N°d'ordre: 1421

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

Mamadou Lamarana BAH

Thème

Polaritons de surfaces et d'interfaces dans les hétérostructures lamellaires: couches adsorbées, multicouches et super-réseaux. Extension aux ondes optiques.

Soutenue le 06 Avril 1995 devant la Commission d'Examen

Président: **M. MORE**, *Professeur, Université de Lille I*
Rapporteurs: **H. PUSZKARSKI**, *Professeur, Université de Poznan, Pologne*
P.ZIELINSKI, *Docteur Habilité, Institut de Physique Nucléaire de Cracovie, Pologne*
Examinteurs: **B. DJAFARI-ROUHANI**, *Professeur, Université de Lille I*
A. AKJOUJ, *Maître de Conférences, Université de Lille I*
Directeur de Thèse: **L. DOBRZYNSKI**, *Directeur de Recherches, C.N.R.S.*

Je dédie cette thèse
à la mémoire de ma belle-soeur Aye Diouldé
à mon épouse Fatou, à notre fille Aye Diouldé
et à nos parents

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. ***Lefèbvre*** *auquel j'adresse ma profonde gratitude. Il s'inscrit dans le cadre de l'accord de coopération entre cette Université et l'Université de Conakry, République de Guinée. Mes sentiments de reconnaissance vont également à Monsieur le Professeur H.* ***Fontaine*** *qui m'a accueilli dans ce Laboratoire.*

J'adresse mes remerciements à Monsieur M. ***More****, Professeur à l'Université de Lille I pour avoir accepté de faire partie du jury de soutenance de cette thèse et d'en être le président.*

J'exprime ma profonde reconnaissance à Monsieur L. ***Dobrzynski****, Directeur de Recherches au Centre National de la Recherche Scientifique pour m'avoir accepté au sein de l'équipe qu'il dirige. Je lui dois ce travail. Qu'il trouve ici l'expression de mes sincères remerciements pour l'aide efficace qu'il m'a apportée et pour la patience, la rigueur et la disponibilité dont il a fait montre dans la conduite de mes travaux.*

J'adresse mes vifs remerciements à Monsieur A. ***Akjouj****, Maître de conférences à l'Université de Lille I qui a attaché un intérêt tout particulier à mon travail en lui accordant une attention constante et soutenue. Son esprit critique, sa disponibilité ainsi que son humanisme m'ont beaucoup encouragé. Je lui en sais gré infiniment.*

Je remercie également Messieurs H. ***Puszkarski****, Professeur à l'Université de Poznan (Pologne) et P.* ***Zielinski****, Docteur habilité à l'Institut de Physique Nucléaire de Cracovie (Pologne) pour avoir accepté de juger mon travail et en être les rapporteurs.*

Que Monsieur B. ***Djafari-Rouhani****, Professeur à l'Université de Lille I, trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance pour ses critiques, conseils et encouragements et pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.*

La dernière partie de ce document a bénéficié de la collaboration de M. EL H. ***EL Boudouti****, Docteur de l'Université. Je lui exprime mes sincères remerciements ainsi qu'à toute l'Equipe de Dynamique des Interfaces. Que tous ceux qui ont contribué à la réalisation matérielle de ce document, en l'occurrence Mme* ***Buckowski****, Mlles S.* ***Isabelle*** *et P.* ***Sandrine*** *pour la frappe d'une partie de ce mémoire, J. M.* ***Raffaud*** *pour les dessins et S.* ***Fauquembergue*** *pour les tirages, reçoivent mes vifs remerciements.*

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

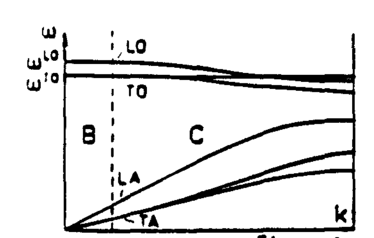
Résumé

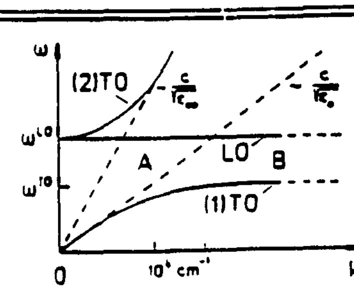
Ce travail a pour objet l'étude des phonon-polaritons de polarisation P et des ondes optiques de polarisation S dans des systèmes composites constitués de matériaux diélectriques isotropes tels que: simple interface, lame mince, double interface, super-réseaux. Les phonon-polaritons sont obtenus par le couplage du champ électromagnétique (photon) avec les phonons optiques d'un milieu condensé. Sans ce couplage, on parle alors d'ondes optiques (ou photons). La polarisation P suppose que le champ électrique se trouve dans le plan saggital (plan défini par le vecteur d'onde et la normale aux interfaces), tandis que pour la polarisation S, le champ électrique est perpendiculaire au plan saggital.

Un chapitre de ce travail est consacré à l'étude des phonon-polaritons localisés d'interface et de surface, et des modes confinés dans les films minces diélectriques insérés. Dans ce dernier cas, nos résultats mettent en évidence une dépendance des modes confinés avec l'épaisseur et la nature de la couche mince prise en sandwich entre deux matériaux diélectriques semi-infinis.

Nous avons aussi étudié la dispersion des phonon-polaritons dans les super-réseaux. Les résultats obtenus révèlent que la création de surfaces libres et d'interfaces induit des modes localisés de surface et d'interface. Dans le cas spécifique du super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage, il a été montré que ces modes dépendent fortement de l'épaisseur et de la nature de la couche adsorbée. La détermination des fonctions réponses (de Green) a permis le calcul analytique des densités d'états locales et totales.

Finalement, la dispersion des modes optiques localisés et résonnants et leur distribution spatiale ou densités d'états, ont été examinées aussi bien dans le cas d'un super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage différente des couches de volume, que dans celui d'une interface super-réseau/substrat.





Mots clés

Polaritons
Phonon-polaritons
Ondes optiques
Surface et interface
Modes localisés et résonnants
Densité d'états
Super-réseau
Couche adsorbée

Abstract

The aim of this work is the study of P-polarized phonon-polaritons and S-polarized optical waves in composite systems made from dielectric isotropic materials, such as: single interface, slab, dielectric film bounded by two nonidentical dielectrics and superlattices. The phonon-polaritons are obtained by coupling the electromagnetic field (photon) to optical phonons in a condensed medium. Without this coupling, one obtaines the optical waves (or photons). For the P-polarization, the electric field is in the sagittal plane, i. e. the plane containing the propagation vector $k_{//}$ (parallel to the interfaces) and the normal to the interfaces; while for the S-polarization, the electric field is perpendicular to the sagittal plane.

One section of this work is devoited to the study of localized interface and surface phonon-polaritons and confined modes inside dielectric inserted slabs. In this latter cas, our results show that confined modes are very sensitive to the thickness and to the nature of the inserted slab.

We have also studied the dispersion of phonon-polaritons in superlattices. The results obtained show that the creation of a free surface and/or interface induces localized surface and interface modes. In the specific cas of the semi-infinite superlattice with a cap layer, it has been shown that these modes are very sensitive to the width and to the nature of the cap layer. The knowledge of response functions (Green functions) in these heterostructures enabled us to calculate local and total densities of states.

Finally, the dispersion of localized and resonant optical modes, and their spatial distribution (i.e. local and total densities of states) have been examined as well as in a semi-infinite superlattice with a cap layer than in a semi-infinite superlattice in contact with a substrat.

Sommaire

SOMMAIRE

Page

•INTRODUCTION GENERALE....4

Bibliographie....7

•CHAPITRE I: *Théorie des réponses d'interface en électromagnétisme des matériaux diélectriques composites*

I-1) Introduction....12

I-2) Théorie générale des réponses d'interface....13

I-2-1) *Systèmes composites discrets*....13

I-2-2) *Vecteurs propres d'un système composite*....16

I-2-3) *Quelques équations utiles pour le passage aux systèmes composites continus*....18

I-2-4) *Systèmes composites continus*....19

I-3) Milieu diélectrique infini et milieu diélectrique limité par la surface d'une boîte noire....22

I-4) Cas d'un diélectrique quelconque....27

I-5) Equations de base pour des composites formés de couches diélectriques isotropes....28

I-6) Conclusion....35

Bibliographie....36

•CHAPITRE II: *Polaritons dans quelques systèmes composites simples*

II-1) Introduction....37

II-2) Milieu diélectrique semi-infini....38

II-2-1) *Fonction réponse*....38

II-2-2) *Vecteurs propres*....39

II-3) Lame mince diélectrique limitée par deux surfaces parfaitement réfléchissantes....40

II-3-1) *Fonction réponse*....40

II-3-2) *Vecteurs propres*....................42
II-4) Interface entre deux mileux diélectriques isotropes semi-infinis....................44
II-4-1) *Fonctions réponses*....................44
II-4-2) *Vecteurs propres*....................46
II-5) Film mince diélectrique inséré entre deux autres diélectriques semi-infinis..48
II-5-1) *Fonctions réponses*....................48
II-5-2) *Vecteurs propres*....................54
II-6) Application et discussion des résultats pour les modes P....................58
II-6-1) *Polaritons à l'interface entre deux milieux diélectriques semi-infinis*....................60
II-6-2) *Polaritons de "sandwich"*....................66
II-7) Conclusion....................73
Appendice A....................74
Bilbliographie....................84

•CHAPITRE III: *Polaritons dans les super-réseaux diélectriques*

III-1) Introduction....................87
III-2) Super-réseaux diélectriques infinis....................88
III-2-1) *Conception du modèle*....................88
III-2-2) *Fonction réponse pour une couche diélectrique*....................90
III-2-3) *Expression complète de la fonction réponse*....................92
III-3) Interface entre un super-réseau semi-infini et un diélectrique homogène semi-infini....................100
III-3-1) *Conception du modèle*....................100
III-3-2) *Opérateur réponse d'interface*....................102
III-3-3) *Fonction réponse d'interface*....................103
III-3-4) *Fonction réponse complète*....................105
III-4) Super-réseau limité par une couche diélectrique homogène finie différente de celle de volume....................109
III-4-1) *Conception du modèle - Opérateur de perturbation*....................109
III-4-2) *Opérateur réponse d'interface*....................111
III-4-3) *Fonction réponse dans l'espace des interfaces*....................113
III-4-4) *Fonction réponse complète*....................117
III-5) Densités d'états....................118

III-5-1) *Densités d'états locales des modesP*......118
III-5-2) *Densités d'états totales des modes P*......118
III-6) Applications et discussions des résultats pour les modes P......121
III-6-1) *Polaritons dans un super-réseau semi-infini limité par le vide*......122
III-6-2) *Polaritons dans un super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage en contact avec le vide*......126
III-6-3) *Interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat*......133
III-7) Conclusion......136
Bibliographie......139

•CHAPITRE IV: *Modes optiques localisés et résonnants dans les super-réseaux* (*polarisation S*)

IV-1) Introduction......142
IV-2) Rappel de quelques équations de base pour les super-réseaux à couches diélectriques isotropes......143
IV-3) Densité d'états......144
IV-3-1) *Densité d'états locale*......145
IV-3-2) *Densité d'états totale*......146
IV-3-3) *Etats localisés*......148
IV-3-4) *Cas limite d'un super-réseau semi-infini sans une couche d'encapsulage*......149
IV-3-5) *Cas d'une interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat homogène*......150
IV-4) Applications et discussions des résultats......150
IV-4-1) *Super-réseaux semi-infinis*......150
IV-4-2) *Super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage*......155
IV-4-3) *Super-réseau semi-infini en contact avec un substrat semi-infini*......162
IV-5) Conclusion......166
Appendice B......168
Bibliographie......172

•CONCLUSION GENERALE......174

Introduction Générale

INTRODUCTION GENERALE

Les polaritons, maintenant bien connus, sont obtenus par le couplage d'un champ électromagnétique (photon) avec une excitation élémentaire (phonon, plasmon,etc...) dans un milieu condensé [1-4]. Depuis la prédiction de leur existence en 1951 par K. Huang [1], de nombreux travaux [5-15] (expérimentaux et théoriques), ont été consacrés à l'étude de ces quasi-particules. Leur mise en évidence expérimentale, donnée pour la première fois en 1965 par Henry et Hopfield [6] dans le cristal de type GaP, a été suivie par d'importantes investigations dont les résultats sont resumés dans plusieurs articles [7-12].

Les caractéristiques des polaritons que nous étudions dans le présent travail, sont considérablement modifiées par la présence de surfaces (ou d'interfaces) entre les milieux diélectriques, comme dans le cas de milieux semi-infinis et des films minces. Voir par exemple les références [16-18]. Les modes de polaritons qui se propagent dans les systèmes physiques forment les bandes de volume qui sont séparées par des gaps où peuvent exister les polaritons localisés associés à une perturbation due à la création d'une surface (polaritons de surface) ou d'une interface (polaritons d'interface). Les propriétés spécifiques de ces polaritons dépendent du milieu matériel, habituellement décrit par sa fonction diélectrique. L'amplitude des modes qui leur sont associés est maximale à la surface (ou à l'interface) et décroît exponentiellement au fur et à mesure que l'on s'éloigne de celle-ci. La majorité des études expérimentales sur les polaritons de surface a été réalisée par la méthode de spectroscopie par réflexion totale atténuée conçue par Otto [19-21] (cas des plasmon-polaritons de surface). C'est Ruppin [22,23] qui a adapté le dispositif d'Otto à l'étude de l'excitation des polaritons dans une couche diélectrique (phonon-polaritons de surface). La diffusion Raman est aussi une technique appropriée pour l'étude expérimentale [15, 24,25] des polaritons de surface.

Pendant ces dernières années l'intérêt s'est beaucoup tourné vers l'étude des excitations dans les hétérostructures. Par exemple, dans le cas de la théorie de l'élasticité, les états localisés associés à une perturbation du super-réseau due à la création de: défauts [26], surface libre [27], interface avec le substrat [28] et plus récemment, au dépôt d'une couche d'encapsulage [29], ont été examinés. Dans le même cadre, des travaux par diffusion Raman, entre autres, ont permis d'étudier les ondes de surface de type Rayleigh, Sezawa, Love, dans les super-réseaux métalliques [30-34] et semi-conducteurs [35-37].

De même, des études théoriques portant sur les polaritons dans les super-réseaux diélectriques en particulier, ont conduit à de nombreux résultats [38-46] dont la plupart se rapporte au calcul de la dispersion des polaritons dans ces structures. Voir par exemple les références [47-52].

Notons que sur la base de la théorie électrodynamique, quelques méthodes ont été déjà proposées. Tel est le cas de la méthode de la matrice de transfert [53] et du formalisme de la fonction de Green [54]. Dans ce contexte, la théorie générale des réponses d'interface introduite par Léonard Dobrzynski [55] demeure efficace pour l'étude aussi bien des excitations électroniques, vibrationnelles, etc... qu'électrodynamiques dans les super-réseaux. C'est cette dernière méthode que nous utilisons dans le présent travail. Plus précisément, nous l'appliquons à l'étude des modes des polaritons, d'abord dans des systèmes composites diélectriques simples [46]: surface libre, interface entre deux milieux diélectriques semi-infinis, lame mince diélectrique, lame mince insérée entre deux matériaux diélctriques semi-infinis; ensuite, dans des structures diélectriques plus complexes: super-réseau infini, interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat (ou le vide), super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage (elle même limitée par le vide).

A l'aide d'une approche de la fonction de Green basée sur la théorie de réponse d'interface, nous construisons les expressions analytiques des fonctions réponses associées aux systèmes composites mentionnés ci-dessus dont les pôles fournissent les états de polaritons localisés. De plus, la connaissance des fonctions réponses nous permet de calculer la distribution complète de ces états dans les super-réseaux, c'est-à-dire les densités d'états locales et totales.

Pour illustrer nos résultats analytiques généraux, nous donnons des applications numériques pour des systèmes composites concrets. Notamment, nous discutons en détail des polaritons de polarisation P en négligeant les effets de retard. Pour ces polaritons, le champ électrique se trouve dans le plan saggital (plan défini par le vecteur d'onde et la normale aux interfaces). Nous présentons une extension des résultats généraux au cas des modes optiques de polarisation S (c'est-à-dire, lorsque le champ électrique est perpendiculaire au plan saggital) dans ces hétérostructures.

Ainsi, nous avons structuré ce travail de la façon suivante. Dans le premier chapitre, nous donnons d'abord un bref rappel du principe de la théorie générale de réponse d'interfaces. Ensuite, sur la base des équations de Maxwell, nous montrons comment bâtir les équations de base permettant de calculer les fonctions réponses associées à n'importe quel système composite diélectrique. Dans le deuxième chapitre, nous construisons les expressions analytiques des fonctions réponses et des vecteurs propres associés: à l'interface entre deux matériaux semi-infinis, à la lame mince diélectrique et au système "sandwich". Des applications numériques illustrent la dispersion des modes de phonon-polaritons (polarisation P) de volume et d'interfaces. Le troisième chapitre est consacré essentiellement à l'étude des phonon-polaritons de surface et d'interface (modes P) dans les super-réseaux diélectriques à deux couches. De plus, nous y donnons les expressions explicites des variations de densités d'états. Pour la première fois, dans le cas du super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage, nous présentons les variations de ces modes en fonction de l'épaisseur de la couche ajoutée en surface [56]. Le dernier chapitre présente une extension des résulats généraux établis dans le troisième chapitre aux modes optiques de polarisation S localisés et résonnants dans les super-réseaux en considérant des systèmes tels que [57]: interface super-réseau/vide (ou substrat différent du vide), couche homogène limitée par le vide et déposée sur un super-réseau semi-infini.

Bibliographie de l'introduction

[1] **K. Huang,** Proc. Soc. Lond. A208 (1951)352.

[2] **E. Burstein, A. Hartstein, J. Schoenwald, A. A. Maradudin, D. L. Mills** and **R. F. Wallis,** in: "Polaritons", edited by E. Burstein and F. de Martini (Pergamon, New York, 1974) 89.

[3] **D. L. Mills** and **E. Burstein,** Rep. Progr. Phys.37 (1974) 817.

[4] **G. Borstel** and **H. J. Falge,** in: "Electromagn. Surf. Modes", edited by A. D. Bordman (John Wiley & Sons Ltd., 1982) 219.

[5] **E. Burstein, W. P. Chen, Y. J. Chen** and **A. Hartstein,** J. Vacuum Sci. Technol., 11 (1974) 1004.

[6] **C. H. Henry** and **J. J. Hopfield,** Phys. Rev. Lett., 15 (1965) 964.

[7] **J. S.Nkoma, R. Loudon** and **D. R. Tilley,** J. Phys., C7 (1974) 3547.

[8] **A. Otto,** Advan. Solid State Phys., 14 (1974) 1.

