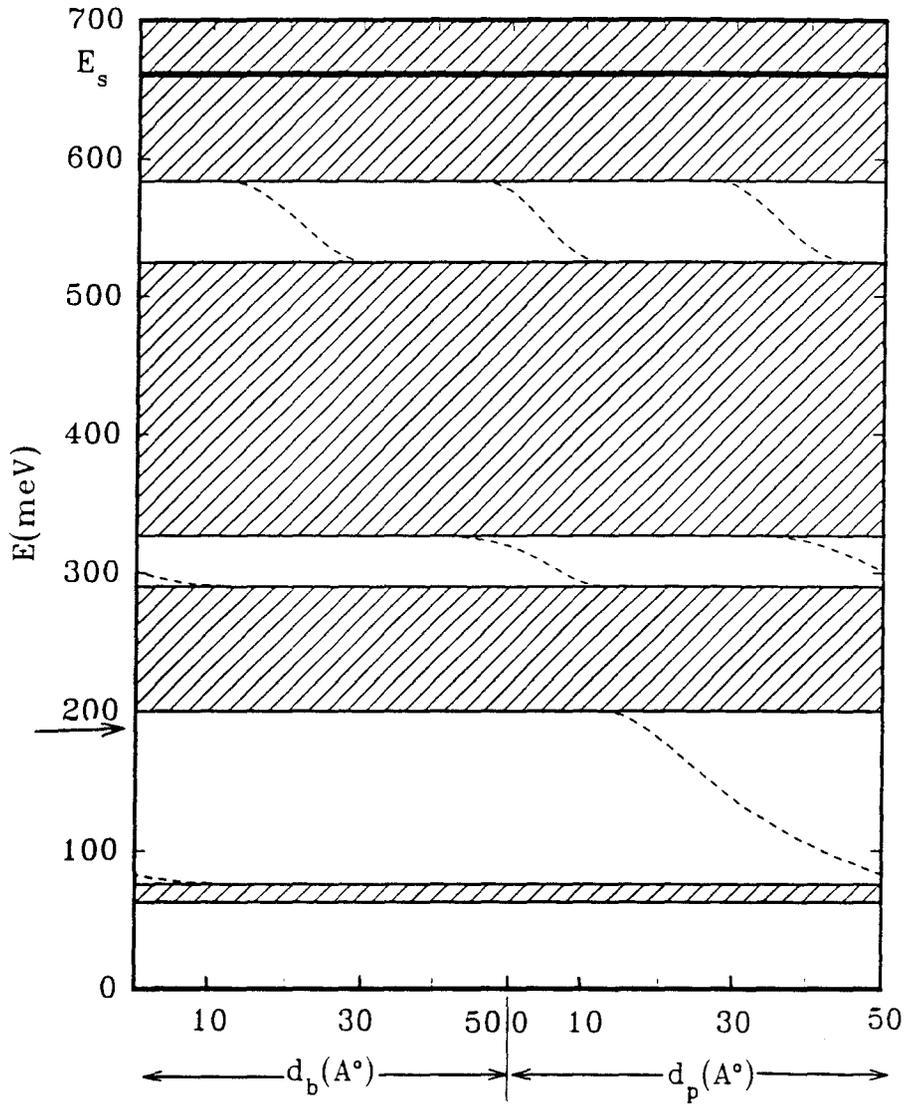


Figure V-5

Variation des énergies des états de surface (courbes en traits discontinus) en fonction des épaisseurs d_b et d_p de la dernière couche du super-réseau en contact avec le substrat. Cette couche est du type barrière sur la partie gauche de la figure et du type puits sur la partie droite [0Å°, 50Å°]. Les zones hachurées représentent les quatre premières minibandes du super-réseau, tandis que la droite épaisse indique la limite de la bande du substrat. La flèche indique le niveau de la barrière de potentiel à l'intérieur du super-réseau.



phénomène que nous avons rencontré aussi dans le cas des modes acoustiques transverses [18] (chapitre III).

D'autre part, lorsque d_b et d_p augmentent ces branches décroissent jusqu'aux bandes de volume et deviennent des résonances, en même temps d'autres branches nouvelles sont extraites des bandes de volume. On peut observer particulièrement qu'à l'intérieur du $i^{\text{ème}}$ minigap, i branches sont extraites de la $(i + 1)^{\text{ème}}$ minibande. En effet, prenons l'exemple de la deuxième minibande : d'une part, lorsqu'on augmente d_b et d_p une branche se détache de celle-ci ; d'autre part, en ajoutant une période au super-réseau, il devrait y avoir un état supplémentaire dans cette minibande. Pour compenser les deux états manquants, deux branches doivent se détacher de la troisième minibande, et ainsi de suite pour les minibandes supérieures.

A l'aide de la variation de la densité d'états totale, nous avons suivi le prolongement de ces branches à l'intérieur des minibandes du super-réseau sous forme de résonances. Celles-ci se sont trouvées bien définies uniquement au voisinage des limites des bandes de volume du super-réseau, et s'évanouissent ensuite très rapidement à l'intérieur de ces dernières lorsque d_b et d_p augmentent.