[9] **C. A. Ward, R. J. Bell, R. W. Alexander, G. S. Kovener** and **I. Tyler,** Appl. Opt., 13 (1974) 2378.

[10] **V. V. Bryksin, Yu. M. Gerbshtein** and **D. N. Mirlin,** Soviet Phys. Solid State, 13 (1972) 1779; Soviet Phys. Solid State, 14 (1972) 453; Phys. Status Solidi, (b) 51(1972) 901.

[11] **A. S. Baker,** in: "Polaritons", edited by E. Burstein and F. de Martini, (Pergamon, New York, 1974) 127.

[12] **B. Fischer, N. Marschall** and **H. J. Queisser,** Surface Sci. 34 (1973) 50.

[13] **B. Fischer, I. Tyler** and **R. J. Bell,** in: "Polaritons", edited by E. Burstein and F. de Martini, (Pergamon, New York, 1974) 123.

[14] **N. Marschall** and **B. Fischer,** Phys. Rev. Letters, 28 (1972) 811.

[15] **D. J. Evans, S. Ushioda and J. D. McMullen,** Phys. Rev. Letters, 31 (1973) 369.

[16] **S. Ushioda,** Prog. Opt. 19 (1981) 139;
P. Halevi, Surface Sci. 76 (1978) 64-90.

[17] **S. Ushioda and R. Loudon, in:** "Surface Polaritons", edited by V. M. Agranovich and D. L. Mills (Amsterdam: North-Holland, 1982) ch.12.

[18] **M. G. Cottam and A. A. Maradudin,** in: "Surface Excitations", edited by V. M. Agranovich and R. Loudon (Amsterdam: North-Holland, 1986) ch.1.

[19] **A. Otto,** Z. Physik 216 (1968) 398.

[20] **A. Otto,** in: "Optical Properties of Solids", New Developments, Ed. B. O. Seraphin (North-Holland, 1975) 677.

[21] **A. Otto,** in: "Polaritons", Eds. E. Buestein and F. de Martini (Pergamon, New York, 1974) 117.

[22] **R. Ruppin,** Solid State Commun. , 8 (1970) 1129.

[23] **R. Ruppin,** Surface Sci., 34 (1973) 20.

[24] **Y. J. Chen , E. Burstein and D. L. Mills,** Phys. Rev. Letters, 34 (1975) 1516.

[25] **J. S.Nkoma, R. Loudon,** J. Phys. C8 (1975) 1950.

[26] **E.M. Khourdifi and B. Djafari-Rouhani,** J. Phys. (Condensed Matter) 1, (1989) 7543; **S. Tamura,** Phys. Rev. B 39, (1989) 1261.

[27] **R.E. Camley, B. Djafari-Rouhani L. Dobrzynski, and A.A. Maradudin,** Phys. Rev. B 27, (1983) 7318; **J. Sapriel, B. Djafari-Rouhani** and **L. Dobrzynski** Surface Science 126, (1983) 197.

[28] **E.M. Khourdifi and B. Djafari-Rouhani,** Surface Science, 211/212, (1989) 361.

[29] **EL H. EL Boudouti**, Thèse de Doctorat de l'Université de Lille I (1994).

[30] **A. Kueny, M. Grimsditch, K. Miyano, I. Banerjee, Charles M. Falco**, and **Ivan K. Schuller.** Phys. Rev. Letters 48 (1982) 166.

[31] **M.R. Khan, C.S.L. Chun, G. Felcher, M. Grimsditch, A. Kueny, C.M. Falco** and **I.K. Schuller**, Phys. Rev. B 27 (1983) 718.

[32] **R. Danner, R.P. Huebener, C.S.L. Chun, M. Grimsditch**, and **Ivan K. Schuller**, Phys. Rev. B 33 (1986) 3696.

[33] **J.A. Bell, W.R. Bennett, R. Zanoni, G.I. Stegeman, C.M. Falco**, and **F. Nizzoli**, Phys. Rev. B 35 (1987) 4127.

[34] **Sudha Kumar, R. Bhadra, A. Fartash, M. Grimsditch, C. Kim, S.B. Qadri** and **A.S. Edelstein**, Phys. Rev. B 44 (1991) 5905.

[35] **J. A. Bell, R.J. Zanoni, C.T. Seaton, G.I. Stegeman, W.R. Bennett** and **C.M. Falco**, Appl. Phys. Lett. 51 (1987) 652.

[36] **J.Sapriel, J.C. Michel, J.C. Tolédano, R. Vacher, J. Kervarec** and **A. Regreny**, Phys. Rev. B 28 (1983) 2007.

[37] **M. Grimsditch, R. Bhadra, Ivan K. Shuller, F. Chambers** and **G. Devane**, Phys. Rev. B 42 (1990) 2923.

[38] **P. Yeh, A. Yariv** and **C. S. Hong**, J. Opt. Soc. Am. 67 (1977) 423.

[39] **G. E. Giuliani** and **J. J. Quinn**, Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 919; **G. E. Giuliani, J. J. Quinn** and **R. F. Wallis**, J. Phs.(Paris) Colloq., 45 (1984) C5-285.

[40] **W. M. Liu, G. Eliasson** and **J. J. Quinn**, Solid State Comm., 55 (1985) 533.

[41] **Ph. Lambin, J. P. Vigneron** and **A. A. Lucas**, Solid State Comm., 54 (1985) 257 and Phys. Rev. B32 (1985) 8203.

[42] **R. Haupt** and **L. Wendler**, Solid State Comm., 5 (1987) 341.

[43] **B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski,** Solid State Comm., 62 (1985) 609.

[44] **A. Dereux, J. P. Vigneron, Ph. Lambin and A. A. Lucas,** Phys. Rev. B38 (1988) 5438. and Physica Scripta 38 (1988)462.

[45] **S. Ya. Vetrov and A. V. Shabanov,** Sov. Phys. JETP. 74 (1992) 719.

[46] **M. L. Bah, A. Akjouj and L. Dobrzynski,** Surf. Sci. Reports, 16 (1992) 95.

[47] **P. Yeh, A. Yariv and A. Y. Cho,** Appl. Phys. Lett.,32 (1978) 104.

[48] **W. Ng, P. Yeh, P. C. Chen and A. Yariv,** Appl. Phys. Lett. 32 (1978) 370.

[49] **A. Yariv and P. Yeh,** in: "Optical Waves in Crystals", Wiley Pub.,(New York, 1984).

[50] P. Yeh, in: "Optical Waves in Layered Media", Wiley Pub.,(New York, 1988).

[51] **Ph. Lambin, J. P. Vigneron, A. A. Lucas, P. A. Thiry, M. Liehr, J. J. Pireaux, R. Caudano** and **T. J. Kuech,** Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 1842.

[52] **T. Dumelov, T. J. Parker, S. R. P. Smith and D. R. Tilley,** Surface Sci. Reports 17 (1993) 151.

[53] Voir par exemple **R. E. Camley, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski** and **A. A. Maradudin,** Phys. Rev. B 27 (1983) 7318; **J. Sapriel, B. Djafari-Rouhani** and **L. Dobrzynski,** Surface Sci. 126 (1983) 197.

[54] **R. A. Brito-Orta, V. R. Velasco and F. Garcia-Moliner,** Surf. Sci. 187 (1987) 125.

[55] **L. Dobrzynski,** Surf. Sci. Rept. 11 (1990) 139; Surf. Sci. 180 (1987) 489; Surf. Sci. 182 (1987) 362.

[56] **M.L. Bah, A. Akjouj, El H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani** and **L. Dobrzynski,** Influence of capping layers on Surface phonon - polaritons in superlattices, J. Phys.C: Condensed Matter, sous presse (1995).

[57] **M. L. Bah, A. Akjouj, E. H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani** and **L. Dobrzynski**, Surface and Interface Optical Waves: Transverse Electric Localized and Resonant Modes, Journal of Optical Society of America (1995); soumis.

Chapitre I

CHAPITRE I

THEORIE DES REPONSES D'INTERFACE EN ELECTROMAGNETISME DES MATERIAUX DIELECTRIQUES COMPOSITES

I- 1) Introduction

Les Sciences utilisent tantôt un langage mathématique discret, tantôt continu selon que les variables introduites sont discrètes (par exemple dans une équation matricielle) ou continues (dans une équation différentielle). Notons aussi l'existence de la dualité discret-continu.

Ainsi, pour étudier les propriétés physiques des surfaces et interfaces dans les systèmes discrets (dynamique des cristaux, structure électronique en liaisons fortes) ou continus (élasticité, structure électronique en pseudo-potentiels, électromagnétisme), des méthodes de calcul basées sur le formalisme de la fonction de GREEN ont été élaborées [1, 2]. Dans le même cadre, Léonard DOBRZYNSKI a développé une nouvelle théorie pour l'étude des systèmes composites comportant un certain nombre de surfaces et interfaces, intitulée théorie de réponse d'interfaces [3,4].

Cette théorie, que nous utililiserons tout au long des chapitres suivants pour l'étude de quelques systèmes composites, permet de construire les expressions analytiques des fonctions réponses (ou fonctions de Green).

A travers le paragraphe 2 du présent chapitre, nous donnons un bref rappel du principe de la théorie de réponse d'interfaces ainsi que les démarches nécessaires pour passer de la théorie discrète à la théorie continue.

Nous montrons, dans les derniers paragraphes, comment on peut appliquer la théorie continue aux milieux diélectriques. En effet, sur la base de la théorie électromagnétique de Maxwell, nous écrivons les équations de base permettant de construire les fonctions réponses associées à n'importe quel système composite diélectrique, le système composite étant formé de briques élémentaires de différents matériaux diélectriques.

I - 2) Théorie générale des réponses d'interface

I - 2 - 1) Systèmes composites discrets [3]

Considérons un système contenu dans un espace fini D, et formé de N sous - systèmes définis respectivement dans leurs espaces d'existence D_i ($1 \leq i \leq N$). Ces sous - espaces sont assemblés par des domaines d'interface $M_i \in D_i$.

Chaque sous-système i est, en général, en interaction avec J autres sous - systèmes. L'espace d'interface M_i est aussi, en général, composé de J sous - interfaces M_{ij} ($1 \leq j < J$).

Pour un système infini i, l'on définit un opérateur de forme matricielle par $\overleftrightarrow{H}_{0i}$; la fonction réponse $\overleftrightarrow{G}_{0i}$ associée à $\overleftrightarrow{H}_{0i}$ est définie par :

$$\overleftrightarrow{H}_{0i}\,\overleftrightarrow{G}_{0i} = \overleftrightarrow{I} \;;\ \text{dans } D_\infty \;; \qquad \text{(I - 2 - 1)}$$

où $\overleftrightarrow{I}$ et D_∞ désignent respectivement la matrice unité et l'espace infini.

On introduit un opérateur de clivage $\overleftrightarrow{V}_{0i}$ qui découpe dans le système homogène infini les sous-systèmes ou "briques élémentaires" nécessaires pour la construction du système composite. Soit :

$$\overleftrightarrow{h}_{0i} = \overleftrightarrow{H}_{0i} + \overleftrightarrow{V}_{0i} \;;\ \text{dans } D_\infty \;; \qquad \text{(1 - 2 - 2)}$$

et

$$\overleftrightarrow{h}_{0i}\,\overleftrightarrow{g}_{0i} = \overleftrightarrow{I} \;;\ \text{dans } D_\infty . \qquad \text{(I - 2 - 3)}$$

Ces trois équations permettent d'écrire :

$$\overleftrightarrow{g}_{0i}\,(\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{0i}) = \overleftrightarrow{G}_{0i} \;;\quad \text{dans } D_\infty \;; \qquad \text{(I - 2 - 4)}$$

(Equation de Dyson).

L'opérateur réponse de surface $\overleftrightarrow{A}_{si}$ comprend par définition les éléments de matrice dans D_i de l'opérateur :

$$\overleftrightarrow{A}_{0i} = \overleftrightarrow{V}_{0i}\,\overleftrightarrow{G}_{0i} \;;\quad \text{dans } D_\infty . \qquad \text{(I - 2 - 5)}$$

On montre que pour le système i limité par des surfaces parfaitement réfléchissantes, l'équation de Dyson tronquée devient

$$\overleftrightarrow{g}_{si}\,(\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_{si}) = \overleftrightarrow{G}_{si}, \quad \text{dans } D_i\,; \qquad (I-2-6)$$

où $\overleftrightarrow{A}_{si}$, $\overleftrightarrow{g}_{si}$ et $\overleftrightarrow{G}_{si}$ représentent respectivement, les éléments de matrice dans Di des opérateurs $\overleftrightarrow{A}_{0i}$, $\overleftrightarrow{g}_{0i}$ et $\overleftrightarrow{G}_{0i}$.

On définit alors l'opérateur de réponse de surface $\overleftrightarrow{A}_s$ pour le système composite par une matrice formée des blocs diagonaux des $\overleftrightarrow{A}_{si}$, ($1 < i \leq N$) des sous - systèmes considérés.

De façon analogue, l'opérateur $\overleftrightarrow{h}_s$ pour le système composite est défini par une matrice formée des blocs indépendants $\overleftrightarrow{h}_{si}$ ($1 \leq i \leq N$) des sous - systèmes considérés.

Soit $\overleftrightarrow{g}_s$ la fonction réponse associée à $\overleftrightarrow{h}_s$; alors, dans l'espace de définition D du système composite, on a :

$$\overleftrightarrow{h}_s\,\overleftrightarrow{g}_s = \overleftrightarrow{I}\,; \quad \text{dans D.} \qquad (I-2-7)$$

On montre ainsi que :

$$\overleftrightarrow{g}_s\,(\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_s) = \overleftrightarrow{G}_s\,; \quad \text{dans D} \qquad (I-2-8)$$

où $\overleftrightarrow{G}_s$ est la fonction réponse de référence formée des parties tronquées des fonctions réponses des systèmes homogènes infinis.

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

$$\overleftrightarrow{h} = \overleftrightarrow{h}_s + \overleftrightarrow{V}_I\,; \quad \text{dans D.} \qquad (I-2-9)$$

La fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ associée à ce système composite est définie comme suit:

$$\overleftrightarrow{h}\,\overleftrightarrow{g} = \overleftrightarrow{I}, \quad \text{dans D.} \tag{I - 2 - 10}$$

A partir des équations ci - dessus, l'on obtient facilement :

$$\overleftrightarrow{g}\,(\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{V}_I\,\overleftrightarrow{g}_s) = \overleftrightarrow{g}_s; \quad \text{dans D.} \tag{I - 2 - 11}$$

En multipliant cette équation par la quantité $(\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}_s)$, on obtient l'équation universelle de la théorie de réponse d'interface

$$\overleftrightarrow{g}\,(\overleftrightarrow{I} + \overleftrightarrow{A}) = \overleftrightarrow{G}, \quad \text{dans D;} \tag{I - 2 - 12}$$

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

(I - 2 - 13)

et $\overleftrightarrow{G}_s \equiv \overleftrightarrow{G}$, dans D.

L'opérateur réponse d'interface $\overleftrightarrow{A}$ a des éléments non nuls seulement entre des points de l'espace d'interface M formé par l'ensemble des espaces d'interface M_i et des points de l'espace D.

Introduisons une matrice rectangulaire notée $\overleftrightarrow{A}$ (MD) (nous adopterons la même notation pour tous les autres opérateurs). L'équation (I - 2 - 12) peut être alors réécrite comme suit :

$$\overleftrightarrow{g}\,(DD) + \overleftrightarrow{g}\,(DM)\,\overleftrightarrow{A}\,(MD) = \overleftrightarrow{G}\,(DD); \quad \text{dans D.} \tag{1 - 2 - 14}$$

En particulier :

$$\overleftrightarrow{g}\,(DM)\,\overleftrightarrow{\Delta}\,(MM) = \overleftrightarrow{G}\,(DM), \quad \text{dans D,} \tag{I - 2 - 15}$$

avec $\overleftrightarrow{\Delta}\,(MM) = \overleftrightarrow{I}\,(MM) + \overleftrightarrow{A}\,(MM)$; dans M. (I - 2 - 16)

Alors, les éléments de $\overleftrightarrow{g}$ (DD) sont donnés par :

$$\overleftrightarrow{g}(DD) = \overleftrightarrow{G}(DD) - \overleftrightarrow{G}(MD)\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(MM)\overleftrightarrow{A}(MD); \quad \text{dans D.} \qquad (I-2-17)$$

A partir de l'équation (I - 2 - 17), l'unique connaissance de l'inverse de la fonction $\overleftrightarrow{\Delta}$ (MM) dans l'espace d'interface M, de l'opérateur réponse d'interface $\overleftrightarrow{A}$ (MD) et de la fonction réponse de référence $\overleftrightarrow{G}$ (DD) permet de calculer tout élément de la fonction réponse d'un système composite discret.

I - 2 - 2) Vecteurs propres d'un système composite [5]

La théorie des réponses d'interface exposée ci - dessus peut être appliquée à la détermination des vecteurs propres des systèmes composites, associés aux valeurs propres correspondantes.

Considérons un opérateur matriciel

$$\overleftrightarrow{h} = E\overleftrightarrow{I} - \overleftrightarrow{\mathcal{H}}, \quad \text{dans D,} \qquad (I-2-18)$$

défini pour un système composite dans l'espace D, où $\overleftrightarrow{\mathcal{H}}$ est l'hamiltonien du système composite et E ses valeurs propres. Soit $<u|$ le vecteur représentant la déformation du système lorsqu'il est soumis à une action $<F|$ telle que :

$$<u|\overleftrightarrow{h} = <F|, \quad \text{dans D.} \qquad (I-2-19)$$

Notons que la diagonalisation de l'équation (I - 2 - 19) fournit les valeurs propres E et les vecteurs propres correspondants $<u|$ lorsque l'action appliquée $<F|$ est nulle. Mais, si $<F|$ est non nulle, le calcul direct à partir de l'équation (I - 2 - 19) de ces grandeurs devient fastidieux car, $\overleftrightarrow{h}$ est en général une matrice énorme pour un système composite. Mais une méthode simple et générale pour résoudre ce problème a déjà été proposée. Nous en donnons ci-après, les grandes lignes.