(ii) Dans le second cas où la barrière de potentiel du substrat est la même que celle des couches barrières dans le super-réseau ($E_s(y) = E_2(x)$), nous avons choisi pour illustration le même super-réseau que précédemment, c'est-à-dire $x = y = 0.2$. Par conséquent, lorsque le super-réseau se termine par une couche barrière ($0 \leq d_b \leq 50 \text{ \AA}$), aucun état de surface n'apparaît dans les minigaps (fig. V.6) puisque la géométrie du système n'est pas perturbée. Par contre lorsque le super-réseau se termine par une couche puits ($0 \text{ \AA} \leq d_p \leq 50 \text{ \AA}$), un état de surface apparaît au-dessous de la bande de volume du substrat (courbe en traits discontinus sur la fig. V-6).

Concernant les résonances qui apparaissent à l'intérieur de la bande du substrat, nous les discuterons (comme dans le paragraphe III-2-3 C du chapitre III) pour deux super-réseaux semi-infinis complémentaires, obtenus par clivage d'un super-réseau infini à l'intérieur de la couche puits GaAs. Les deux super-réseaux sont en contact avec deux substrats identiques. Rappelons d'abord (voir appendice B) que la variation de la densité d'états totale de ces deux super-réseaux

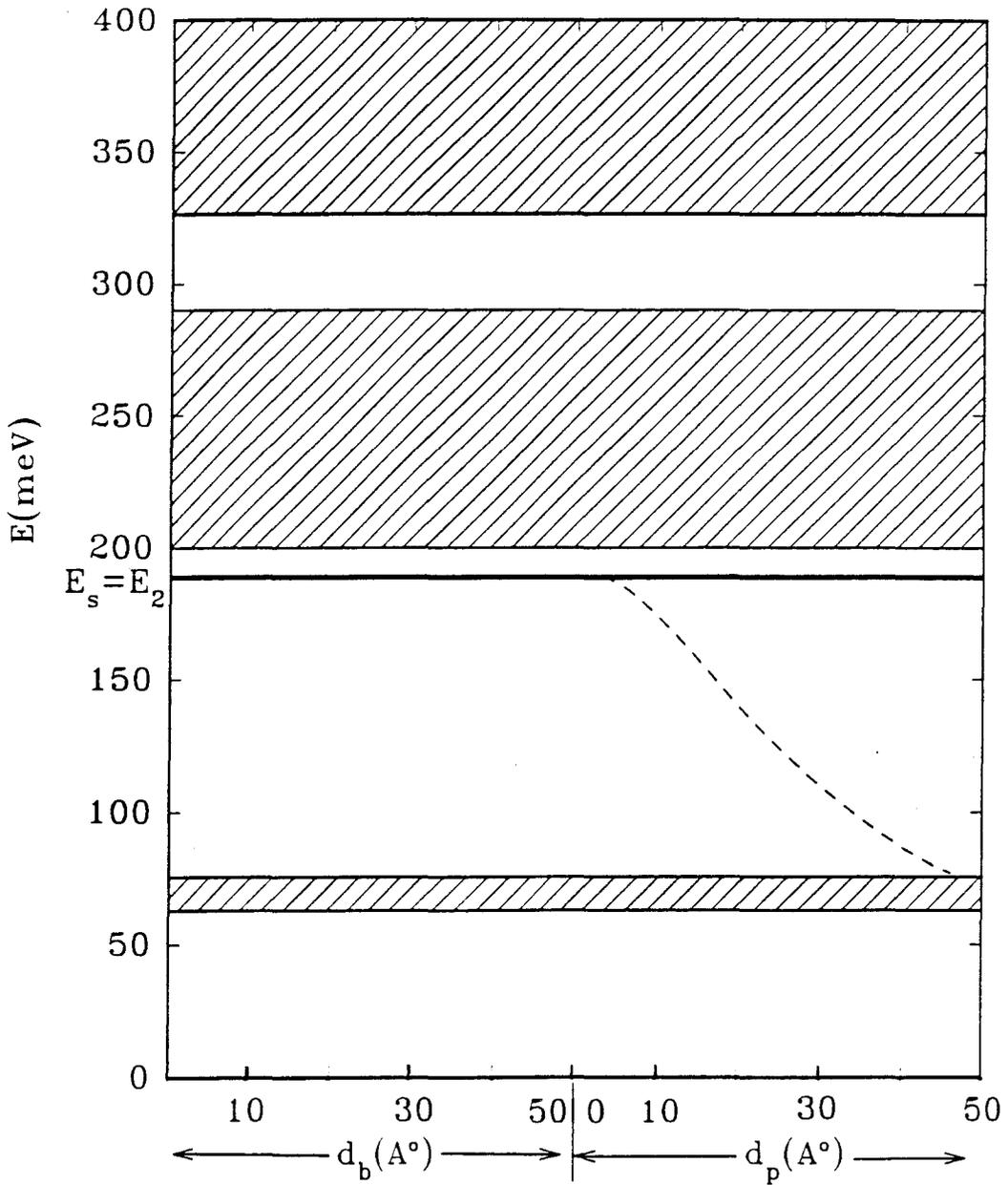


Figure V-6 Môme chose que la figureV-5, pour un super-réseau GaAs - Ga_{0.8} Al_{0.2} As en contact avec un substrat Ga_{0.8} Al_{0.2} As de même nature que les couches barrières du super-réseau ($x = y = 0.2$)