En effet, connaissant la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ du système composite (voir équation I - 2 - 17) nous pouvons calculer ses déformations au moyen de l'équation (I - 2 - 10) et (I - 2 - 19) ; soit :

$$< u\,(D)\,| = < F\,(D)\,|\,\overleftrightarrow{g}\,(DD)\,;\ \text{dans D.} \qquad (I-2-20)$$

Multiplions les deux membres de l'équation (I - 2 - 17) par l'action $< F\,(D)\,|$. Nous obtenons :

$$< u\,(D)\,| = < U\,(D)\,| - < U\,(M)\,|\,\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}\,(MM)\,\overleftrightarrow{A}\,(MD)\,; \qquad (I-2-21)$$

où

$$< U\,(D)\,| = < F\,(D)\,|\,\overleftrightarrow{G}\,(DD) \qquad (I-2-22\ a)$$

et

$$< U\,(M)\,| = < F\,(D)\,|\,\overleftrightarrow{G}\,(DM). \qquad (I-2-22\ b)$$

$< U\,(D)\,|$ désigne la déformation du système de référence.
L'équation (I - 2 - 21) présente maints avantages :

- elle est utilisée pour la discussion des phénomènes de réflexion et de transmission à l'interface [3] ;

- elle permet le calcul non seulement de la déformation du système composite, mais aussi des vecteurs propres correspondant aux valeurs propres E de l'opérateur $\overleftrightarrow{h}$.

<u>**Remarques :**</u> Pour les systèmes composites finis, on tiendra compte du fait que toutes les valeurs propres sont données par :

$$\det \overleftrightarrow{\Delta}\,(MM) = 0. \qquad (I-2-23)$$

Ainsi pour éviter la divergence du facteur de normalisation du vecteur propre, nous devons multiplier le second membre de l'équation (I - 2 - 21) par ce déterminant et on obtient, au facteur de normalisation près :

$$< u\,(D)\,| \approx < U\,(M)\,|\,.\,[\,\det \overleftrightarrow{\Delta}\,(MM)\,]\,.\,\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}\,(MM).\,\overleftrightarrow{A}\,(MD)\,; \qquad \text{dans D.} \qquad (I-2-24)$$

Pour un système composite qui possède des sous - systèmes semi - infinis, cette équation peut être utilisée pour les valeurs propres données par (I - 2 - 23) (par exemple celles correspondant aux états localisés d'interface). Alors que l'équation

(I - 2 - 21) doit être utilisée lorsque les valeurs propres de ces sous - systèmes ne sont pas données par (I - 2 - 23).

I-2-3) Quelques équations utiles pour le passage aux systèmes composites continus

La théorie des réponses d'interface pour des systèmes continus a été établie [4] à partir de la théorie pour les systèmes discrets. Nous rappelons brièvement ici les équations nécessaires pour cette démarche.

En effet, lorsque l'opérateur de couplage $\vec{V_I}$ est nul, les équations (I-2-11), (I-2-12) et (I-2-13) permettent d'écrire, quel que soit i :

$$\overleftrightarrow{g_s}(D_i D_i) + \overleftrightarrow{g_s}(D_i\ M_i)\ \overleftrightarrow{A_s}(M_i\ D_i) = G_s(D_i D_i);\ \text{dans } D_i. \qquad (I\text{-}2\text{-}25)$$

Cette équation permet de calculer la fonction réponse $\overleftrightarrow{g_s}(D_i D_i)$ de tous les sous - systèmes indépendants avec surfaces libres. Elle permet aussi d'avoir les éléments de $\overleftrightarrow{g_{si}}$ dans le domaine M_i :

$$\overleftrightarrow{g_s}(M_i M_i) + \overleftrightarrow{g_s}(M_i\ M_i)\ \overleftrightarrow{A_s}(M_i M_i) = G_s(M_i M_i);\ \text{dans } M_i. \qquad (I-2-26)$$

Sachant que $\overleftrightarrow{g_s}(D_i\ D_i)$ est défini comme une matrice dont les éléments sont pris entre deux points $\vec{x}$ et $\vec{x}'$ appartenant à l'espace discret D_i, l'équation (I - 2 - 6) peut être écrite sous la forme :

$$\left.\begin{array}{l} g_{si}\,(\overleftrightarrow{x}, \overleftrightarrow{x'}) + \sum\limits_{\vec{x}''} g_{si}\,(\vec{x}, \vec{x}'')\, A_{si}\,(\vec{x}'', \vec{x}') = G_i\,(\vec{x}, \vec{x}'), \\ \\ \qquad\qquad\qquad \{\vec{x}, \vec{x}'\} \in D_i \ \text{ et } \vec{x}'' \in M_i . \end{array}\right] \qquad (I-2-27)$$

La multiplication de l'équation (I - 2 - 26) à gauche par $\overleftrightarrow{g}_s^{-1}(M_i M_i)$ et à droite par $\overleftrightarrow{G}^{-1}(M_i M_i)$ donne :

$$[\overleftrightarrow{I}(M_i M_i) + \overleftrightarrow{A}_s(M_i\ M_i)]\ \overleftrightarrow{G}^{-1}(M_i M_i) = \overleftrightarrow{g}_s^{-1}(M_i M_i)\ ; \quad \text{dans } M_i. \quad (I-2-28)$$

Pour n'importe quel système composite, les équations (I - 2 - 12), (I - 2 - 14), (I - 2 - 28) permettent d'obtenir :

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM) = \overleftrightarrow{g}_s^{-1}(MM) + \overleftrightarrow{V}_I(MM), \quad \text{dans } M\ ; \qquad (I-2-29)$$

où $\overleftrightarrow{g}_s^{-1}(MM)$ est la matrice formée des blocs diagonaux des $\overleftrightarrow{g}_s^{-1}(M_iM_i)$, $(1 \leq i \leq N)$,

définis par les équations (I - 2 - 28).

I - 2 - 4) <u>Systèmes composites continus</u> [4]

Dans la théorie des réponses d'interface d'un système composite continu, les variables $\vec{x}$ et $\vec{x}'$ (prises précédemment dans l'espace discret) sont continues. Ainsi, à l'opérateur $\overleftrightarrow{H}_{0i}\ (\vec{x}, \vec{x}')$ (dans le cas discret) correspond $\delta(\vec{x} - \vec{x}')\overleftrightarrow{H}_{0i}\ (\vec{x})$ (dans le cas continu) ; $\delta(\vec{x} - \vec{x}')$ est la fonction de Dirac et $\overleftrightarrow{H}_{0i}\ (\vec{x})$ est en général, un opérateur différentiel. D'où la version continue de l'équation (I - 2 - 1) :

$$\left.\begin{aligned} &\overleftrightarrow{H}_{0i}\ (\vec{x}).\ \overleftrightarrow{G}_{0i}\ (\vec{x}, \vec{x}') = \overleftrightarrow{I}\ \delta(\vec{x} - \vec{x}')\ ; \\ &\{\vec{x}, \vec{x}'\} \in D_\infty\ ; \end{aligned}\right] \qquad (I-2-30)$$

où $\overleftrightarrow{G}_{0i}\ (\vec{x}, \vec{x}')$ est une fonction de deux variables continues.

De façon analogue, on obtient la fonction réponse d'un système composite avec surfaces libres dans la théorie continue à partir de l'équation (I - 2 - 7). Soit :

$$\left.\begin{aligned} &\overleftrightarrow{h}_{si}\ (\vec{x})\ .\ \overleftrightarrow{g}_{si}\ (\vec{x}, \vec{x}') = \overleftrightarrow{I}\ \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \\ &\{\vec{x}, \vec{x}'\} \in D_i\ ; 1 \leq i \leq N \end{aligned}\right] \qquad (I-2-31)$$

L'opérateur de clivage $\overleftrightarrow{V}_{0i}(\vec{x}, \vec{x}')$ défini sous forme d'une matrice de blocs diagonaux est remplacé, dans la théorie continue, par $\delta(\vec{x}-\vec{x}')\ \overleftrightarrow{V}_{0i}(\vec{x})$ où $\overleftrightarrow{V}_{0i}(\vec{x})$ est, en général, un opérateur différentiel et $\vec{x} \in D_i$, $\vec{x}' \in M_i$.

Par conséquent, dans la théorie des milieux continus, l'opérateur $\overleftrightarrow{h}_s$ s'écrit :

$$\left.\begin{array}{l} \delta(\vec{x}-\vec{x}')\, \overleftrightarrow{h}_{si}(\vec{x}) = \delta(\vec{x}-\vec{x}')\, \overleftrightarrow{H}_{0i}(\vec{x}) + \delta(\vec{x}-\vec{x}'')\, \overleftrightarrow{V}_{0i}(\vec{x}), \\ \text{où} \qquad \{\vec{x}, \vec{x}'\} \in D_i \quad \text{et}\ \vec{x}'' \in M_i . \end{array}\right] \qquad (I-2-32)$$

Tandis que l'opérateur $\overleftrightarrow{A}_{si}$ correspond à

$$\left.\begin{array}{l} \overleftrightarrow{A}_{si}(\vec{x}, \vec{x}') = \overleftrightarrow{V}_{0i}(\vec{x}'')\, \overleftrightarrow{G}_{0i}(\vec{x}'', \vec{x}')\Big|_{(\vec{x}'' = \vec{x})} \\ \{\vec{x}', \vec{x}''\} \in D_i \ \text{et}\ \vec{x} \in M_i . \end{array}\right] \qquad (I-2-33)$$

Il est maintenant clair que l'équation (I - 2 - 27) de la théorie discrète de réponse d'interface devient, dans la théorie continue de réponse d'interface, une équation intégrale sur la surface M_i ; soit :

$$\left.\begin{array}{l} \overleftrightarrow{g}_{si}(\vec{x}, \vec{x}') + \int d\vec{x}''\, \overleftrightarrow{g}_{si}(\vec{x}, \vec{x}'')\, \overleftrightarrow{A}_{si}(\vec{x}'', \vec{x}') = \overleftrightarrow{G}_{0i}(\vec{x}, \vec{x}'); \\ \{\vec{x}, \vec{x}'\} \in D_i \ \text{et}\ \vec{x}'' \in M_i. \end{array}\right] \qquad (I-2-34)$$

Ainsi, la fonction réponse de volume $\overleftrightarrow{G}_{0i}(\vec{x}, \vec{x}')$ est donnée par l'équation (I - 2 - 30), et l'équation intégrale (I - 2 - 34) permet de calculer la fonction réponse de surface $\overleftrightarrow{g}_{si}$. En général, la solution de cette équation intégrale (I - 2 - 34) est obtenue par des méthodes numériques. Alors, on montre que [4] :

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}_{si}(M_i M_i) = \overleftrightarrow{\Delta}(M_i M_i)\, \overleftrightarrow{G}^{-1}_{0i}(M_i M_i)\ ; \quad \text{dans } M_i\ ; \qquad (I-2-35)$$

où $$\overleftrightarrow{\Delta}(M_i M_i) = \overleftrightarrow{I}(M_i M_i) + \overleftrightarrow{A}_{si}(M_i M_i)\ ; \quad \text{dans } M_i. \qquad (I-2-36)$$

Notons que, dans la théorie des systèmes continus, l'opérateur de couplage $\overleftrightarrow{V}_I$ est nul. Pour le passage des équations des systèmes discrets à celles des systèmes continus nous pouvons écrire, à l'aide de l'équation (I - 2 - 29) :

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM) = \overleftrightarrow{g}_s^{-1}(MM), \qquad \text{dans } M. \qquad (I - 2 - 37)$$

$\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM)$ peut être construit uniquement par une superposition des différents $\overleftrightarrow{g}_{si}^{-1}(M, M_i)$. En effet,

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(M_{ij}, M_{i'j'}) = \overleftrightarrow{0}, \qquad M_{i'j'} \notin M; \qquad (I - 2- 38\ a)$$

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(M_{ij} M_{ij'}) = \overleftrightarrow{g}_{si}^{-1}(M_{ij}, M_{ij'}), \qquad j \neq j'; \qquad (I - 2 - 38b)$$

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(M_{ij}, M_{ij}) = \sum_{i'} \overleftrightarrow{g}_{si'}^{-1}(M_{i'j'}, M_{i'j'}), \qquad M_{i'j'} \equiv M_{ij}. \qquad (I - 2 - 38c)$$

Notons qu' il est toujours possible de discrétiser [4] un système continu en prenant un nombre fini de points dans l'espace continu. La fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ peut être ainsi écrite sous la forme matricielle $\overleftrightarrow{g}$ (DD).

Introduisons alors une matrice $\overleftrightarrow{T}$ (MM) telle que [3]

$$\overleftrightarrow{g}(DD) = \overleftrightarrow{G}(DD) + \overleftrightarrow{G}(DM)\overleftrightarrow{T}(MM)\overleftrightarrow{G}(MD) \qquad (I - 2 - 39)$$

Dans l'espace d'interface, cette équation se met sous la forme

$$\overleftrightarrow{g}(MM) = \overleftrightarrow{G}(MM) + \overleftrightarrow{G}(MM)\overleftrightarrow{T}(MM)\overleftrightarrow{G}(MM) \qquad (I - 2 - 40)$$

Multipliant l'équation (I - 2 - 40), à droite et à gauche, par $\overleftrightarrow{G}^{-1}(MM)$ nous obtenons:

$$\overleftrightarrow{T}(MM) = \overleftrightarrow{G}^{-1}(MM) \left[\vec{g}(MM) - \overleftrightarrow{G}(MM) \right] \overleftrightarrow{G}^{-1}(MM). \qquad (I - 2 - 41)$$

$\overleftrightarrow{T}$ (MM) est appelé matrice de diffusion.

La substitution de (I - 2 - 41) dans (I - 2 - 39) donne :

$$\overleftrightarrow{g}\,(DD) = \overleftrightarrow{G}\,(DD) - \overleftrightarrow{G}\,(DM)\ \overleftrightarrow{G}^{-1}\,(MM)\,\overleftrightarrow{G}\,(MD)$$
$$+\,\overleftrightarrow{G}\,(DM)\,\overleftrightarrow{G}^{-1}(MM)\,\overleftrightarrow{g}\,(MM)\ \overleftrightarrow{G}^{-1}\,(MM)\ \overleftrightarrow{G}\,(MD). \qquad (I-2-42)$$

L'équation (I - 1 - 42) fournit le calcul de tous les éléments de $\overleftrightarrow{g}$ (DD) une fois $\overleftrightarrow{g}$ (MM) connu et ce, au moyen de l'une des équations du système (I- 2-38) ; tandis que les éléments de $\overleftrightarrow{G}$ (DD) sont définis par:

$$G\,(\vec{x},\vec{x}') = \begin{cases} G\,(\vec{x},\vec{x}')\,; & \{\vec{x}\,,\vec{x}'\} \in D_i \\ 0\,; & \vec{x} \in D_i \text{ et } \vec{x}' \in D_{i'}\,;\, i \neq i' \end{cases} \qquad (I-2-43)$$

I - 3) Milieu diélectrique infini et limité par la surface d'une boîte noire [6]

Un milieu diélectrique limité par la surface d'une boîte noire sera défini comme un milieu diélectrique limité par une surface parfaitement opaque [6] à travers laquelle le champ électromagnétique ne peut pas se propager. Quelques milieux diélectriques composites peuvent alors être construits par des pièces de ces différents diélectriques. Cette voie de construction de tels systèmes permet de calculer la fonction réponse correspondante.

Supposons que le système physique infini est traversé par une densité de courant $\vec{J}$ due au passage d'une particule chargée. Les équations de Maxwell régissant la propagation du champ électromagnétique dans le système s'écrivent :

$$c\,\vec{\nabla}\wedge\vec{H} = 4\,\pi\,c\,\vec{J} + \frac{\partial\vec{D}}{\partial t}\,; \qquad (I-3-1)$$

$$c\,\vec{\nabla}\wedge\vec{E} = -\,\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}\,; \qquad (I-3-2)$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide,

$\vec{E}$, le vecteur champ électrique,

$\vec{D}$, le vecteur déplacement électrique,

$\vec{H}$, le vecteur champ magnétique,

et $\vec{B}$, le vecteur induction magnétique.

Pour simplifier notre problème, nous supposerons que le milieu est non magnétique et poserons l'induction magnétique $\vec{B}$ égale au champ magnétique $\vec{H}$. Lorsque les effets de dispersion spatiale sont négligés, la relation linéaire générale entre les vecteurs déplacement électrique $\vec{D}(\vec{x}, t)$ et champ électrique macroscopique $\vec{E}(\vec{x}, t)$ dans le milieu est donnée par :

$$\vec{D}(\vec{x}, t) = \int dt' \, \varepsilon_i \, (t - t') \, \vec{E}(\vec{x}, t), \qquad \text{(I - 3 - 3)}$$

où ε_i $(t - t')$ est le tenseur diélectrique (3 x 3).

L'indice i désigne le milieu diélectrique considéré (cet indice sera nécessaire lorsque le système composite est formé de différents diélectriques).
Le tenseur diélectrique ε_i $(t - t')$ est une fonction de la différence de temps $t - t'$ car, nous supposons que l'hamiltonien pour le milieu diélectrique est indépendant du temps. En effet, ε_i (t) est identiquement nul pour $t < 0$.

Soit maintenant un milieu diélectrique semi-infini limité par la surface d'une boîte noire définie par $x_3 = f(x_1, x_2)$. Ceci peut être réalisé en supposant que la vitesse de la lumière c s'annule pour $x_3 < f(x_1, x_2)$ où x_1, x_2 et x_3 représentant les coordonnées spatiales. Dans ces conditions, nous pouvons récrire les équations de Maxwell pour ce diélectrique comme suit :

$$\theta\,[-f(x_1, x_2) + x_3]\left(c\vec{\nabla} \wedge \vec{H} - 4\pi c \vec{J}\right) - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = 0\ , \qquad \text{(I - 3 - 4)}$$

$$\theta\,[-f(x_1, x_2) + x_3]\, c\,\vec{\nabla} \wedge \vec{E} + \frac{\partial}{\partial t}\vec{H} = 0, \qquad \text{(I - 3 - 5)}$$

où $$\theta\,[-f(x_1, x_2) + x_3] = \begin{cases} 1, \text{ pour } x_3 \geq f(x_1, x_2) \\ \\ 0, \text{ pour } x_3 < f(x_1, x_2) \end{cases} \qquad \text{(I - 3 - 6)}$$

Eliminant $\vec{H}$ entre les équations (I - 3 - 4) et (I - 3 - 5), nous obtenons l'équation satisfaite par le champ électrique macroscopique $\vec{E}$. En effet, appliquons d'abord, vectoriellement, l'opérateur $\vec{\nabla}$ à l'équation (I - 3 - 5) ; nous obtenons :

$$\vec{\nabla}\theta[-f(x_1,x_2)+x_3]\wedge\vec{\nabla}\wedge\vec{E}+\theta[-f(x_1,x_2)+x_3]\,\vec{\nabla}\wedge\vec{\nabla}\wedge\vec{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\,\vec{\nabla}\wedge\vec{H}=0$$

(I - 3 - 7)

Dérivons ensuite, par rapport au temps, l'équation (I - 3- 4) ; on trouve :

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{\nabla}\wedge\vec{H}=4\pi\frac{\partial\vec{J}}{\partial t}+\theta[-f(x_1,x_2)+x_3]\,\frac{1}{c}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\,\vec{D}. \qquad (I-3-8)$$

Injectons enfin l'équation (I - 3 - 8) dans (I - 3 - 7) :

$$\vec{\nabla}\theta\,[-f(x_1,x_2)+x_3]\wedge\vec{\nabla}\wedge\vec{E}+\theta[-f(x_1,x_2)+x_3]\,\vec{\nabla}\wedge\vec{\nabla}\wedge\vec{E}$$
$$+\theta[-f(x_1,\ x_2)+x_3]\,\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{D}}{\partial t^2}=-\frac{4\pi}{c}\frac{\partial\vec{J}}{\partial t}\ . \qquad (I-2-9)$$

avec

$$\vec{\nabla}\theta\,[-f(x_1,x_2)+x_3]=-\delta[-f(x_1,x_2)+x_3]\,(\vec{i}\frac{\partial f}{\partial x_1}+\vec{j}\frac{\partial f}{\partial x_2}+\vec{k}\frac{\partial f}{\partial x_3})$$

ou encore

$$\vec{\nabla}\theta\,[-f(x_1,x_2)+x_3]=\ -\delta[-f(x_1,x_2)+x_3]\begin{bmatrix}\frac{\partial f}{\partial x_1}\\ \frac{\partial f}{\partial x_2}\\ 1\end{bmatrix}. \qquad (I-3-10)$$

$\vec{i}$, $\vec{j}$ et $\vec{k}$ représentent les vecteurs unitaires de base suivant x_1, x_2 et x_3 respectivement. Ainsi, l'utilisation du résultat (I-3-10) permet d'avoir :

$$\vec{\nabla}\,\theta[-f(x_1,x_2)+x_3]\wedge\vec{\nabla}\wedge\vec{E}=-\delta[-f(x_1,x_2)+x_3]\begin{bmatrix}\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}\\ \frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}\\ 1\end{bmatrix}\wedge\begin{bmatrix}\frac{\partial E_3}{\partial x_2}-\frac{\partial E_2}{\partial x_3}\\ \frac{\partial E_1}{\partial x_3}-\frac{\partial E_3}{\partial x_1}\\ \frac{\partial E_2}{\partial x_1}-\frac{\partial E_1}{\partial x_2}\end{bmatrix}$$

(I - 3 - 11)

En développant ce produit vectoriel, nous pouvons reécrire l'équation (I - 3 - 11) sous la forme suivante :

$$\vec{\nabla}\,\theta\,[\,-f\,(x_1,x_2)+x_3\,]\wedge\vec{\nabla}\wedge\vec{E}\;=\;-\,\delta\,[\,-f\,(x_1,x_2)+x_3]\;\overleftrightarrow{V}_i\,(\vec{x})\,\vec{E}. \qquad (I-3-12)$$

L'équation (I - 3 - 9) devient alors :

$$\theta\,[\,-f\,(x_1,x_2)+x_3\,]\left(\vec{\nabla}\wedge\vec{\nabla}\wedge\vec{E}+\frac{1}{c^2}\,\frac{\partial^2\vec{D}}{\partial t^2}\right)$$
$$-\,\delta\,[\,-f\,(x_1,x_2)+x_3\,]\;\overleftrightarrow{V}_i\,(\vec{x})\,\vec{E}=-\frac{4\pi}{c}\,\frac{\partial}{\partial t}\,\vec{J}; \qquad (I-3-13)$$

où $\overleftrightarrow{V}_i\,(\vec{x})$, appelé opérateur de clivage de la boîte noire, est défini comme une matrice (3 x 3). Il dépend du diélectrique i seulement par la forme de la surface de cette boîte noire. Notons que $\overleftrightarrow{V}_i\,(\vec{x})$ est de signe opposé, si on considère (dans l'espace infini) le diélectrique complémentaire.

A présent, l'opérateur $\overleftrightarrow{V}_i\,(\vec{x})$ s'exprime par :

$$\overleftrightarrow{V}_i\,(\vec{x})=$$

$$=\begin{bmatrix} -\dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}\,\dfrac{\partial}{\partial x_2}+\dfrac{\partial}{\partial x_3} & \dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}\,\dfrac{\partial}{\partial x_1} & -\dfrac{\partial}{\partial x_1} \\[2ex] \dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}\,\dfrac{\partial}{\partial x_2} & -\dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}\,\dfrac{\partial}{\partial x_1}+\dfrac{\partial}{\partial x_3} & -\dfrac{\partial}{\partial x_2} \\[2ex] \dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}\,\dfrac{\partial}{\partial x_3} & \dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}\,\dfrac{\partial}{\partial x_3} & -\dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1}\,\dfrac{\partial}{\partial x_1}-\dfrac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2}\,\dfrac{\partial}{\partial x_2} \end{bmatrix}$$

I - 3 - 14)

Les transformées de Fourier de $\vec{E}\,(\vec{x},t)$, $\vec{H}\,(\vec{x},t)$, et $\mathcal{E}_i\,(t-t')$ sont respectivement :

$$\vec{E}\;(\vec{x},t)=\frac{1}{2\pi}\int d\omega\,\vec{E}\;(\vec{x}/\omega)\,e^{i\omega t}\;, \qquad (I-3-15\,a)$$

$$\vec{H}\;(\vec{x},t)=\frac{1}{2\pi}\int d\omega\,\vec{H}\;(\vec{x}/\omega)\,e^{i\omega t}\;, \qquad (I-3-15\,b)$$

$$\vec{J}(\vec{x}, t) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \, \vec{J}(\vec{x}/\omega)\, e^{i\omega t} \quad , \qquad \text{(I - 3 - 15 c)}$$

$$\mathcal{E}_i (t - t') = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \, \mathcal{E}_i (\omega)\, e^{i\omega t\,(t - t')} . \qquad \text{(I - 3 - 15 d)}$$

Injectant les équations (I - 3 - 15) dans l'équation (I - 3 - 13), nous obtenons :

$$\theta [- f (x_1, x_2) + x_3] \left[\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_i \; (\omega) - \overleftrightarrow{H}^{\circ} (\vec{x})\right] \vec{E}(\vec{x}/\omega)$$

$$+ \; \delta [- f (x_1, x_2) + x_3] \; \overleftrightarrow{V}_i \; (\vec{x}) \vec{E} (\vec{x}/\omega) = - \frac{4\pi \, i\omega}{c} \; \vec{J} \; (\vec{x}/\omega), \qquad \text{(I - 3 - 16)}$$

$$\text{où} \quad \overleftrightarrow{H}^{\circ}(\vec{x}) = \sum_{\alpha,\beta} \overleftrightarrow{H}^{\circ}{}_{\alpha\beta} (\vec{x}) = \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \, \partial x_\beta} - \delta_{\alpha\beta} \nabla^2 \text{, pour } \alpha , \beta = 1, 2; 3. \qquad \text{(I -3 - 17)}$$

Définissons maintenant les fonctions réponses $\overleftrightarrow{G}_i \, (\omega/\vec{x}, \vec{x}')$ et $\overleftrightarrow{g}_{si} \, (\omega/\vec{x}, \vec{x}')$ pour, respectivement, le milieu diélectrique infini i et le même milieu mais limité par la surface de la boîte noire telles que:

$$\left[\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_i (\omega) - \overleftrightarrow{H}^{\circ} \; (\vec{x}) \right] \overleftrightarrow{G}_i \; (\omega/\vec{x}, \vec{x}') = \overleftrightarrow{I} \; \delta (\vec{x} - \vec{x}'), \qquad \text{(I - 3 - 18)}$$

$$\theta [- f (x_1, x_2) + x_3)] \; \left[\frac{\omega^2}{c^2} \; \varepsilon_i \; (\omega) - \overleftrightarrow{H}^{\circ} (\vec{x}) \right] \overleftrightarrow{g}_{si} \; (\omega/ \vec{x}, \vec{x}')$$

$$+ \, \delta [- f (x_1, x_2) + x_3] \, \overleftrightarrow{V}_i \; (\vec{x}) \, \overleftrightarrow{g}_{si} \; (\omega/ \vec{x}, \vec{x}') = \overleftrightarrow{I} \; \delta (\vec{x} - \vec{x}'), \qquad \text{(I - 3 - 19)}$$

où $\overleftrightarrow{I}$ est la matrice unité (3 x 3).

Rappelons que la théorie de réponse d'interface des milieux continus fournit la relation entre les fonctions réponses introduites ci-dessus conformément à l'équation (I - 2 - 34). Mais dans ce cas D_i représente l'espace tri-dimensionnel pour lequel $x_3 \geq f \; (x_1, x_2)$ et M_i est l'espace de surface définie par $x_3 = f \, (x_1, x_2)$.

I - 4) Cas d'un diélectrique quelconque [6]

Rappelons que n'importe quel milieu diélectrique composite peut être construit en assemblant des pièces indépendantes de milieux diélectriques limités par les surfaces d'une boîte noire. La fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ correspondante se calcule au moyen de l'équation (I - 2 - 42) donnée précédemment une fois que tous les éléments de la matrice $\overleftrightarrow{g}^{-1}$ (MM) [inverse de la matrice $\overleftrightarrow{g}$ (MM)] et ceux de $\overleftrightarrow{G}$ sont connus.

Précisons que les nouveaux états localisés aux interfaces M, pour n'importe quel diélectrique composite, sont donnés par:

$$\det\left[\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM)\right] = 0, \qquad \text{(I - 4 - 1)}$$

et la variation de la densité d'états $\Delta n(\omega^2)$ entre le matériau composite réel et le système de référence construit de N différents matériaux de volume (décrit par le bloc diagonal de la fonction réponse de volume $\overleftrightarrow{G}$ donnée par l'équation (I - 2 - 43), s'exprime comme suit:

$$\Delta n(\omega^2) = \frac{1}{\pi}\frac{d\eta(\omega^2)}{d\omega^2} + \frac{1}{\pi}\sum_{i=1}^{N} \operatorname{Im}\operatorname{Tr}\left[\overleftrightarrow{G}_i(D_i M_i)\,\overleftrightarrow{G}_i^{-1}(M_i M_i)\,\overleftrightarrow{G}_i(M_i D_i)\right], \qquad \text{(I - 4 - 2)}$$

où $\eta(\omega^2) = -\arg\det\left[\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM)\right]$; (I - 4 - 3)

Par ailleurs, soient $|u(D)>$ et $|U(D)>$ appelés respectivement vecteur de déformation du système composite réel et vecteur de déformation du système de référence. On montre que [5] :

$$|u(D)> = |U(D)> - \overleftrightarrow{G}(DM)\,\overleftrightarrow{G}^{-1}(MM)\,|U(M)> + \overleftrightarrow{G}(DM)\,\overleftrightarrow{G}^{-1}(MM)\,\overleftrightarrow{g}(MM) \times \overleftrightarrow{G}^{-1}(MM)\,|U(M)>. \qquad \text{(I - 4 - 4)}$$

C'est juste le troisième terme de cette expression qui est nécessaire pour obtenir les vecteurs propres non normalisés correspondant aux valeurs propres données par :

$$\det[\overleftrightarrow{g}(MM)]^{-1} = 0, \quad \text{(I-4-5)}$$

soit,

$$|u(D)> \alpha\ \overleftrightarrow{G}(DM)\ \overleftrightarrow{G}^{-1}(MM) \det[\overleftrightarrow{g}(MM)]^{-1} \overleftrightarrow{g}(MM)\ \overleftrightarrow{G}^{-1}(MM)\ |\ U(M)>.$$

(I - 4 -6)

Notons que toutes les valeurs propres d'un système fini ainsi que les valeurs propres des modes localisés à l'interface d'un système composite sont données par l'équation (I - 4 - 5).

I-5) Equations de base pour des couches diélectriques isotropes composites [6]

Un cas particulier important de l'analyse présentée ci - dessus est celui des couches diélectriques composites isotropes. L'isotropie de chaque sous-couche fournit :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_i(\omega)\ \overleftrightarrow{I}\ ; i = 1, 2, 3, \ldots\ldots\ldots, N. \quad \text{(I-5-1)}$$

Comme nous le verrons dans les chapitres suivants, la forme de la fonction diélectrique $\varepsilon_i(\omega)$ dépend des quasi-particules étudiées.

Supposons que les plans des interfaces sont perpendiculaires à l'axe x_3. Ce qui permet de faire l'analyse de Fourier de tous les opérateurs ci - dessus ; par exemple :

$$\overleftrightarrow{g}(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2 \vec{k}_{//}\ \overleftrightarrow{g}(\vec{k}_{//} / x_3, x'_3)\, e^{i\vec{k}_{//}(\vec{x}_{//} - \vec{x}'_{//})}$$

où $\vec{k}_{//}$ et $\vec{x}_{//}$ sont respectivement les vecteurs de propagation et de position dans l'espace réel, parallèles à l'interface.

Les équations (I - 3 - 15) restent inchangées pour ces coefficients de Fourier. Cette transformation permet d'obtenir de simples expressions pour ces coefficients de Fourier; en particulier des équations (I-3-15) et (I-3-17), on trouve $\overleftrightarrow{H}^{\circ}(\vec{k}_{//} / x_3)$, transformée de Fourier de $\overleftrightarrow{H}^{\circ}(\vec{x})$:

$$\overleftrightarrow{H}^{\circ}(\overrightarrow{k_{//}}\,/\,x_3) = \begin{bmatrix} k_2^2 - \dfrac{\partial^2}{\partial x_3^2} & -k_1\,k_2 & ik_1\,\dfrac{\partial}{\partial x_3} \\ -k_1\,k_2 & k_1^2 - \dfrac{\partial^2}{\partial x_3^2} & ik_2\,\dfrac{\partial}{\partial x_3} \\ ik_1\,\dfrac{\partial}{\partial x_3} & ik_2\,\dfrac{\partial}{\partial x_3} & k_{//}^2 \end{bmatrix} \quad . \qquad \text{(I - 5 - 2)}$$

En prenant notre surface en un point $x_3 = f(x_1, x_2) = 0$, la matrice (I - 3 - 14) devient :

$$\overleftrightarrow{V_i}\;(\overrightarrow{x}) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x_3} & 0 & \dfrac{\partial}{\partial x_1} \\ 0 & \partial/\partial x_3 & \dfrac{\partial}{\partial x_2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} . \qquad \text{(I - 5 - 3)}$$

De l'application de cet opérateur sur $\overleftrightarrow{g_{si}}(\omega\,/\overrightarrow{x}, \overrightarrow{x'})$ résulte aisément l'opérateur $\overleftrightarrow{V}\,(\overrightarrow{k_{//}}\,/\,x_3)$, transformé de Fourier de $\overleftrightarrow{V}_i\;(\overrightarrow{x})$:

$$\overleftrightarrow{V_i}(\overrightarrow{k_{//}}\,/\,x_3) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial}{\partial x_2} & 0 & -ik_1 \\ 0 & \dfrac{\partial}{\partial x_3} & -ik_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad . \qquad \text{(I - 5 - 4)}$$

Il est maintenant utile de profiter de l'isotropie de notre système dans le plan $\{x_1, x_2\}$ en multipliant à gauche et à droite, les opérateurs $\overleftrightarrow{H}^{\circ}\;(\overrightarrow{k_{//}}\,/\,x_3)$ et $\overleftrightarrow{V_i}\;(\overrightarrow{k_{//}}\,/\,x_3)$ par les matrices $\overleftrightarrow{S}\;(k_{//})$ et $\overleftrightarrow{S}^{-1}\,(k_{//})$ respectivement. Cela fait apparaître les produits suivants :

$$\overleftrightarrow{S}\;(k_{//})\,.\,\overleftrightarrow{H}^{\circ}\,(\overrightarrow{k_{//}}\,/\,x_3)\,.\,\overleftrightarrow{S}^{-1}\,(k_{//}) \text{ et } \overleftrightarrow{S}\;(k_{//})\,.\;\overleftrightarrow{V_i}\;(\overrightarrow{k_{//}}\,/\,x_3).\overleftrightarrow{S}^{-1}\,(k_{//})$$

Notons que $\overleftrightarrow{S}\;(k_{//})$ et son inverse s'obtiennent à partir de la matrice rotation $\overleftrightarrow{S}\,(\theta)$ donnée par :

$$\overleftrightarrow{S}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \text{(I - 5 - 5)}$$

D'où

$$\overleftrightarrow{S}(k_{//}) = \frac{1}{k_{//}} \begin{bmatrix} k_1 & k_2 & 0 \\ -k_2 & k_1 & 0 \\ 0 & 0 & k_{//} \end{bmatrix} \qquad \text{(I - 5 - 6)}$$

et

$$\overleftrightarrow{S}^{-1}(k_{//}) = \frac{1}{k_{//}} \begin{bmatrix} k_1 & -k_2 & 0 \\ k_2 & k_1 & 0 \\ 0 & 0 & k_{//} \end{bmatrix} . \qquad \text{(I-5-7)}$$

Les produits introduits ci-dessus permettent d'avoir respectivement (nous écrivons désormais la dépendance des opérateurs avec $k_{//}$ au lieu de $\vec{k}_{//}$)

$$\overleftrightarrow{H}^{\circ}(k_{//}/x_3) = \begin{bmatrix} -\dfrac{\partial^2}{\partial x_3^2} & 0 & ik_{//}\dfrac{\partial}{\partial x_3} \\ 0 & k_{//}^2 - \dfrac{\partial^2}{\partial x_3^2} & 0 \\ ik_{//}\dfrac{\partial}{\partial x_3} & 0 & k_{//}^2 \end{bmatrix} , \qquad \text{(I-5-8)}$$

$$\overleftrightarrow{V}_i (k_{//} / x_3) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_3} & 0 & -ik_{//} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \text{pour } x_3 \geq o. \qquad \text{(I-5-9)}$$

Ces opérateurs dépendent maintenant seulement de la magnitude $k_{//}$ du vecteur de propagation (plutôt que de k_1 et k_2 comme dans les équations (I-4-2) et (I-5-3)).