(103)

complémentaires est égale à zéro pour des énergies E appartenant simultanément aux bandes de volume du super-réseau et du substrat. De plus à cause de la perte d'un demi-état ($-\frac{1}{2}$) à chaque limite d'une minibande et de la nécessaire conservation du nombre d'états, on devrait s'attendre à des résonances qui tombent à l'intérieur des gaps du super-réseau tout en étant à l'intérieur de la bande du substrat.

Pour illustrer le comportement de ces résonances sur chacun des deux super-réseaux complémentaires, nous avons représenté la variation de densité d'état totale pour trois valeurs de l'épaisseur d_p de la couche puits GaAs (figs. V-7 et V-8). Dans le cas particulier où $d_p = 25 \text{ \AA}$ (c'est-à-dire $d_p = \frac{d_2}{2}$), on obtient deux super-réseaux identiques. Par conséquent, la résonance R_1 (fig. V-7) induite par le substrat dans le deuxième minigap de chacun des deux super-réseaux est la même. Lorsque les couches de surface des deux super-réseaux semi-infinis complémentaires ont des épaisseurs différentes, les résonances se répartissent différemment sur chacun de ces super-réseaux. Ainsi, on peut observer facilement sur les figures V-8a et V-8b que l'aire au-dessous de la résonance R_2 , qui apparaît dans le deuxième minigap du super-réseau terminé par une couche GaAs d'épaisseur $d_p = 10 \text{ \AA}$ (fig. V-8a), est moins importante que l'aire au-dessous de la résonance R_3 , qui apparaît sur le super-réseau complémentaire terminé par la couche GaAs d'épaisseur $d_p = 40 \text{ \AA}$ (fig. V-8b). Les autres notations (B_i, T_i, B_s) correspondent respectivement aux fonctions δ de poids $-\frac{1}{4}$ qui apparaissent en bas et en haut des bandes de volume du super-réseau et en bas de la bande du substrat, tandis que le pic L correspond à l'état localisé de surface sur l'un des deux super-réseaux.

(iii) Dans le troisième cas où la barrière de potentiel du substrat est inférieure à celle de la couche barrière du super-réseau, nous avons choisi un super-réseau $\text{GaAs-Ga}_{0.4}\text{Al}_{0.6}\text{As}$ ($x = 0.6$) en contact avec un substrat $\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ ($y = 0.4 < x$). Dans ce cas les paramètres du super-réseau sont donnés par $m_1 = 0.067$, $m_2(x) = m_2 = 0.1168$ et $E_2(x) = E_2 = 566.4 \text{ meV}$, tandis que ceux du substrat s'écrivent $m_s(y) = m_s = 0.1002$ et $E_s(y) = E_s = 377.6 \text{ meV}$.

La figure V-9 représente à nouveau la variation des fréquences des états de surface en fonction des épaisseurs d_b et d_p répétées deux fois. On peut observer que des branches localisées présentent des minima dans le premier minigap ou