Finalement, les équations (I-3-18) et (I-3-19) deviennent :

$$[\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_i(\omega) \overleftrightarrow{I} - \overleftrightarrow{H}^{\circ} (k_{//}/x_3)] \overleftrightarrow{G}_i (k_{//}, \omega / x_3, x'_3) = \overleftrightarrow{I} \delta (x_3 - x'_3), \qquad \text{(I-5-10)}$$

et

$$\{ (\theta (x_3) [\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_i(\omega) \overleftrightarrow{I} - \overleftrightarrow{H}^{\circ}(k_{//}/x_3)] + \delta (x_3) \overleftrightarrow{V}_i (k_{//} / x_3) \} \overleftrightarrow{g}_{si} (k_{//}, \omega / x_3, x'_3)$$
$$= I \delta (x_3 - x'_3). \qquad \text{(I-5-11)}$$

La détermination des éléments de matrice de $\overleftrightarrow{G}_i$ est grandement simplifiée par le fait que $(G_i)_{21}$ et $(G_i)_{23}$ satisfont aux équations homogènes, tandis que $(G_i)_{12}$ et $(G_i)_{32}$ satisfont à une paire d'équations homogènes couplées. Par conséquent, ces quatre éléments de matrice disparaissent dans $\overleftrightarrow{G}_i$. Il en est de même pour $(g_{si})_{21}$, $(g_{si})_{23}$, $(g_{si})_{12}$ et $(g_{si})_{32}$ dans $\overleftrightarrow{g}_{si}$ [2,7], et les éléments de la matrice carrée (2 x 2) se découplent des autres. L'équation (I-5-10) devient :

$$[\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_i(\omega) - k_{//}^2 + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}] (G_i)_{22} = \delta (x_3 - x'_3), \qquad \text{(I-5-12 a)}$$

et

$$\begin{bmatrix} \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_i(\omega) + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} & -ik_{//}\frac{\partial}{\partial x_3} \\ -ik_{//}\frac{\partial}{\partial x_3} & \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_i(\omega) - k_{//}^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} (G_i)_{11} & (G_i)_{13} \\ (G_i)_{31} & (G_i)_{33} \end{bmatrix} = \overleftrightarrow{I}\,\delta(x_3 - x'_3), \tag{I-5-12 b}$$

où $\overleftrightarrow{I}$ est la matrice unité (2 x 2).
Le même découplage apparaît aussi dans l'équation (I-5-11). Soit,

$$\left[\theta(x_3)\left(\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_i(\omega) - k_{//}^2 + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right) + \delta(x_3)\frac{\partial}{\partial x_3}\right](g_{si})_{22} = \delta(x_3 - x'_3); \tag{I-5-12a'}$$

et

$$\begin{bmatrix} \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_i(\omega) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \delta(x_3)\frac{\partial}{\partial x_3} & -ik_{//}\frac{\partial}{\partial x_3} - ik_{//}\,\delta(x_3) \\ -ik_{//}\frac{\partial}{\partial x_3} & \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_i(\omega) - k_{//}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (g_{si})_{11} & (g_{si})_{13} \\ (g_{si})_{31} & (g_{si})_{33} \end{bmatrix}$$

$$= \overleftrightarrow{I}\,\delta(x_3 - x'_3). \tag{I-5-12b'}$$

De l'équation (I-5-12b), nous voyons que $(G_i)_{31}$ et $(G_i)_{33}$ peuvent être obtenus respectivement en fonction de $(G_i)_{11}$ et de $(G_i)_{13}$. De façon analogue, les relations suivantes existent entre les mêmes éléments de $\overleftrightarrow{g}$:

$$g_{31}(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = -\frac{ik_{//}}{\alpha_i^2}\frac{\partial}{\partial x_3}g_{11}(k_{//},\omega/x_3,x'_3)\,; \qquad x_3 \in D_i \tag{I-5-13}$$

$$g_{33}(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = -\frac{1}{\alpha_i^2}\left\{\delta(x_3,x'_3) + ik_{//}\frac{\partial}{\partial x_3}g_{13}(k_{//},\omega/x_3,x'_3)\right\}, \quad x_3 \in D_i\,; \tag{I-5-14}$$

où $\alpha_i (k_{//}, \omega) = [k_{//}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_i(\omega)]^{1/2}$. (I-5-15)

Les équations (I-5-13) et (I-5-14) se conservent pour les éléments de matrice correspondants de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}_{si}$ d'un diélectrique limité par une surface de boîte noire; il en est de même pour la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ de n'importe quelle couche de matériau composite, pourvu que x_3 reste dans la couche i, comme $\overleftrightarrow{g}$ satisfait à l'équation (I-4-12b) pour $x_3 \in D_i$.

Par conséquent, nous pouvons considérer dans ce qui suit, g_{11} et g_{22} comme éléments principaux de $\overleftrightarrow{g}$ et g_{31} et g_{33} comme éléments dérivés grâce aux équations (I-5-13) et (I-5-14). L'équation (I-5-11), lorsqu'on utilise les relations générales (I-5-13) et (I-5-14), peut se reécrire comme trois équations indépendantes pour les éléments 22, 11 et 13 de $\overleftrightarrow{g}_{si}$, à savoir :

$$[\theta (x_3) (\frac{\partial^2}{\partial x_3^2} - \alpha_i^2) + \delta (x_3) \frac{\partial}{\partial x_3}] (g_{si})_{22} = \delta (x_3 - x'_3), \quad \text{(I-5-16)}$$

$$- \frac{\omega^2 \varepsilon_i (\omega)}{\alpha_i^2 c^2} [\theta (x_3) (\frac{\partial^2}{\partial x_3^2} - \alpha_i^2) + \delta (x_3) \frac{\partial}{\partial x_3}] (g_{si})_{11} = \delta (x_3 - x'_3), \quad \text{(I-5-17)}$$

et

$$- \frac{i\omega^2}{k_{//} c^2} \theta (x_3) (\frac{\partial^2}{\partial x_3^2} - \alpha_i^2) (g_{si})_{13} - \delta(x_3) [\delta (x_3 - x'_3) + \frac{i\omega^2}{k_{//} c^2} \varepsilon_i (\omega) \frac{\partial}{\partial x_3} (g_{si})_{13}] = \frac{\partial}{\partial x_3} \delta (x_3 - x'_3). \quad \text{(I-5-18)}$$

Comparant les équations (I-5-17) et (I-5-18), on voit que :

$$(g_{si})_{13} (k_{//}, \omega / x_3, x'_3) = \frac{ik_{//}}{\alpha_i^2} \frac{\partial}{\partial x'_3} (g_{si})_{11} (k_{//}, \omega / x_3, x'_3) ; \quad x'_3 \in D_i. \quad \text{(I-5-19)}$$

La relation (I-5-19) est une composante ou élément unique, de même que les équations (I-5-13) et (I-5-14) et elle se conserve pour le g_{13}:

$$g_{13}\ (k_{//},\omega/x_3,x'_3) = \frac{ik_{//}}{\alpha_{i'}^2}\frac{\partial}{\partial x'_3}\, g_{11}\ (k_{//},\omega/x_3,x'_3); \qquad x'_3 \in D_{i'}, \qquad \text{(I-5-20)}$$

et $\alpha_{i'}$ prend la valeur donnée par l'équation (1-5-15) à l'intérieur du domaine $D_{i'}$.

L'examen des équations (I-5-16), (I-5-17) et (I-5-18) montre qu'elles sont toutes trois isomorphes à la même équation de base :

$$\frac{F_i}{\alpha_i}\left[\theta\,(x_3)\ (-\alpha_i^2 + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}) + \delta\,(x_3)\frac{\partial}{\partial x_3}\right] g_{si}\,(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = \delta\,(x_3 - x'_3)\,. \qquad \text{(I-5-21)}$$

où

$$F_i = \alpha_i, \qquad \text{pour } g_{22}; \qquad \text{(1-5-22)}$$

$$F_i = -\frac{\omega^2}{c^2}\frac{\varepsilon_i\,(\omega)}{\alpha_i}, \qquad \text{pour } g_{11}. \qquad \text{(I-5-23)}$$

Ainsi, en partant de l'équation (I-5-21) nous pouvons déterminer les éléments de base de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$. En effet, à l'aide des relations (I-5-22) et (I-5-23), nous obtenons g_{22} et g_{11}. Les éléments g_{31}, g_{33} et g_{13} sont alors construits au moyen des relations (I-5-13), (I-5-14) et (I-5-20).

La fonction réponse de volume $\overleftrightarrow{G_i}$ d'un diélectrique homogène infini est donnée par [2,7]

$$G_i\ (k_{//},\omega/x_3,x'_3) = -\frac{e^{-\alpha_i |x_3 - x'_3|}}{2F_i} \qquad \text{(I-5-24)}$$

Remplaçant maintenant dans l'équation (I-5-24) F_i par les valeurs données par les équations (I-5-22) - (I-5-23) et utilisant les équations (I-5-13) - (I-5-14) et (I-5-20), nous obtenons les composantes de la fonction réponse de volume complète $\overleftrightarrow{G}\ (k_{//},\omega/x_3,x'_3)$:

$$G_{22}(k_{//},\ \omega/x_3, x'_3) = -\frac{e^{-\alpha_i|x_3-x'_3|}}{2\alpha_i}, \tag{I-5-25}$$

$$G_{11}(k_{//}, \omega/x_3\, x'_3) = \frac{c^2 \alpha_i}{2\omega^2\, \varepsilon_i(\omega)}\ e^{-\alpha_i|x_3-x'_3|}, \tag{I-5-26}$$

$$G_{13}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{i\, c^2 k_{//}}{2\omega^2\varepsilon_i(\omega)}\ \mathrm{sgn}\,(x_3 - x'_3)\ e^{-\alpha_i|x_3-x'_3|}, \tag{I-5-27}$$

$$G_{31}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{i\, c^2 k_{//}}{2\omega^2\varepsilon_i(\omega)}\ \mathrm{sgn}\,(x_3 - x'_3)\ e^{-\alpha_i|x_3-x'_3|}, \tag{I-5-28}$$

$$G_{33}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{c^2}{\omega^2\varepsilon_i(\omega)}\ \delta\,(x_3 - x'_3) - \frac{c^2 k^2_{//}}{2\alpha_i\, \omega^2\varepsilon_i(\omega)}\ e^{-\alpha_i|x_3-x'_3|}. \tag{I-5-29}$$

I-6 Conclusion

Pour plus de détails sur la théorie exposée dans ce chapitre, le lecteur pourra consulter les articles de revue [8-10].

En physique, l'on utilise tantôt un langage mathématique discret, tantôt continu selon que les variables d'espace utilisées sont discrètes ou continues. Dans l'un ou l'autre des cas, le fondement de base demeure la détermination des fonctions réponses des systèmes étudiés.

Ainsi, cette théorie nous a permis de construire l'expression générale de base (I-2-42) de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ qui, à son tour, recèle toutes les informations sur le système étudié.

Comme nous l'avons montré, la théorie des réponses d'interfaces est aussi applicable au calcul des vecteurs propres des systèmes composites. Au moyen de la théorie électromagnétique de Maxwell, nous avons pu bâtir des équations permettant de calculer tous les éléments de cette fonction réponse dont la connaissance permet d'avoir accès aux densités d'états.

Ces résultats seront largement utilisés pour la détermination analytique des fonctions réponse des différents matériaux diélectriques composites étudiés dans les chapitres qui suivent.

Bibliographie du chapitre I

[1] **F. Garcia-Moliner and J. Rubio,** J. Phys. C2, (1969)1789; Proc. R. Soc. London, Ser. A 234, (1971)257.

[2] **M.G. Cottam and A.A. Maradudin,** in : "Surface Excitations", Vol. 9 of Modern Problems in Condensed Matter Sciences (North-Holland, Amsterdam, 1986).

[3] **L. Dobrzynski,** Surf. Sci. Reports, 6 (1986)119; Surf. Sci., 175 (1987) 1.

[4] **L. Dobrzynski,** Surf. Sci., 180 (1987)489.

[5] **L. Dobrzynski and H. Puszkarski,** J. of Phys. : Condens. Matter, 1(1989)1239;

[6] **L. Dobrzynski,** Surf. Sci., 180 (1987)505.

[7] **A.A. Maradudin and D.L. Mills,** Phys. Rev. B11(1975)1392.

[8] **L. Dobrzynski,** Surf. Sci., Rep. 11(1990)139.

[9] **A. Akjouj, B. Sylla et L. Dobrzynski,** Annales de Physique,18 (1993)363-448.

[10] **M. L. Bah, A. Akjouj and L. Dobrzynski,** Surf. Sci. Rep., 16 (1992) 59.

Chapitre II

CHAPITRE II

POLARITONS DANS QUELQUES SYSTEMES COMPOSITES SIMPLES

II-1) Introduction

Il est maintenant bien connu que l'excitation de tout dipôle électrique dans un solide peut se coupler linéairement au champ électromagnétique dans le solide et produire des modes d'excitation du système appelés polaritons [1-3].

Notons que l'existence de tels phénomènes a été prédite la première fois en 1951 par Huang pour les cristaux ioniques cubiques du type NaCl.

C'est seulement en 1954 que la théorie des polaritons fut résumée par Born et Huang [4] dans leurs travaux sur les dynamiques du réseau. Et dès 1965, Henry et Hopfield [5] entreprirent des expériences pour la mise en évidence de l'existence des polaritons.

Dans le présent chapitre, nous nous intéressons à l'étude de ces polaritons dans quelques systèmes composites diélectriques comportant une ou deux interfaces: diélectrique semi-infini avec surface libre, lame mince, interface entre deux diélectriques semi-infinis, film mince inséré entre deux diélectriques semi-infinis [6-10]. Nous supposerons que les plans d'interfaces sont perpendiculaires à l'axe des systèmes.

Ainsi, au moyen de la théorie de réponse d'interface exposée précédemment, nous construirons les fonctions réponses associées à nos systèmes composites. Nous en déduirons les relations de dispersion maintenant bien connues, qui nous permettent d'avoir les courbes de dispersion, les modes de polaritons d'interface et d'apprécier les modes de polaritons localisés dans le système " sandwich ".

Pour obtenir les expressions analytiques de ces fonctions réponses, nous établirons les fonctions réponses dans l'espace plus restreint des interfaces avant d'étendre le calcul à l'espace complet. Dans le dernier paragraphe de ce chapitre, nous donnons des applications numériques dont les résultats sont illustrés par des courbes (courbes de dispersion, polaritons d'interface, polaritons localisés— dans le cas du "sandwich").

II-2) Milieu diélectrique semi-infini

Considérons un milieu diélectrique limité par une surface parfaite telle que $x_3 = 0$. Celui-ci est obtenu en coupant un milieu diélectrique homogène infini au moyen de l'opérateur de clivage $\overleftrightarrow{V}_i$. Nous pouvons ainsi distinguer les deux cas de figures suivants (fig. II-1) :

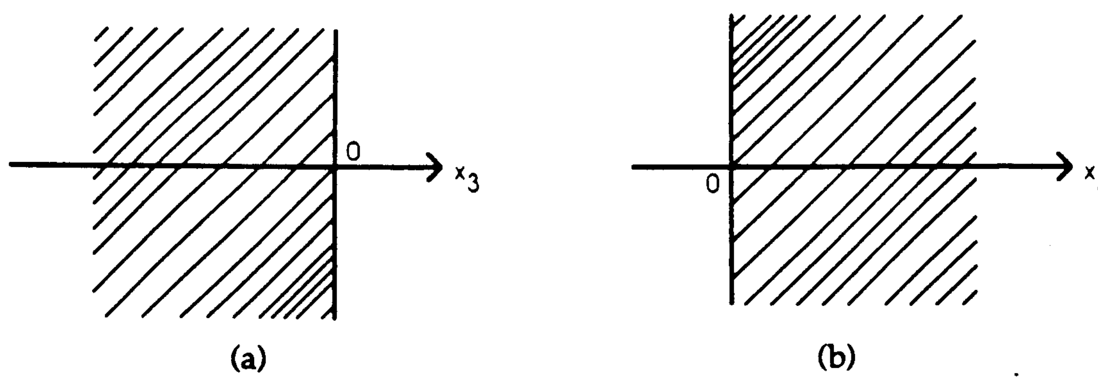


Figure. II-1 : ***Milieu diélectrique semi-infini***
(a) *situé dans l'espace* D_i *tel que* $x_3 \leq 0$;
(b) *situé dans l'espace* D_i *tel que* $x_3 \geq 0$.

II-2-1) Fonctions réponses

Les résultats du chapitre précédent permettent d'exprimer l'opérateur réponse de surface $\overleftrightarrow{A}_{si}$ comme suit:

$$A_{si}\,(x_3,x'_3) = \frac{F_i}{\alpha_i}\,\frac{\partial}{\partial x''_3}\,G_i\,(k_{//},\omega/x''_3,x'_3)\Big|_{x''_3 = x_3}. \qquad \text{(II-2-1)}$$

Substituant $G_i\,(k_{//},\omega/x''_3,x'_3)$ par son équivalent (donné par (I-5-24)) dans (II-2-1), nous trouvons :

$$A_{si}\,(x_3,x'_3) = -\frac{1}{2}\,e^{-\alpha_i\,|x_3 - x'_3|}\,\mathrm{sgn}\,(x_3 - x'_3). \qquad \text{(II-2-2)}$$

Pour $x_3 = 0$, la relation (II-2-2) devient :

$$A_{si}\,(0,x'_3) = -\frac{1}{2}\,e^{-\alpha_i\,x'_3}\;; \qquad x'_3 > 0\;. \qquad \text{(II-2-3)}$$

En prenant $x'_3 = 0$ dans (II-2-3), nous obtenons l'expression suivante de l'opérateur réponse de surface :

$$A_{si}(0,0) = -\frac{1}{2} \quad . \tag{II-2-4}$$

D'où $\quad \Delta_i(0,0) = 1 + A_{si}(0,0) = \frac{1}{2} \Rightarrow \Delta_i^{-1}(0,0) = 2.$ (II-2-5)

Finalement, la substitution des équations (II-2-3), (II-2-5) et (I-5-24) dans l'équation (I-2-17), conduit à l'expression de la fonction réponse d'un milieu diélectrique semi-infini:

$$g(k_{//}, \omega / x_3, x'_3) = -\frac{1}{2F_i}\left(e^{-\alpha_i |x_3 - x'_3|} + e^{-\alpha_i (x_3 + x'_3)}\right) \qquad x_3, x'_3 \geq 0; \tag{II-2-6}$$

ou encore :

$$g(k_{//}, \omega / x_3, x'_3) = -\frac{1}{2F_i}\left(e^{-\alpha_i |x_3 - x'_3|} + e^{\alpha_i (x_3 + x'_3)}\right) \qquad x_3, x'_3 \leq 0. \tag{II-2-7}$$

II-2-2) <u>Vecteurs propres</u>

Considérons le milieu semi-infini (fig. II-1a). Soit $< U(x_3)|$ le vecteur propre de volume non normalisé caractérisant une onde plane qui se propage à l'intérieur du milieu de référence:

$$< U(x_3)| = e^{-\alpha_i x_3}; \quad x_3 \geq 0; \tag{II-2-8}$$

où α_i est un imaginaire pur à l'intérieur des bandes de volume du diélectrique.
A la surface ($x_3 = 0$), nous avons :

$$< U(0)| = 1. \tag{II-2-9}$$

Comme notre système est un milieu semi-infini, nous utiliserons l'équation (I-2-21) pour calculer le vecteur propre non normalisé qui lui est associé.

En effet, sachant que $M \equiv \{0\}$, nous obtenons :

$$< u(x_3)| = < U(x_3)| - < U(0)| \Delta^{-1}(0,0) A(0,x_3). \qquad \text{(II-2-10)}$$

La substitution des équations (II-2-8), (II-2-9), (II-2-3) et (II-2-5) dans l'équation (II-2-10), nous permet d'avoir :

$$< u(x_3)| = 2\,\mathrm{ch}(\alpha_i x_3); \quad x_3 \geq 0. \qquad \text{(II-2-11)}$$

II-3) Lame mince diélectrique limitée par deu surfaces parfaitement réfléchissantes

Considérons un milieu diélectrique homogène infini. Prélevons-y une lame mince d'épaisseur 2L que nous supposons limitée par deux surfaces parfaitement réfléchissantes définies dans le domaine d'interface $M \equiv \{-L, L\}$. Cette lame est ainsi située dans l'espace D_i de façon que $-L \leq x_3 \leq L$ (fig. II-2).

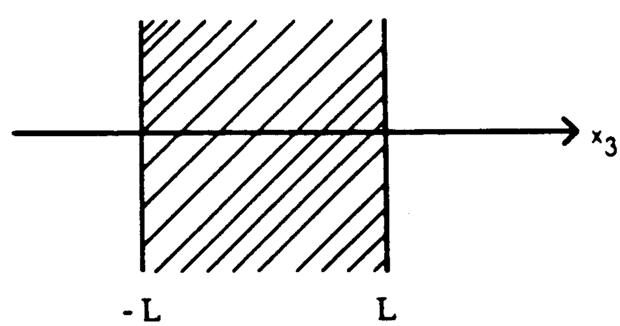


Fig. II-2 : *Lame mince diélectrique limitée par deux surfaces parfaitement réfléchissantes*

II-3-1) Fonction réponse

L'équation (I-5-21) devient dans ces conditions :

$$\frac{F_i}{\alpha_i}\left\{\theta(L-x_3)\,\theta(x_3+L)\left(-\alpha_i^2+\frac{\partial}{\partial x_3^2}\right)+\left[-\delta(L-x_3)+\delta(L+x_3)\right]\frac{\partial}{\partial x_3}\right\}$$

$$\times\ \overleftrightarrow{g}_{si}(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = \overleftrightarrow{I}\,\delta(x_3-x'_3), \qquad \text{(II-3-1)}$$

où

$$\theta(x_3+L) = \begin{cases} 1, \text{pour } x_3 \geq -L \\ 0, \text{pour } x_3 < -L \end{cases} \qquad \text{(II-3-2a)}$$

et $$\theta(L - x_3) = \begin{cases} 1, \text{pour } x_3 \leq L \\ \\ 0, \text{pour } x_3 > L. \end{cases} \qquad \text{(II-3-2b)}$$

Ce qui impose la vitesse de propagation nulle en dehors du milieu diélectrique (ondes stationnaires).

A l'aide des équations (I-2-26) et (I-5-24) nous trouvons l'expression suivante pour le calcul de tout élément de l'opérateur réponse de surface $\overleftrightarrow{A}_{si}$

$$A_{si}(x_3, x'_3) = -\frac{1}{2}\, e^{-\alpha i\,|x''_3 - x'_3|}\, \mathrm{sgn}(x''_3 - x'_3)\,\Big|_{x''3 = x'3}. \qquad \text{(II-3-3)}$$

En effet : $$A_{si}(L, x'_3) = -\frac{1}{2}\, e^{-\alpha i\,|L - x'_3|}; \qquad \text{(II-3-4a)}$$

et $$A_{si}(-L, x'_3) = -\frac{1}{2}\, e^{-\alpha i\,|L + x'_3|}. \qquad \text{(II-3-4b)}$$

D'où : $$A_{si}(L,L) = A_{si}(-L,-L) = -\frac{1}{2}; \qquad \text{(II-3-5a)}$$

$$A_{si}(L,-L) = A_{si}(-L,L) = -\frac{1}{2}\, e^{-2\alpha_i L}. \qquad \text{(II-3-5b)}$$

Ces résultats nous permettent d'écrire l'opérateur réponse de surface comme suit :

$$\overleftrightarrow{A}_{si}(MM) = -\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & e^{-2\alpha_i L} \\ \\ e^{-2\alpha_i L} & 1 \end{bmatrix}. \qquad \text{(II-3-6)}$$

Par conséquent l'équation $\overleftrightarrow{\Delta}_i(MM) = \overleftrightarrow{I}(MM) + \overleftrightarrow{A}_{si}(MM)$ devient

$$\overleftrightarrow{\Delta}_i(MM) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & -e^{-2\alpha_i L} \\ \\ -e^{-2\alpha_i L} & 1 \end{bmatrix}. \qquad \text{(II-3-7)}$$

Cela nous conduit à :

$$\overleftrightarrow{\Delta}_i^{-1}(MM) = \frac{1}{sh(2\alpha_i L)} \begin{bmatrix} e^{2\alpha_i L} & 1 \\ & \\ 1 & e^{2\alpha_i L} \end{bmatrix} \quad \text{(II-3-8)}$$

Finalement, en substituant les équations (I-5-24), (II-3-4) et (II-3-8) dans l'équation (I-2-17), nous trouvons l'expression de l'élément de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ de la lame diélectrique :

$$g\,(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = G\,(k_{//},\omega/x_3,x'_3) - \left[G(k_{//},\omega/x_3,-L),\ G\,(k_{//},\omega/x_3,L)\right]$$

$$\times \frac{1}{sh(2\alpha_i L)} \begin{bmatrix} e^{2\alpha_i L} & 1 \\ & \\ 1 & e^{2\alpha_i L} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_{si}\,(k_{//},\omega/-L,x'_3) \\ \\ A_{si}\,(k_{//},\omega/L,x'_3) \end{bmatrix}$$

Soit :

$$g\,(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = -\frac{e^{-\alpha_i\,|x'_3 - x'_3|}}{2F_i}$$

$$-\frac{1}{2F_i sh(2\alpha_i L)}\left[\ ch\,[\alpha_i\,(x_3 + x'_3)\,] + e^{-2\alpha_i L}\ ch\,[\alpha_i\,(x_3 - x'_3)]\right] \quad . \text{(II-3-9)}$$

II-3-2) <u>**Vecteurs propres**</u>

Considérons la lame mince diélectrique comme définie précédemment (voir fig. II-2) et supposons que la déformation du système de référence est due à la propagation d'une onde plane que nous notons par :

$$< U\,(x_3)| = e^{-\alpha_i x_3}. \quad \text{(II-3-10)}$$

La propagation se faisant dans le sens positif des x_3.
α_i est purement imaginaire à l'intérieur des bandes de volume de notre diélectrique. Cette onde représente également le vecteur propre de volume non normalisé. Aux limites de la lame mince, ce vecteur prend les valeurs suivantes :

$$< U\,(-L)| = e^{\alpha_i L}, \quad \text{(II-3-11a)}$$

et

$$< U\,(L)\ | = e^{-\alpha_i L}. \quad \text{(II-3-11b)}$$

Ainsi, pour le calcul du vecteur propre non normalisé correspondant à notre lame mince, utilisons l'équation (I-2-24) que nous rappelons ci-dessous :

$$< u(D_i) \mid = \; < U(M) \mid . \det \left[\overleftrightarrow{\Delta_i} (MM) \right] . \overleftrightarrow{\Delta_i}^{-1} (MM) \; \overleftrightarrow{A_{si}} (MD_i); \text{ dans } D_i.$$

Les éléments de l'opérateur réponse de surface $\overleftrightarrow{A_{si}}$ (MD_i) s'obtiennent à partir des équations (II-3-4) et il vient :

$$\overleftrightarrow{A_{si}}(M\,D_i) = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{-\alpha_i (L + x_3)} \\ e^{-\alpha_i (L - x_3)} \end{bmatrix} . \qquad \text{(II-3-12)}$$

En définitive, les équations (II-3-8), (II-3-11) et (II-3-12) nous permettent d'avoir :

$$< u(x_3) \mid \; = \frac{1}{2} e^{-2\alpha_i L} \, sh2\alpha_i L$$

$$x\left\{(e^{\alpha_i L} + e^{-\alpha_i L} e^{-2\alpha_i L}) (-\frac{1}{2} e^{-\alpha_i (L + x_3)} + (e^{\alpha_i L} e^{-2\alpha_i L} + e^{-\alpha_i L}) (-\frac{1}{2} e^{-\alpha_i (L - x_3)})\right\}$$

$$x \quad \frac{e^{\alpha_i L}}{sh2\alpha_i L};$$

soit :

$$< u(x_3) \mid \; = -\frac{1}{2} \left[e^{-\alpha_i (x_3 + d_i)} \, ch\, \alpha_i d_i + e^{\alpha_i (x_3 - d_i)} \right] , \qquad \text{(II-3-13)}$$

où $d_i = 2L$ représente l'épaisseur de la lame i.

Les valeurs propres sont données par $\det [\overleftrightarrow{\Delta} (MM)] = 0$.
Introduisant ce résultat dans la relation (II-3-13), nous obtenons l'expression des vecteurs propres correspondant aux valeurs propres données par $\det [\overleftrightarrow{\Delta} (MM)] = 0$ sous la forme :

$$< u(x_3) \mid \; = - e^{-\alpha_i L} \, ch \, [\alpha_i (x_3 - L)]. \qquad \text{(II-3-14)}$$

A l'intérieur de la bande de volume de la lame , α_i est imaginaire et $<u(x_3) \mid$ représente une onde stationnaire; tandis qu'à l'extérieur de cette bande de

volume, α_i devient réel et l'onde décroît exponentiellement à partir de chaque surface.

II-4) Interface entre deux milieux diélectriques isotropes semi-infinis

Considérons deux milieux diélectriques isotropes infinis différents contenus dans les espaces D_i (i = 1,2). Prélevons une partie semi-infinie dans l'espace D_1 et une autre définie dans l'espace D_2. En mettant en contact ces deux parties, nous créons l'interface. Pour notre étude, nous supposons l'axe x_3 perpendiculaire au plan d'interface (situé à $x_3 = 0$) (voir figure II-3).

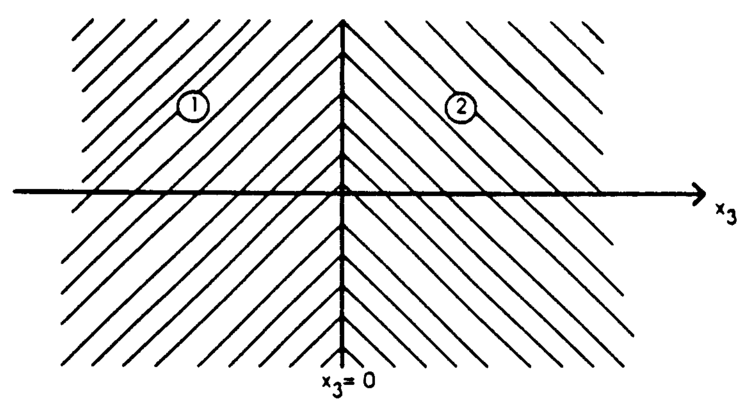


Fig. II-3 : ***Interface entre deux diélectriques isotropes semi-infinis***
i = 1, pour $x_3 \leq 0$, désigne le 1er milieu semi-infini;
i = 2, pour $x_3 \geq 0$, désigne le 2ème milieu semi-infini.

II-4-1) Fonctions réponses

L'élément de l'opérateur réponse de surface pour le milieu semi-infini i est facilement obtenu à partir des équations (I-2-33) et (I-5-21) :

$$A_{si}(x_3,x'_3) = -\frac{F_i}{\alpha_i}\,\frac{\alpha_i}{2F_i}\,\mathrm{sgn}(x''_3 - x'_3)\; e^{-\alpha_i |x''_3 - x'_3|}\Big|_{x''_3 = x_3} \qquad \text{(II-4-1)}$$

où i = 1,2

A l'interface ($x_3 = x'_3 = 0$), cet élément se réduit à :

$$A_{si}(0,0) = -\frac{1}{2}.$$

Ainsi, ces résultats nous permettent d'avoir

$$\Delta(0,0) = 1 + A_{si}(0,0) = \frac{1}{2}.$$

L'élément de fonction réponse de surface $g_{si}(0,0)$ est obtenu à partir de l'équation (I-2-35)

$$g_{si}^{-1}(0,0) = \Delta(0,0) \,.\, G_i^{-1}(0,0).$$

En utilisant les résultats précédents, nous trouvons :

$$g_{si}^{-1}(0,0) = -F_i \,; \qquad i = 1,2. \qquad \text{(II-4-2)}$$

Alors, l'élément d'interface de la fonction réponse de base du système composite résulte de la superposition des $g_{si}^{-1}(0,0)$ (éq. I-2-38c):

$$g^{-1}(0,0) = g_{s1}^{-1}(0,0) + g_{s2}^{-1}(0,0).$$

Soit :

$$g^{-1}(0,0) = -(F_1 + F_2). \qquad \text{(II-4-3)}$$

Finalement, pour calculer les éléments $g(k_{//}, \omega / x_3, x'_3)$ de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ de notre système composite, nous utiliserons l'équation générale (I-2-42). Ainsi :

$$g(x_3,x'_3) = G(x_3,x'_3) - G(x_3,o)\; G^{-1}(0,0)\; G(0,x'_3) + G(x_3,0)\; G^{-1}(0,0)\; g(0,0)$$
$$\times\; G^{-1}(0,0)\; G(0,x'_3).$$

Tenant compte des données et résultats précédents, nous trouvons (nous indiquons la dépendance de g avec $k_{//}$ et ω) :

$$g(k\;, \omega / x_3, x'_3) = -\frac{1}{2F_2}\left(e^{-\alpha_2 |x_3 - x'_3|} - \frac{F_1 - F_2}{F_1 + F_2} e^{-\alpha_2 (x_3 + x'_3)}\right)$$
$$x_3 > 0,\; x'_3 > 0 \qquad \text{(II-4-4)}$$

$$g(k\ ,\omega/x_3,x'_3) = -\frac{1}{F_1+F_2}e^{\alpha_1 x_3 - \alpha_2 x'_3}, \qquad x_3<0, x'_3>0\,; \qquad \text{(II-4-5)}$$

$$= -\frac{1}{F_1+F_2}e^{-\alpha_2 x_3 + \alpha_1 x'_3} \qquad x_3>0, x'_3<0\,; \qquad \text{(II-4-6)}$$

$$= -\frac{1}{2F_1}\left(e^{-\alpha_1|x_3-x'_3|} + \frac{F_1-F_2}{F_1+F_2}e^{\alpha_1(x_3+x'_3)}\right)$$

$$x_3<0, x'_3<0. \qquad \text{(II-4-7)}$$

Substituant maintenant dans les équations (II-4-4 à II-4-7) F_1 et F_2 par leurs équivalents donnés par les équations (I-5-22) et (I-5-23) et utilisant les relations (I-5-13), (I-5-14) et (I-5-20), nous obtenons les composantes g_{22}, g_{11}, g_{13}, g_{31} et g_{33} de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ dont les expressions sont données dans l'appendice A .

L'examen des expressions des $g_{\mu\gamma}$ (μ, γ = 1,3) met en évidence l'existence d'un facteur $(\varepsilon_1\alpha_2 + \alpha_1\varepsilon_2)^{-1}$ commun aux dénominateurs de toutes les composantes g_{11}, g_{13}, g_{31}, et g_{33} de la fonction réponse . L'équation correspondante

$$\varepsilon_1(\omega)\,\alpha_2(k_{//},\omega) + \varepsilon_2(\omega)\,\alpha_1(k_{//},\omega) = 0, \qquad \text{(II-4-8)}$$

n'est autre que la relation de dispersion bien connue [1,8,9] pour les ondes électromagnétiques (polaritons d'interface) localisées à l'interface $x_3 = 0$ (cas de la polarisation P).

Pour le cas spécial de l'interface entre un diélectrique et le vide, pour lequel $\varepsilon_2(\omega) = 1$, les résultats donnés par les équations [(A-1) à (A-5)] (voir l'appendice A) se réduisent à ceux déjà obtenus [9] par une autre méthode.

II-4-2) Vecteurs propres

Considérons le système composite dont la coupe schématique est donnée par la figure II-3. Pour le calcul des vecteurs propres, nous utiliserons l'équation (I-4-4) que nous réécrivons comme suit (par mesure de commodité) :

$$< u(D)| \;= < U(D)| \;- < U(M)|\overleftrightarrow{G}^{-1}(MM)\,\overleftrightarrow{G}\,(MD) + < U(M)|\overleftrightarrow{G}^{-1}(MM)$$

$$\times\,\overleftrightarrow{g}\,(MM)\overleftrightarrow{G}^{-1}(MM)\overleftrightarrow{G}(MD). \qquad \text{(II-4-9)}$$

Nous envisagerons deux cas possibles d'incidence.

i) <u>*Incidence dans le diélectrique (1)*</u>

Supposons avoir une onde plane, responsable de l'excitation du système de référence, que nous notons par :

$$< U(x_3) | \ = e^{-\alpha_1 x_3}, \qquad \text{(II-4-10)}$$

et qui se propage dans le sens positif des x_3.

L'équation (II-4-10) représente aussi le vecteur propre de volume non normalisé qui, à l'interface ($x_3 = 0$), prend la valeur suivante :

$$< U(0) | \ = 1. \qquad \text{(II-4-11)}$$

Le vecteur propre non normalisé correspondant à notre système s'exprime alors, à partir de l'équation (II-4-9), par :

$$< u(x_3) | \ = \ < U(x_3) | - < U(0) | \ G_1^{-1}(k_{//},\omega/0,0)\ G_1(k_{//},\omega/0,0,x_3)$$

$$+ <U(0) | G_1^{-1}(k_{//},\omega/0,0)\ g(k_{//},\omega/0,0)\ G_1^{-1}(k_{//},\omega/0,0)\ G_1(k_{//},\omega/0,0,x_3). \qquad \text{(II-4-12)}$$

Tenant compte des hypothèses et résultats précédents, l'équation (II-4-12) devient :

$$< u(x_3) | \ = e^{-\alpha_1 x_3} + \frac{F_1 - F_2}{F_1 + F_2}\ e^{\alpha_1 x_3}; \qquad x_3 \le 0. \qquad \text{(II-4-13)}$$

Nous y reconnaissons l'onde incidente $e^{-\alpha_1 x_3}$ et l'onde réfléchie $\frac{F_1 - F_2}{F_1 + F_2}\ e^{\alpha_1 x_3}$. Alors que le vecteur propre non normalisé lié à l'onde transmise dans le deuxième diélectrique ($x_3 \ge 0$) est donné par :

$$< u(x_3) | \ = \frac{2F_1}{F_1 + F_2}\ e^{-\alpha_1 x_3}; \qquad x_3 \ge 0. \qquad \text{(II-4-14)}$$

ii) <u>*Incidence dans le diélectrique (2)*</u>

Les vecteurs propres non normalisés correspondants peuvent être déduits aisément de ceux établis ci-dessus (pour l'incidence dans le diélectrique (1)) en y changeant x_3 par $- x_3$ et permutant les indices 1 et 2. Soit :

$$< u(x_3) | = \frac{2F_2}{F_1 + F_2} e^{\alpha_2 x_3} ; \qquad x_3 \leq 0. \qquad \text{(II-4-15a)}$$

et $$< u(x_3) | = e^{\alpha_2 x_3} + \frac{F_2 - F_1}{F_1 + F_2} e^{-\alpha_2 x_3} \qquad x_3 \geq 0. \qquad \text{(II-4-15b)}$$

II-5) Film mince diélectrique inséré entre deux autres diélectriques semi-infinis [10]

Supposons avoir deux milieux semi-infinis et une lame mince. Ces trois sous-systèmes, extraits de trois diélectriques différents, sont mis en contact de telle manière que la lame mince soit insérée entre les deux autres milieux semi-infinis.