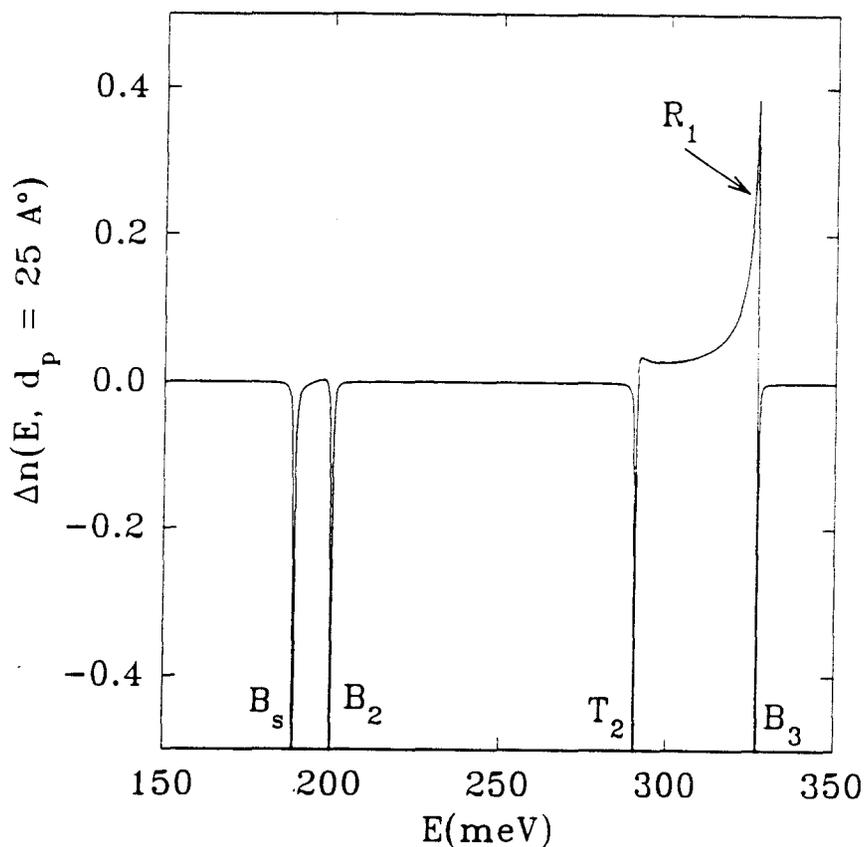


Figure V-7

Variation de la densité d'état totale pour des énergies relatives au deuxième minigap de la figure V-6, et pour une épaisseur d_p située au milieu de la couche puits GaAs: $d_p = 25 \text{ \AA}$ ($d_p = \frac{d_1}{2}$). R_1 représente la résonance induite par le substrat dans le deuxième minigap. B_i et T_i correspondent respectivement aux pics δ de poids $-\frac{1}{4}$ qui apparaissent en bas et en haut des minibandes, tandis que B_s représente le pic delta de poids $-\frac{1}{4}$ qui apparaît au bas de la bande du substrat.



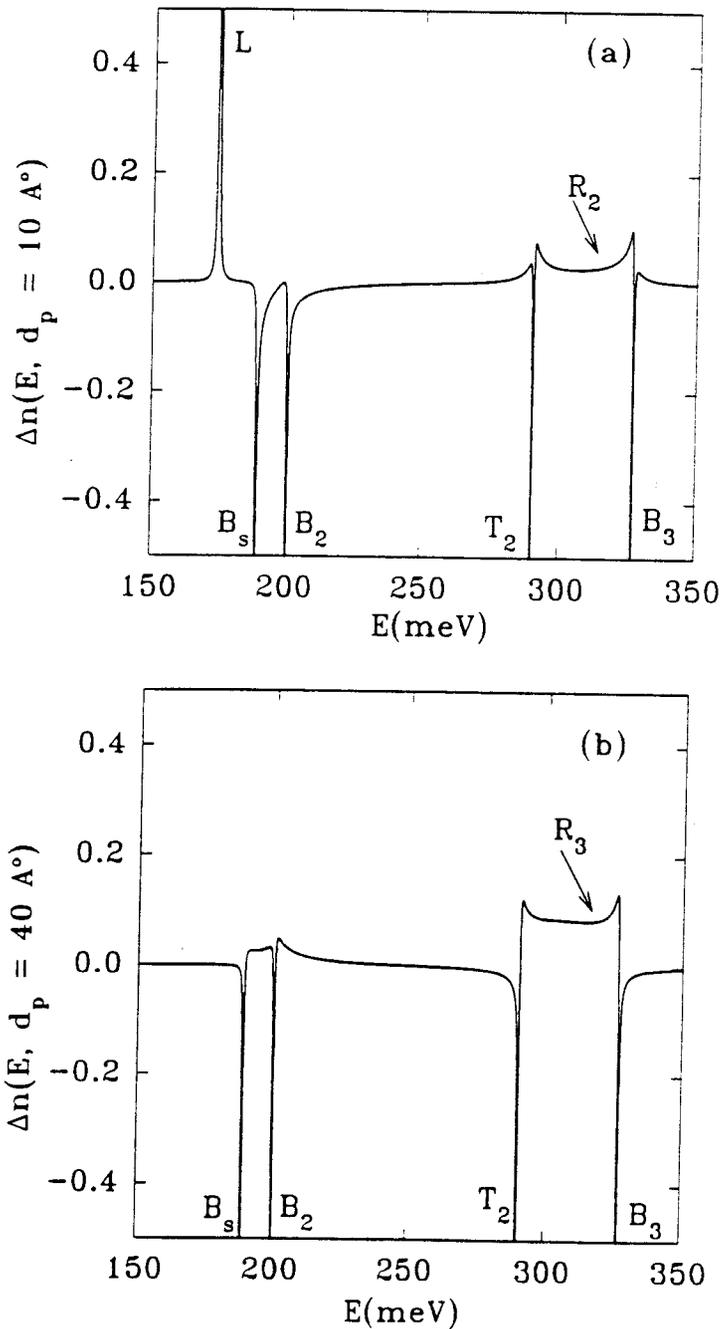


Figure V-8 Même chose que la fig.V-7, pour deux super-réseaux semi-infinis complémentaires : le premier (a) se terminant par une couche GaAs d'épaisseur $d_p = 10 \text{ \AA}$ ($d_p = \frac{d_1}{5}$) et le deuxième (b) se terminant par une couche GaAs d'épaisseur $d_p = 40 \text{ \AA}$ ($d_p = \frac{4}{5} d_1$). R_2 et R_3 indiquent les résonances induites par le substrat dans le deuxième minigap de chacun de ces deux super-réseaux. Le pic L correspond à l'état localisé de surface, tandis que les pics B_i, T_i et B_3 ont la même signification que dans la fig. V-7.



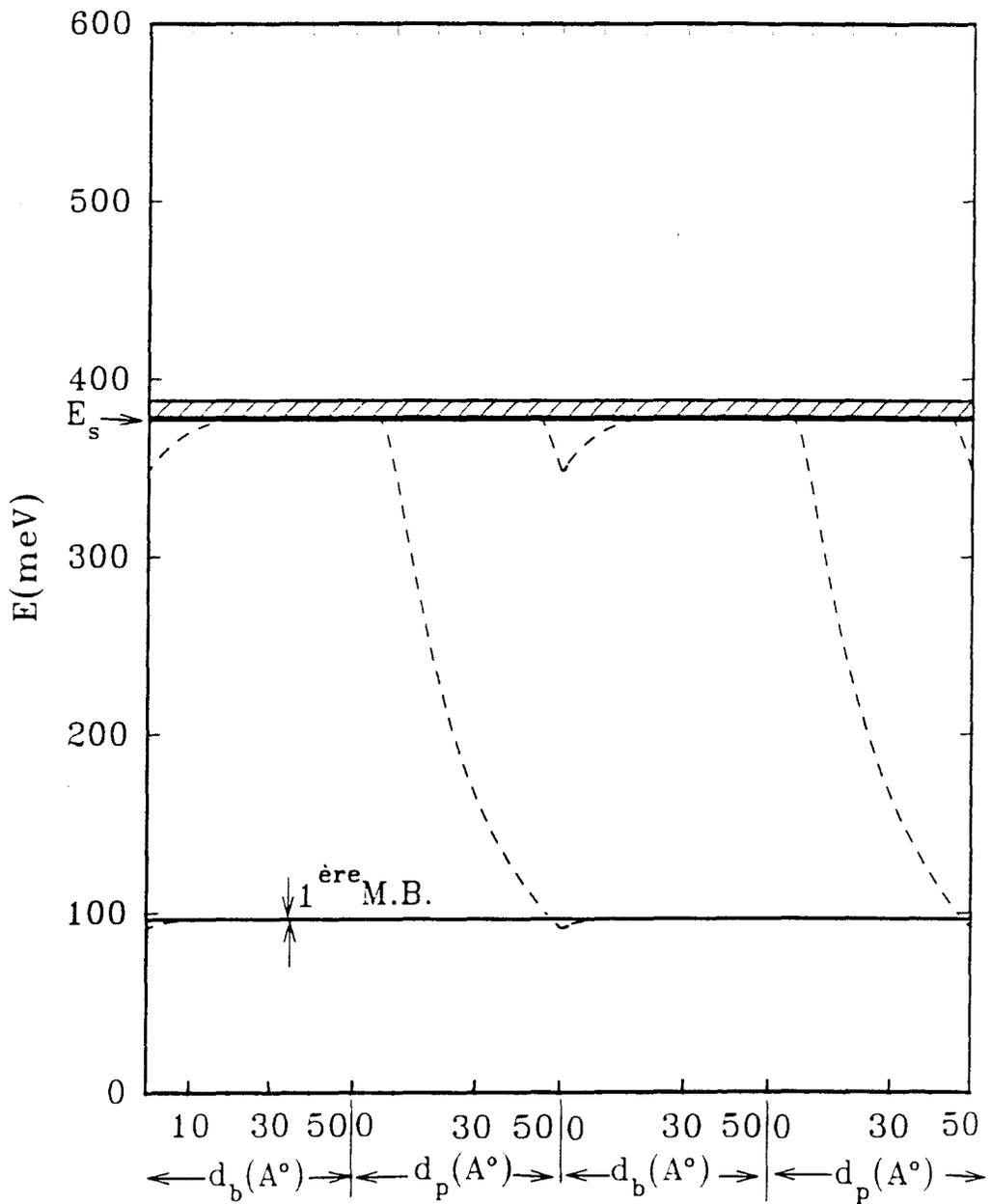


Figure V-9 Même chose que les figures V-5 et V-6, pour un super-réseau GaAs-Ga_{0,4}Al_{0,6}As en contact avec un substrat Ga_{0,6}Al_{0,4}As, et pour des épaisseurs d_b et d_p des couches de surface correspondant à deux périodes successives. On peut noter particulièrement les minima présentés par les branches localisées à l'intérieur des minigaps, ainsi que la largeur très faible de la première minibande.

même en-dessous des bandes de volume, ce qui n'est pas le cas dans les autres situations discutées précédemment où les branches se détachent d'une bande pour rejoindre la bande juste au-dessous. D'autre part, la première minibande a une largeur très faible par rapport à celle du minigap.

Par conséquent, ces états de surface qui apparaissent au-dessous de la bande du substrat, pourraient jouer un rôle important dans des expériences d'excitation électronique puisque, d'une part, ils sont très localisés à l'interface super-réseau-substrat (à cause de la largeur importante du minigap par rapport à celle de la minibande), d'autre part, les états propagatifs du super-réseau forment une bande très étroite.