Nous appelerons un tel composite, système "sandwich" et désignerons les différents milieux par (1), (2) et (3) tels que leurs domaines d'existence soient $x_3 \leq -L$, $-L \leq x_3 \leq +L$ et $x_3 \geq L$, respectivement; l'espace des interfaces étant $M \equiv \{-L, L\}$ (fig. II-4). Nous reconduisons telles quelles les hypothèses relatives aux plans des interfaces faites précédemment.

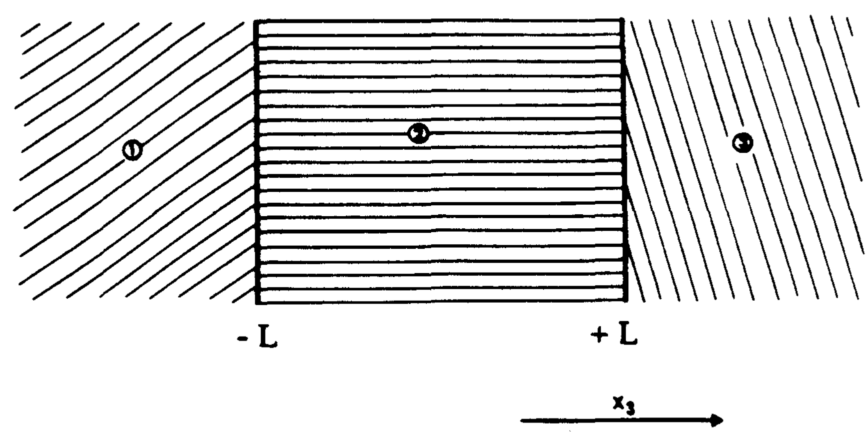


fig. II-4 : *Système "Sandwich"*
(1) - *Premier diélectrique (semi-infini);* $x_3 \leq -L$.
(2) - *Deuxième diélectrique (film mince);* $-L \leq x_3 \leq L$.
(3) - *Troisième milieu (semi-infini);* $x_3 \geq L$.

II-5-1) Fonctions réponses

Pour le calcul des éléments de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ du système "sandwich", il est nécessaire de connaître la fonction réponse d'interface $\overleftrightarrow{g}$ (MM).

En fait, l'équation (I-2-38b) ou (I-2-38c) nous permet d'obtenir :

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}(MM) = \begin{bmatrix} g_{s1}^{-1}(-L,-L) + g_{s2}^{-1}(-L,-L) & g_{s2}^{-1}(-L,L) \\ & \\ g_{s2}^{-1}(L,-L) & g_{s3}^{-1}(L,L) + g_{s2}^{-1}(L,L) \end{bmatrix} . \qquad \text{(II-5-1)}$$

g_{s1}, g_{s2} et g_{s3} représentent les fonctions réponses de surface des trois matériaux pris séparément.

Tenant compte des surfaces réfléchissantes situées à $x_3 = -L$ et à $x_3 = L$ et du fait que l'opérateur de clivage correspondant puisse être donné par [6,7,10] :

$$V_2(x_3) = \left[-\delta(L - x_3) + \delta(L + x_3)\right] \frac{\partial}{\partial x_3} ; \qquad \text{(II-5-2)}$$

nous calculons l'opérateur réponse de surface $\overleftrightarrow{A}_{s2}(MM)$ aux interfaces à partir de l'équation (I-2-33). Nous l'obtenons sous la forme :

$$\overleftrightarrow{A}_{s2}(MM) = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & e^{-2\alpha_2 L} \\ & \\ e^{-2\alpha_2 L} & 1 \end{bmatrix} . \qquad \text{(II-5-3)}$$

A l'aide de l'équation (I-2-36), ces résultats fournissent :

$$\overleftrightarrow{\Delta}_{s2}(MM) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -e^{-2\alpha_2 L} \\ & \\ -e^{-2\alpha_2 L} & 1 \end{bmatrix} . \qquad \text{(II-5-4)}$$

Alors que, au moyen de l'équation (I-5-26), nous trouvons l'expression suivante de l'inverse de la matrice $\overleftrightarrow{G}_2(MM)$:

$$\overleftrightarrow{G}_2^{-1}(MM) = -\frac{F_2}{sh(2\alpha_2 L)} \begin{bmatrix} e^{2\alpha_2 L} & -1 \\ & \\ -1 & e^{2\alpha_2 L} \end{bmatrix} . \qquad \text{(II-5-5)}$$

Finalement, l'équation (I-2-35) nous donne :

$$\overleftrightarrow{g}^{-1}_{s2}(MM) = \frac{F_2}{sh(2\alpha_2 L)} \begin{bmatrix} -ch(2\alpha_2 L) & 1 \\ 1 & -ch(2\alpha_2 L) \end{bmatrix} . \qquad \text{(II-5-6)}$$

L'analogie avec les résultats (II-4-2) nous permet d'écrire :

$$g^{-1}_{s1}(-L,-L) = -F_1 \text{ et } g^{-1}_{s3}(L,L) = -F_3. \qquad \text{(II-5-7)}$$

En substituant dans l'équation (II-5-1) tous les termes de la matrice par leurs équivalents donnés par (II-5-6) et (II-5-7), nous construisons $\overleftrightarrow{g}^{-1}$ (MM). Nous pouvons ainsi déduire aisément l'expression de la fonction réponse d'interface $\overleftrightarrow{g}$ (MM) en prenant simplement l'inverse de la matrice $\overleftrightarrow{g}^{-1}$ (MM). Soit :

$$\overleftrightarrow{g}(MM) = -\frac{1}{W(k_{//},\omega)} \begin{bmatrix} F_3 + F_2 \coth(2\alpha_2 L) & \dfrac{F_2}{sh(2\alpha_2 L)} \\ \dfrac{F_2}{sh(2\alpha_2 L)} & F_1 + F_2 \coth(2\alpha_2 L) \end{bmatrix} ; \qquad \text{(II-5-8)}$$

où $\quad W(k_{//},\omega) = F_1F_3 + F_2(F_1 + F_3)\coth(2\alpha_2 L) + F_2^2 \quad . \qquad$ (II-5-9)

Maintenant, nous pouvons calculer tous les éléments de la fonction réponse du système "sandwich" tout en ayant soin de préciser les milieux où l'on crée l'excitation et où l'on observe la réponse.
En effet:

i) *cas où les points source* x_3 *et d'observation* x'_3 *se situent dansdiélectrique (1)* : dans ce cas l'équation générale (I-2-42) s'écrit :

$$\begin{aligned} g(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = {} & G_1(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) \\ & - G_1(k_{//}, \omega/x_3, -L)\, G_1^{-1}(k_{//}, \omega/-L, -L)\, G_1(k_{//}, \omega/-L, x'_3) \\ & + G_1(k_{//}, \omega/x_3, -L)\, G_1^{-1}(k_{//}, \omega/-L, -L)\, g(k_{//}, \omega/-L, -L) \\ & \times G_1^{-1}(k_{//}, \omega/-L, -L)\, G_1(k_{//}, \omega/-L, x'_3). \end{aligned} \qquad \text{(II-5-10)}$$

Substituant les équations (I-5-24) et (II-5-8) dans l'équation (II-5-10) nous obtenons l'expression suivante de l'élément de base de la fonction réponse :

$$g(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = -\frac{e^{-\alpha_1|x_3 - x'_3|}}{2F_1} + \frac{e^{\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)}}{2F_1}$$

$$- \frac{F_3 + F_2 \coth(2\alpha_2 L)}{W(k_{//},\omega)} e^{\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)}. \qquad \text{(II-5-11)}$$

Notons que, dans le cas où le point - source x_3 et le point d'observation de la réponse se trouvent dans le milieu diélectrique (3), les éléments $g(k_{//},\omega/x_3,x'_3)$ de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ peuvent être déduits aisément de l'expression (II-5-11) ci-dessus par permutation des indices 3 et 1 ensemble et changement des x_3 en $-x'_3$ et des x'_3 en $-x_3$.

ii) *<u>Cas où les points d'excitation et d'observation se situent dans les diélectriques (3) et (1) respectivement</u>*

L'équation générale (I-2-42) prend la forme suivante :

$$g(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = G_3(k_{//},\omega/x_3,L)\, G_3^{-1}(k_{//},\omega/L,L)\, g(k_{//},\omega/L,-L)$$

$$\times\, G_1^{-1}(k_{//},\omega/-L,-L)\, G_1(k_{//},\omega/-L,x'_3). \qquad \text{(II-5-12)}$$

Utilisant les résultats ci-dessus, nous obtenons :

$$g(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = \frac{F_2}{W(k_{//},\omega)\, \mathrm{sh}\,(2\alpha_2 L)}\, e^{-\alpha_3(x_3 - L)}\, e^{\alpha_1(L + x'_3)},$$

$$x_3 \geq L, \quad x'_3 \leq -L \qquad \text{(II-5-13)}$$

Lorsque le point source est dans le diélectrique (1) et le point d'observation dans le diélectrique (3) ($x_3 \leq -L$ et $x'_3 \geq L$), $g(k_{//},\omega/x_3,x'_3)$ est obtenu à partir de l'équation ci-dessus (II-5-13) juste en y permutant les indices 1 et 3 et changeant x_3 en $-x_3$ et x'_3 en $-x'_3$.

iii) *<u>Cas où le point source est dans le diélectrique (1) et le point d'observation dans le diélectrique</u>* (2)

Nous considérons le cas où l'on réalise l'excitation dans le premier milieu et observe la réponse dans le film mince et inversement. Dans ce cas, l'équation (I-2-42) nous fournit l'élément de base $g(k_{//},\omega/x_3,x'_3)$.

$$g(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = G_1(k_{//},\omega/x_3,-L)\, G_1^{-1}(k_{//},\omega/-L,-L)$$

$$\times \left(g(k_{//},\omega/-L,-L),\, g(k_{//},\omega/-L,L)\right)$$

$$\times \begin{bmatrix} G_2(k_{//},\omega/-L,-L) & G_2(k_{//},\omega/-L,L) \\ G_2(k_{//},\omega/L,-L) & G_2(k_{//},\omega/L,L) \end{bmatrix}^{-1}$$

$$\times \begin{bmatrix} G_2(k_{//},\omega/-L,x'_3) \\ G_2(k_{//},\omega/L,x'_3) \end{bmatrix} . \qquad \text{(II-5-14)}$$

En développant ces produits et utilisant les équations (I-5-24) et (II-5-8), nous obtenons :

$$g(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = -\frac{e^{\alpha_1(x_3+L)}}{W(k_{//},\omega)\,\mathrm{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \left\{\left[F_3 + F_2 \coth(2\alpha_2 L)\right] \mathrm{sh}\left[\alpha_2(L - x'_3)\right] + \frac{F_2}{\mathrm{sh}(2\alpha_2 L)}\,\mathrm{sh}\left[\alpha_2(L + x'_3)\right]\right\} .$$

$$x_3 \le -L, \quad -L \le x'_3 \le L. \qquad \text{(II-5-15a)}$$

Lorsque la source est dans le diélectrique (2) et le point d'observation dans le diélectrique (1), de façon similaire nous obtenons :

$$g(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = -\frac{e^{\alpha_1(L+x'_3)}}{W(k_{//},\omega)\,\mathrm{sh}(2\alpha_2 L)}$$
$$\times \left\{\left[F_3 + F_2 \coth(2\alpha_2 L)\right] \mathrm{sh}\left[\alpha_2(L - x_3)\right] + \frac{F_2}{\mathrm{sh}(2\alpha_2 L)}\,\mathrm{sh}\left[\alpha_2(L + x_3)\right]\right\}$$

$$x'_3 \le -L, \quad -L \le x_3 \le L. \qquad \text{(II-5-15b)}$$

iv) *Cas où les points source et d'observation se situent dans la lame mince* (2)

Considérons à présent le cas où nous réalisons l'excitation et observons la réponse dans la lame diélectrique (2). Alors, l'équation (I-2-42) devient :

$g(k_{//}, \omega/x_3, x'_3)$

$$
\begin{aligned}
&= G_2(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) - \big(G_2(k_{//}, \omega/x_3, -L), \qquad G_2(k_{//}, \omega/x_3, L)\big) \\
&\times \begin{bmatrix} G_2(k_{//}, \omega/-L, -L) & G_2(k_{//}, \omega/-L, L) \\ G_2(k_{//}, \omega/L, -L) & G_2(k_{//}, \omega/L, L) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} G_2(k_{//}, \omega/-L, x'_3) \\ G_2(k_{//}, \omega/L, x'_3) \end{bmatrix} \\
&+ \big(G_2(k_{//}, \omega/x_3, -L), \qquad G_2(k_{//}, \omega/x_3, L)\big) \\
&\times \begin{bmatrix} G_2(k_{//}, \omega/-L, -L) & G_2(k_{//}, \omega/-L, L) \\ G_2(k_{//}, \omega/L, -L) & G_2(k_{//}, \omega/L, L) \end{bmatrix}^{-1} \\
&\times \begin{bmatrix} g(k_{//}, \omega/-L, -L) & g(k_{//}, \omega/-L, L) \\ g(k_{//}, \omega/L, -L) & g(k_{//}, \omega/L, L) \end{bmatrix} \\
&\times \begin{bmatrix} G_2(k_{//}, \omega/-L, -L) & G_2(k_{//}, \omega/-L, L) \\ G_2(k_{//}, \omega/L, -L) & G_2(k_{//}, \omega/L, L) \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} G_2(k_{//}, \omega/-L, x'_3) \\ G_2(k_{//}, \omega/L, x'_3) \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{II-5-16}
$$

Développant ces produits et utilisant les équations (I-5-24) et (II-5-8), nous aboutissons à l'expression suivante de l'élément $g(k_{//},\omega/x_3,x'_3)$ de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$:

$$
\begin{aligned}
g(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = &-\frac{e^{-\alpha_2 \, x_3 - x'_3}}{2F_2} + \frac{1}{2F_2 \operatorname{sh}(2\alpha_2 L)} \\
&\times \{\operatorname{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)] - e^{-2\alpha_2 L} \operatorname{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)]\} - \frac{1}{2W \operatorname{sh}^2(2\alpha_2 L)} \Big\{ [F_3 + F_2 \coth(2\alpha_2 L)] \\
&\qquad \times \{ \operatorname{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 - 2L)] - \operatorname{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)] \} \\
&\qquad + [F_1 + F_2 \coth(2\alpha_2 L)] \{\operatorname{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 + 2L)] - \operatorname{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)]\} \\
&\qquad + \frac{F_2}{\sinh(2\alpha_2 L)} \{ \operatorname{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 - 2L)] - 2 \operatorname{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)] \\
&\qquad\qquad + \operatorname{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 + 2L]\} \Big\}.
\end{aligned}
\tag{II-5-17}
$$

Nous pouvons ainsi calculer toutes les composantes $g_{\mu\gamma}$ (μ , γ = 1, 2, 3)de l'élément de base $g(k_{//},\omega/x_3,x'_3)$ correspondant à chacun des cas susmentionnés. Pour ce faire, il suffit d'abord, de substituer dans les équations (II-5-11 - II-5-17) les grandeurs F_1, F_2 et F_3 par leurs équivalents donnés par les équations (I-5-22) et (I-5-23) et ensuite, d'utiliser les relations (I-5-13), (I-5-14) et (I-5-20). Tous les g_{11}, g_{22}, g_{13}, g_{31} et g_{33} ainsi construits sont répertoriés dans l'appendice A.

Par ailleurs, faisons remarquer que, dans le dénominateur de tous les éléments de la fonction réponse dont il a été question ci-dessus, apparaît le terme $W(k_{//},\omega) = F_1F_3 + F_2(F_1 + F_3) \coth 2\alpha_2 L + F_2^2$. Lorsque les deux différentes valeurs de $W(k_{//},\omega)$ [car les F_i prennent deux valeurs différentes, voir équations (II-5-22) et (I-5-23)] s'annulent, nous obtenons les polaritons confinés.

Plus précisément, de la composante g_{22}, nous pouvons écrire la condition d'existence des polaritons localisés à l'intérieur de la lame mince comme suit :

$$\alpha_1(k_{//},\omega)\, \alpha_3(k_{//},\omega) + \alpha_2(k_{//},\omega) \left[\alpha_1(k_{//},\omega) + \alpha_3(k_{//},\omega)\right] \coth \left[2\alpha_2(k_{//},\omega) \,.\, L\right] + \alpha_2^2(k_{//},\omega) = 0. \qquad \text{(II-5-18)}$$

Des quatre autres éléments non nuls de $\overleftrightarrow{g}$, nous avons :

$$\frac{\varepsilon_1(\omega)}{\alpha_1(k_{//},\omega)}\, \frac{\varepsilon_3(\omega)}{\alpha_3(k_{//},\omega)} + \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\alpha_2(k_{//},\omega)}\left(\frac{\varepsilon_1(\omega)}{\alpha_1(k_{//},\omega)} + \frac{\varepsilon_3(\omega)}{\alpha_3(k_{//},\omega)}\right) \coth \left[2\alpha_2(k_{//},\omega) \,.\, L\right] + \frac{\varepsilon_2^2(\omega)}{\alpha_2^2(k_{//},\omega)} = 0. \qquad \text{(II-5-19)}$$

Le résultat (II-5-19) correspond aux polaritons localisés pour lesquels le champ électrique a deux composantes non nulles, suivant x_1 et x_3 (polarisation P). Alors que l'équation (II-5-18) correspond aux polaritons confinés pour lesquels le champ électrique n'a qu'une seule composante non nulle, suivant x_2 (polarisation S).