V-4 CONCLUSION

En utilisant la théorie des réponses d'interface, nous avons examiné en détail les propriétés électroniques des super-réseaux semi-infinis, traités dans l'approximation de modulation de la masse et du potentiel (modèle de Kronig-Penney). Les états localisés et résonnants dus à la surface interne (c'est-à-dire, l'interface super-réseau-substrat) dépendent fortement des paramètres relatifs du super-réseau et du substrat, ainsi que de la nature et de l'épaisseur de la couche du super-réseau en contact avec le substrat.

En changeant la concentration x d'Al dans les couches barrières du super-réseau $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ à partir de $x = 0$ jusqu'à $x=1$ (tout en fixant celle dans le substrat), on passe d'un super-réseau où les puits de potentiel sont fortement couplés (bandes larges et gaps étroits) à un super-réseau où les puits de potentiel sont faiblement couplés (bandes étroites et gaps larges). Simultanément les états de surface qui sont situés au-dessus de chaque minibande pour les faibles valeurs de x ($x \leq 0.5$) croisent celles-ci pour réapparaître en-dessous de ces bandes vers $x \geq 0.65$ (voir Fig. V-2).

Lorsqu'on change cette fois la concentration y d'Al dans le substrat $\text{Ga}_{1-y}\text{Al}_y\text{As}$ à partir de $y = 0$ jusqu'à $y = 1$ (tout en fixant celle dans les couches barrières du super-réseau), la hauteur de la barrière de potentiel du substrat change, donnant lieu dans ce cas au croisement d'un des états localisés de surface avec une minibande; la branche de surface située au-dessous de la minibande pour $y \leq 0.17$ passe au-dessus de celle-ci pour $y \geq 0.35$ (Fig. V-4).

Toutes ces conclusions sont en accord avec les résultats d'Ohno et al [6,7] et confirment aussi ceux de la référence [24] où des calculs par la méthode auto-cohérente prévoit des états de surface au-dessous (respectivement au-dessus) des minibandes, associés à des couches d'accumulation (respectivement de déplétion) en surface.

Finalement, en fixant les paramètres du super-réseau et ceux du substrat, nous avons aussi examiné l'influence de l'épaisseur de la couche du super-réseau en contact avec le substrat sur les états localisés et résonnants induits par la surface interne. Suivant la différence de potentiel entre les couches du super-réseau et le substrat, des branches localisées peuvent se détacher d'une minibande et rejoindre celles juste au-dessous (Fig. V-5), ou rebrousser chemin en donnant lieu à des minima à l'intérieur des minigaps (Fig. V-9).

Notons que des états localisés de surface ont été observés par des expériences de photocourant sous un champ électrique [9], dans des super-réseaux finis GaAs-Ga_{0.65}Al_{0.35}As ayant une couche de surface GaAs d'épaisseur égale à deux fois celles en volume. En particulier, une interaction et un mélange de ces états de surface avec les états de volume du super-réseau, ont pu être observés dans des spectres de photocourant et interprétés à l'aide de la fonction-enveloppe.

Finalement, pour ce qui concerne les résonances associées à l'interface super-réseau-substrat, nous avons montré la possibilité de leur existence à l'intérieur des minigaps du super-réseau tout en étant dans la bande de volume du substrat. Ces résonances de poids environ égal à un pour deux super-réseaux complémentaires, se répartissent différemment sur chacun des super-réseaux semi-infinis (Figs. V-8a et V-8b).

Bibliographie du chapitre V

- 1 - G. Bastard, Phys. Rev. B 25, 7584 (1982).
- 2 - P. Masri, L. Dobrzynski, B. Djafari Rouhani, and I.O.A. Idioidi, Surf. Sci. 166, 301 (1986).
B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski and P. Masri, Phys. Rev. B 31, 7739(1985).
- 3 - V. Milanovic and D. Tjapkin, Phys. Status Solidi B 110, 687 (1982).
- 4 - A. Sasaki, Phys. Rev. B. 30, 7016 (1984); surf. Sci. 174, 624 (1986).
- 5 - H. -S Cho and P.L. Prucnal, Phys. Rev. B 36, 3237 (1987).
- 6 - H. Ohno, E.E. Mendez, J.A. Brum, J.M. Hong, F. Agullo-Rueda, L.L. Chang and L. Esaki, Phys. Rev. Rev. Lett 64, 2555 (1990).
- 7 - H. Ohno, E.E. Mendez, A. Alexandrou and J.M. Hong, Surf. Sci 267, 161 (1992).
- 8 - I. Tamm, Phys. Z. Sowjetunion 1, 733 (1932).
- 9 - F. Agullo-Rueda, E.E. Mendez, H. Ohno, and J.M. Hong, Phys. Rev. B 42, 1470 (1990).
- 10 - P. Masri and M.D. Rahmani, Phys. Rev. B 40, 1175 (1989).
- 11 - M. Steslicka, R. Kucharczyk and M.L. Glasser, Phys. Rev. B 42, 1458 (1990).
- 12 - F. Y. Huang, Appl. Phys. Lett. 57, 1669 (1990).
- 13 - F. Y. Huang, H. Morkoc, J. Appl. Phys. 71, 524 (1992).
- 14 - R. Kucharczyk and M. Steslicka, Solide State Commun. 84, 727 (1992).
- 15 - S.V. Ivanov, P.S. Kop'ev, T.V. Shubina and A.A. Toropov, Semiconductor Sci. Technol. 8, 357 (1993).

- 16 - M. Steslicka, R. Kucharczyk, L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani, E.H. El Boudouti and W. Jaskolski, Prog. in Surf. Sci. (à paraître).
- 17 - W. Jaskolski, Phys. Rev. B 45, 4398 (1992).
- 18 - E.H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani, E.M. Khourdifi and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B. 48, 10987 (1993).
- 19 - R. de L. Kronig and W.G. Penney, Proc. Roy. Soc. a 130, 499 (1931).
- 20 - L. Dobrzynski, Surf. Sci. 200, 435 (1988).
- 21 - A. Akjouj, M. L. Bah, E.H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski (à paraître).
- 22 - E.H. El Boudouti, R. Kucharczyk and M. Steslicka, VIth Symposium on Surface Physics, Chlum Castle, Czech Republic, 24-28 May 1993. Czech. J. of Phys. 43, 899 (1993).
- 23 - M. Steslicka, R. Kucharczyk, E.H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani, and L. Dobrzynski : ECOOS - 13, Warwick 30 août - 4 Septembre 1993 (Grande Bretagne).
M. Steslicka et al (à paraître).
- 24 - R. H. Yu, Phys. Rev. B 47, 1379 (1993) et références incluses.

Conclusion Générale

CONCLUSION GENERALE

La plus grande partie de ce mémoire a porté sur l'étude des ondes acoustiques de surface et d'interface dans les super-réseaux semi-infinis, ainsi que dans des structures plus complexes telles que le super-réseau fini déposé sur un substrat et recouvert d'une couche d'encapsulation. Cette étude a permis de mettre en évidence l'existence de modes localisés et résonnants dans ces hétérostructures et présente un intérêt pratique pour la caractérisation des propriétés élastiques des matériaux en couches minces en relation avec des expériences de diffusion de la lumière.

Pour aborder l'étude des propriétés vibrationnelles de ces systèmes lamellaires dans le cadre de la théorie des réponses d'interface, nous avons d'abord calculé les fonctions de Green des milieux constituants : substrat semi-infini, lames minces.

Dans une première application, nous avons considéré une couche adsorbée sur un substrat, notamment en raison de l'intérêt récent porté aux résonances quasi-longitudinales dans une telle couche. Pour obtenir les différents modes localisés et résonnants d'un tel système, nous avons déterminé une expression simple et générale pour calculer les densités d'états. Des résonances intenses ont été trouvées comme extension des ondes de Love et de Sezawa à l'intérieur des bandes de volume du substrat. Celles-ci existent dans le domaine des vitesses transverses du son, mais aussi dans le domaine des vitesses longitudinales où elles ont un caractère longitudinal prépondérant (c'est-à-dire, la composante principale de la vibration est confinée dans la couche adsorbée et décroissante dans le substrat).

En ce qui concerne les modes acoustiques de polarisation transverse dans les super-réseaux, nous avons pu calculer analytiquement les fonctions de Green et par suite les densités d'états dans les super-réseaux semi-infinis (avec une surface libre recouverte ou non d'une couche d'encapsulation, ou en contact avec un substrat) ainsi que dans les super-réseaux finis. Ces densités nous ont permis d'étudier la dispersion des modes localisés et résonnants dans ces hétérostructures. Nous avons montré, en particulier, que la création de la surface libre d'un super-réseau semi-infini ou de son interface avec un substrat donne lieu dans la variation de la densité d'états totale à des pics δ de poids $-\frac{1}{4}$, aux limites des bandes de volume du super-réseau et du substrat. Une conséquence

de cette propriété est la nécessaire existence de modes localisés de surface et de modes résonnants d'interface, afin de respecter la règle de conservation du nombre total d'états. Plus précisément, si on considère deux super-réseaux semi-infinis complémentaires obtenus par clivage d'un super-réseau infini, il existe autant d'états localisés de surface que de minigaps pour chaque valeur de $k_{//}$. De même, si on couple les deux super-réseaux précédents avec deux substrats identiques, il devrait exister des résonances à l'intérieur des minigaps du super-réseau tout en étant dans la bande de volume du substrat. Ces modes de surface et d'interface dépendent fortement des paramètres élastiques de la couche recouvrant le super-réseau et du substrat, ainsi que de la nature de la dernière couche du super-réseau en contact avec ces matériaux.

En effet, lorsqu'on fait varier l'épaisseur de la couche de surface du super-réseau semi-infini (sans faire varier sa nature), des modes de surface apparaissent dans les gaps. En pénétrant dans les bandes de volume du super-réseau, ces modes deviennent des résonances qui restent cependant bien définies uniquement tant que leurs fréquences restent au voisinage des limites des bandes de volume. Elles s'évanouissent ensuite très rapidement en pénétrant dans les bandes. En recouvrant le super-réseau par une couche d'encapsulation d'épaisseur et de nature différente de celles en volume, des modes localisés et résonnants induits par cette couche, apparaissent respectivement dans les gaps et dans les bandes de volume du super-réseau. Les résonances les plus intenses apparaissent pour des épaisseurs élevées de la couche d'encapsulation, juste au-dessus de la vitesse du son transverse de cette couche. Notons aussi l'apparition de modes localisés à l'interface super-réseau-couche d'encapsulation.

Lorsqu'on fait tendre vers l'infini l'épaisseur de cette couche recouvrant le super-réseau, on trouve la situation de l'interface super-réseau-substrat. Les modes associés à cette interface sont examinés en fonction du paramètre $C_{44}^{(s)}$ du substrat. Suivant que la valeur de ce paramètre est faible ou élevée, on trouve respectivement la situation d'un super-réseau semi-infini avec une surface libre de contraintes ou rigidement bloquée.

Nous avons aussi examiné les ondes acoustiques transverses dans le système couplé substrat-super-réseau fini-couche d'encapsulation. Les modes discrets du super-réseau fini isolé deviennent, en raison de leur interaction avec le substrat, soit des modes localisés dans le super-réseau (décroissant dans le substrat), soit des modes résonnants à l'intérieur de la bande de volume du

substrat. Les structures fines observées récemment dans des expériences Raman sur les super-réseaux $\text{Si-Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ semblent être les analogues de ces modes, dans le cas des vibrations longitudinales et pour $k_{//} = 0$. En augmentant le nombre N de périodes dans le super-réseau, on retrouve la bande de volume du super-réseau, ainsi que les modes localisés associés à sa surface libre ou à son interface avec le substrat. Pour un super-réseau mince, ces derniers modes interagissent ensemble lorsqu'ils sont localisés dans le même minigap. Lorsque l'épaisseur de la couche d'encapsulation tend vers l'infini, on trouve la situation d'un super-réseau fini placé entre deux substrats homogènes (système sandwich). Dans ce cas, les modes d'interface qui sont deux fois dégénérés pour un super-réseau épais, interagissent ensemble pour un super-réseau mince, lorsqu'ils tombent à l'intérieur du même minigap. Ce système est aussi une généralisation du système sandwich simple ABC où B serait un matériau homogène. Il peut être utilisé pour une transmission sélective des ondes acoustiques d'un substrat vers l'autre.

En ce qui concerne les modes de polarisation sagittale, nous nous sommes limités au cours de ce travail à l'étude des modes localisés et résonnants dans les super-réseaux semi-infinis sans faire varier la nature de la couche superficielle. En particulier, nous avons montré numériquement que la création de deux super-réseaux semi-infinis complémentaires à partir d'un super-réseau infini, donne lieu dans la variation de la densité d'états à des pics δ de poids $-1/2$, aux limites des bandes de volume associées aux deux polarisations des ondes. Une conséquence de ce résultat est l'apparition de modes localisés à l'intérieur des gaps du super-réseau, mais aussi des modes "semi-localisés" (sans analogue pour les modes transverses) pour lesquels une composante s'atténue dans le super-réseau tandis que l'autre composante est propagative.

Finalement, nous avons examiné les états électroniques associés à la surface interne d'un super-réseau semi-conducteur, c'est-à-dire son interface avec le substrat. Pour ce faire, nous avons utilisé un modèle simple de Kronig-Penney caractérisé par la modulation de la masse effective et du potentiel. Les expressions analytiques des fonctions réponses et des densités d'états résultent d'une simple transposition aux propriétés électroniques de nos calculs dans le cas des ondes acoustiques transverses. Notons, néanmoins, que ces expressions compactes nous permettent d'obtenir les résultats numériques avec un temps de calcul très réduit en comparaison avec la méthode classique d'adaptation des fonctions d'ondes. Notons, également, que ces résultats concernant les états électroniques sont en

accord qualitatif avec des résultats expérimentaux et théoriques parus récemment.

Le travail présenté dans ce mémoire sera poursuivi par une analyse plus détaillée des modes sagittaux ou encore les modes où les trois directions de vibrations sont couplées. Notons que les modes résonnants de surface et d'interface n'ont pas encore été étudiés dans ce cas. Or en raison de leur comportement "semi-localisé", ils seraient certainement plus intéressants que dans le cas de la polarisation transverse.

Les fonctions de Green calculées dans ce travail peuvent aussi être utilisées pour étudier l'interaction de la lumière avec les phonons acoustiques dans les super-réseaux. Ceci permettrait une comparaison encore plus directe avec les résultats expérimentaux de la diffusion de la lumière.

Parmi d'autres extensions possibles de ce travail on peut mentionner les super-réseaux constitués de matériaux piézoélectriques ou encore des multicouches lamellaires en contact avec un fluide où on peut s'attendre à des situations qualitativement nouvelles.