II-5-2) Vecteurs propres

Considérons le système composite dont le schéma est donné par la figure II-4. Pour calculer les vecteurs propres non normalisés, nous utiliserons la relation (II-4-9).

i) ***Incidence dans le diélectrique (1)*** : supposons avoir une onde plane dont la propagation (ici dans le sens positif des x_3) est responsable de la déformation de notre système. Le vecteur propre de volume correspondant est tel que :

$$< U(x_3) | = e^{-\alpha_1 x_3}. \qquad \text{(II-5-20)}$$

A l'interface (x_3 = - L), celui-ci prend la valeur

$$< U(-L) | = e^{\alpha_1 L}. \qquad \text{(II-5-21)}$$

Dans ce cas d'incidence, l'équation (II-4-9) devient

$$< u(x_3) | = < U(x_3) | - < U(-L) | \; G_1^{-1}(k_{//},\omega/-L,-L)\, G_1(k_{//},\omega/-L,x_3)$$

$$+ < U(-L) | \; G_1^{-1}(k_{//},\omega/-L,-L)\; g(k_{//},\omega/-L,-L)\; G_1^{-1}(k_{//},\omega/-L,-L)\, G_1(k_{//},\omega/-L,x_3)\,.$$

(II-5-22)

En y substituant les différents termes par leurs équivalents donnés par les équations (I-5-24), (II-5-8), (II-5-20) et (II-5-21), nous trouvons l'expression du vecteur propre non normalisé escompté. Soit :

$$< u(x_3) | = e^{-\alpha_1 x_3} + \left[\frac{2F_1}{W(k_{//},\omega)} \left(F_3 + F_2 \coth 2\alpha_2 L\right) -1\right] \; e^{\alpha_1 (x_3 + L)}.$$

$$x_3 \leq -L. \qquad \text{(II-5-23)}$$

D'après ce qui précède, $W(k_{//},\omega) = 0$, nous permet d'avoir les modes localisés. Alors, en multipliant l'équation (II-5-23) par $W(k_{//},\omega)$ (pour $W(k_{//},\omega) \rightarrow 0$), nous trouvons l'expression suivante du vecteur propre correspondant aux états localisés :

$$< u(x_3) | = 2F_1 \left(F_3 + F_2 \coth 2\alpha_2 L\right) \; e^{\alpha_1 (x_3 + L)}. \qquad \text{(II-5-24)}$$

Le vecteur propre non normalisé associé à l'onde transmise dans la lame (2) ($-L \leq x_3 \leq L$) est donné par l'équation (II-4-9) qui se réduit à :

$$< u(x_3) | = < U(-L) | \; G(k_{//},\omega/-L,-L) \; \left[\, g(k_{//},\omega/-L,-L) \; ; \;\; g(k_{//},\omega/-L,L)\right]$$

$$\times \begin{bmatrix} G_2(k_{//},\omega/-L,-L) & G_2(k_{//},\omega/-L,L) \\ G_2(k_{//},\omega/L,-L) & G_2(k_{//},\omega/L,L) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} G_2(k_{//},\omega/-L,x_3) \\ G_2(k_{//},\omega/L,x_3) \end{bmatrix}. \qquad \text{(II-5-25)}$$

En développant ces produits et effectuant les substitutions adéquates, nous trouvons, après toutes les simplifications :

$$< u(x_3) | = \frac{2F_1\ e^{\alpha_1 L}}{W(k_{//},\omega)\ sh(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \left\{\left[\left(F_3 + F_2 \coth(2\alpha_2 L)\right)\ sh\left[\alpha_2(x_3 - L)\right]\right] - \frac{F_2}{sh(2\alpha_2 L)}\ sh\left[\alpha_2(x_3 + L)\right]\right\} .$$

(II-5-26)

D'où, le vecteur propre correspondant au mode localisé :

$$< u(x_3) | = \frac{2F_1\ e^{\alpha_1 L}}{sh(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \left\{\left[\left(F_3 + F_2 \coth(2\alpha_2 L)\right)\ sh\left[\alpha_2(x_3 - L)\right]\right] - \frac{F_2}{sh(2\alpha_2 L)}\ sh\left[\alpha_2(x_3 + L)\right]\right\} .$$

(II-5-27)

De façon analogue, nous pouvons construire le vecteur propre non normalisé associé à l'onde transmise dans le milieu diélectrique (3) ($x_3 \geq L$). Soit :

$$< u(x_3) | = \frac{2F_1F_2}{W(k_{//},\omega)\ sh(2\alpha_2 L)}\ e^{\alpha_1 L}\ e^{-\alpha_3(x_3 - L)} , \qquad x_3 \geq L. \qquad \text{(II-5-28)}$$

Le vecteur propre correspondant au mode localisé s'écrit :

$$< u(x_3) | = \frac{2F_1F_2}{sh(2\alpha_2 L)}\ e^{\alpha_1 L}\ e^{-\alpha_3(x_3 - L)}, \qquad \text{pour } x_3 \geq L. \qquad \text{(II-5-29)}$$

ii) ***Incidence dans la lame diélectrique (2)*** : la méthode de calcul des vecteurs propres étant la même que dans le cas précédent, nous ne donnons ici que les expressions analytiques finales des vecteurs propres non normalisés et des vecteurs propres associés aux modes localisés. En effet, supposant que la propagation se fait dans le sens positif de l'axe x_3, nous trouvons :

$$< u(x_3) | = \frac{2F_2\ e^{\alpha_2 L}}{W(k_{//},\omega)\ sh(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \left\{\frac{F_2}{sh(2\alpha_2 L)}\ sh\left[\alpha_2(x_3 + L)\right] - \left(F_3 + F_2 \coth(2\alpha_2 L)\right)\ sh\left[\alpha_2(x_3 + L)\right]\right\}$$

$$- L \leq x_3 \leq L; \qquad \text{(II-5-30)}$$

$$< u(x_3) | = \frac{2F_2\, e^{\alpha_2 L}}{W(k_{//},\omega)\, sh(2\alpha_2 L)}\; e^{-\alpha_3(x_3 - L)}, \qquad x_3 \geq L\,; \tag{II-5-31}$$

$$< u(x_3) | = \frac{2F_2\, e^{\alpha_2 L}}{W(k_{//},\omega)} \left(F_3 + F_2 \coth(2\alpha_2 L)\right) e^{\alpha_1(x_3 + L)}, \; x_3 \leq - L. \tag{II-5-32}$$

Les mêmes démarches nous conduisent aux vecteurs propres non normalisés dans le cas où l'incidence se fait dans le troisième diélectrique (plus précisément, lorsque l'onde plane se propage à partir de l'infini dans le sens négatif des x_3).

Les expressions de ces vecteurs propres peuvent être aussi obtenues à partir des résultats donnés dans les paragraphes (i) et (ii) en y remplaçant x_3 par $-x_3$ et changeant l'indice 1 par 3 (pour α_i et F_i).

<u>Remarques:</u>

Notons que les fonctions réponses ont été déjà utilisées pour l'étude de certains phénomènes physiques. Par exemple, dans le cas simple d'une surface libre (interface entre un milieu semi-infini et le vide),ces fonctions réponses ont été utilisés dans des calculs de diffusion Raman des surfaces métalliques [11,12] et de diffusion de Brillouin des surfaces opaques [13]. Elles ont aussi permis d'étudier des interactions non linéaires des polaritons de surface [14,15], de l'interaction du rayonnement électromagnétique avec des surfaces rugueuses [2, 9] et de déterminer la relation de dispersion des polaritons de surface[2, 16, 17].

On peut par ailleurs utiliser ces fonctions réponses pour déterminer les champs électrique et magnétique associés à une onde incidente réfléchie et transmise par une interface. On peut utiliser l'équation générale (II-4-9) et calculer les différentes composantes de ces champs. Mais comme les expressions explicites des fonctions réponses sont connues [éqs. (II-4-4), (A-1) - (A-5)], on peut alors obtenir directement les composantes électrique et magnétique de cette onde. En effet, dans le cas des modes de polarisation S, on obtient l'unique composante non nulle E_2 du champ électrique à partir des équations (A-1). Alors que dans le cas des modes P, les composantes E_1 et E_3 de ce champ sont construites à partir des équations (A-2) et (A-4), respectivement. Finalement, utilisant l'équation de Maxwell (I-3-2), on trouve les composantes H_1et H_3 du champ magnétique (modes S) à partir de

$$H_1 = \frac{ic}{\omega}\frac{\partial E_2}{\partial x_3}, \tag{II-5-33}$$

$$H_3 = -\frac{ic}{\omega}\frac{\partial E_2}{\partial x_1}, \qquad \text{(II-5-34)}$$

et la composante H_2 (modes P) à partir de

$$H_2 = -\frac{ic}{\omega}\left(\frac{\partial E_1}{\partial x_3} - \frac{\partial E_3}{\partial x_1}\right); \qquad \text{(II-5-35)}$$

ayant toutes le même facteur de propagation $e^{i(k_{//}x_1 - \omega t)}$. Ces résultats permettent alors , d'avoir directement le vecteur de Poynting:

$$\vec{S} = \frac{c}{8\pi}(\vec{E} \wedge \vec{H}). \qquad \text{(II-5-36)}$$

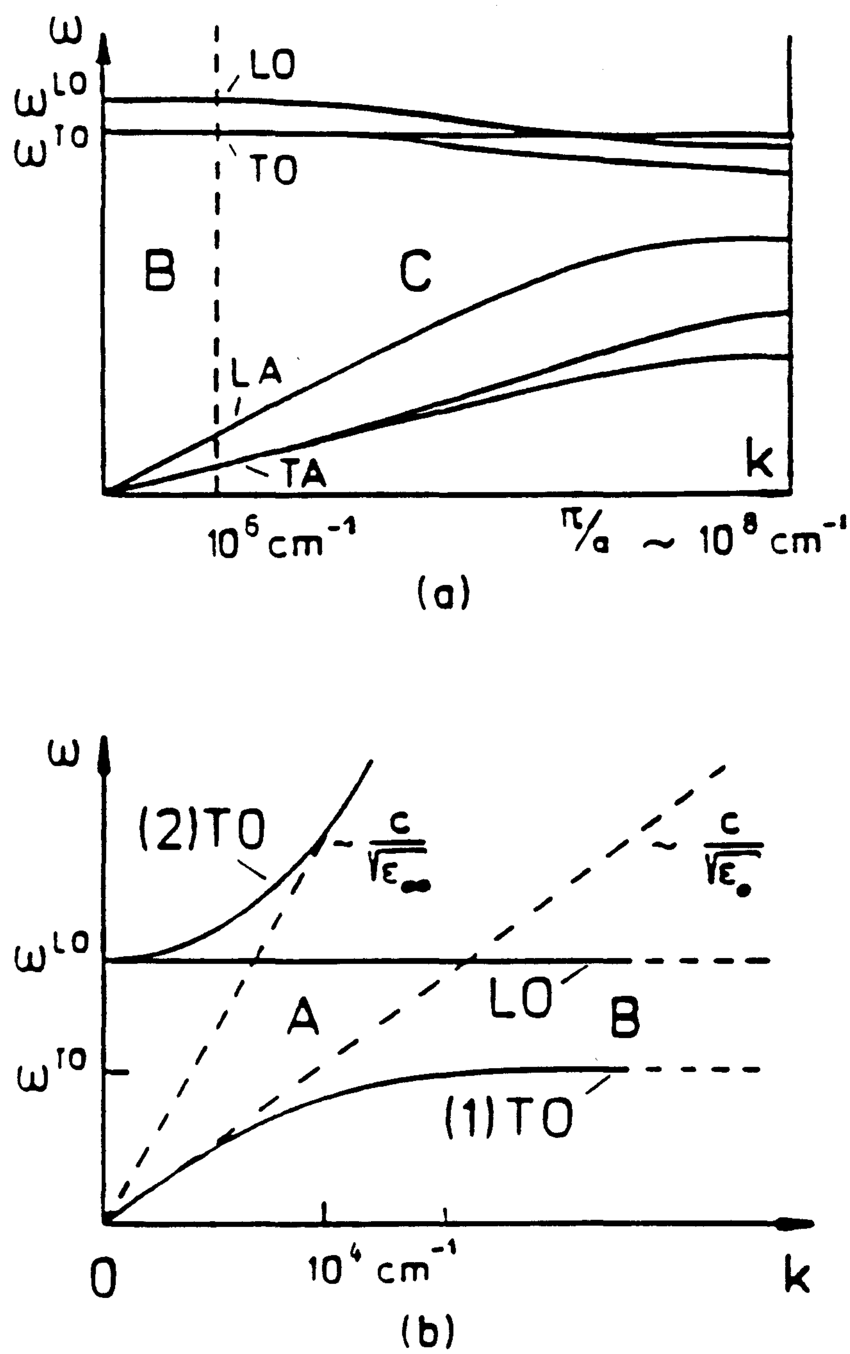
II-6) Application et discussion des résultats pour les modes P

Un cas intéressant est celui des polaritons de surface [1-5,10,18, 19]. En effet, si le solide est terminé par une surface plane le séparant du vide, des polaritons de surface localisés à la surface peuvent exister.

G. BORSTEL et H.J. FALGE ont déjà clairement expliqué et discuté la présence de phonon-polaritons dans le cristal ionique cubique de type NaCl (Voir figure II-5) [3].

En effet, la figure II-5a montre la dépendance des fréquences ω du phonon de vecteur d'onde $\vec{k}$ pour une direction arbitraire fixée dans la première zone de Brillouin. Le phonon est pur transverse (TO) ou pur longitudinal (LO) (région C) uniquement pour des directions particulières de $\vec{k}$ définies par la symétrie du cristal. Alors que dans la région B, les branches de phonon optique ne montrent pas de dispersion et le couplage résonnant de phonons optiques transverses avec les photons produit la dispersion de polariton typique montrée dans la figure II-5b.

La partie rectiligne de la branche inférieure de polariton (1) TO ($\omega < \omega_{TO}$), avec la vitesse de phase $\omega/k = c/\sqrt{\varepsilon_0}$, caractérise la situation où le cristal se comporte comme un diélectrique habituel de constante diélectrique statique ε_0 dans un champ électrique variant lentement. Pour des valeurs élevées de k ($k=|\vec{k}|$) , cette branche devient de plus en plus du type phonon et tend vers la fréquence ω_{TO} du phonon optique transverse dans la région B. Pour des valeurs élevées de k, la vitesse de phase de la branche supérieure de polariton (2) TO tend vers la valeur $\omega/k = c/\sqrt{\varepsilon_\infty}$; ε_∞ désignant la constante diélectrique dite de haute fréquence.



<u>Figure II-5)</u>: (a) ***Courbes de dispersion des phonons dans un cristal ionique cubique diatomique*** ; a - ***constante du réseau;***
(b) ***Polariton*** *(région* A*)* ***et phonons optiques*** *(région* B*)* [3].

L'excitation est ici essentiellement du genre photon. Vu que le couplage résonant entre les phonons optiques longitudinaux et les photons n'existe pas, la branche de phonon LO ne montre pas de dispersion dans la région A.

L'objet du présent paragraphe est d'étudier ces polaritons dans quelques systèmes diélectriques composites au moyen de la théorie de réponse d'interface. Plus précisément, à l'aide d'un traitement numérique des résultats analytiques obtenus précédemment, nous mettrons en évidence les modes d'interface, les modes de surface ainsi que les modes discrets des milieux finis.

II-6-1) Polaritons à l'interface entre deux milieux diélectriques semi-infinis

Les propriétés spécifiques des polaritons de surface ou plus généralement d'interface, dépendent des caractéristiques des milieux matériels, habituellement décrits par leurs fonctions diélectriques. L'amplitude de ces polaritons est maximale à la surface (ou à l'interface) et décroît exponentiellement lorsqu'on s'éloigne de celle-ci.

Nous considérons dans la présente étude, une interface plane composée de deux milieux diélectriques semi-infinis, isotropes repérés par les indices 1 et 2. Ces milieux sont définis par leurs fonctions diélectriques $\varepsilon_1(\omega)$ et $\varepsilon_2(\omega)$ dépendant de la fréquence ω. Comme dans la figure (II-3), nous choisissons l'interface (le plan $x_3 = 0$) telle que l'axe x_3 lui soit perpendiculaire et supposons que les diélectriques 1 et 2 occupent les régions $x_3 < 0$ et $x_3 > 0$, respectivement. Pour de tels systèmes composites, la théorie des réponses d'interface nous a déjà permis de construire la relation de dispersion des polaritons localisés à l'interface (voir l'équation II-4-8). En effet, pour la polarisation P, nous avons :

$$\varepsilon_1(\omega)\,\alpha_2(k_{//},\omega) + \varepsilon_2(\omega)\,\alpha_1(k_{//},\omega) = 0;$$

où $\alpha_1(k_{//},\omega)$ et $\alpha_2(k_{//},\omega)$ sont donnés par l'équation (I-5-15).

Dans le cas de la présente étude (phonon-polaritons), les fonctions diélectriques $\varepsilon_i(\omega)$ $(i = 1,2)$ représentent des oscillateurs harmoniques non amortis et s'expriment par (voir par exemple les références [20-22]) :

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{\infty i}\,\frac{\omega_{Li}^2 - \omega^2}{\omega_{Ti}^2 - \omega^2}, \qquad i = 1,2; \qquad \text{(II-6-1)}$$

où ω_{Ti} et ω_{Li} désignent les fréquences transverse et longitudinale des phonons optiques, respectivement, dans les matériaux i.

Les grandeurs $\alpha_1(k_{//}, \omega)$ et $\alpha_2(k_{//}, \omega)$ sont soit imaginaires (car, dans le volume des milieux et dans la direction de l'axe x_3, les modes d'interface se propagent tout en s'atténuant de façon exponentielle au fur et à mesure qu'ils s'éloignent de l'interface $x_3=0$), soit réelles (dans les gaps du spectre des polaritons de volume).

Dans le cas de l'interface, les modes localisés ne peuvent apparaître que dans la région de fréquences ω comprises entre ω_{Ti} et ω_{Li}. La condition nécessaire pour l'existence des modes d'interface est que α_i (i = 1, 2) soit une quantité réelle et $\varepsilon_1(\omega) > 0$et $\varepsilon_2(\omega) < 0$ ou $\varepsilon_1(\omega) < 0$ et $\varepsilon_2(\omega) > 0$. Ces conditions nous permettent d'avoir trois situations physiques en prenant $\omega_{T1} < \omega_{T2}$:

i) $\omega_{T1} < \omega_{T2} < \omega_{L1} < \omega_{L2}$,
ii) $\omega_{T1} < \omega_{T2} < \omega_{L2} < \omega_{L1}$,
iii) $\omega_{T1} < \omega_{L1} < \omega_{T2} < \omega_{L2}$.

Ainsi, à l'aide d'un calcul numérique, ces résultats analytiques nous permettent d'apprécier de façon qualitative, l'existence des modes d'interface pour quelques systèmes diélectriques composites concrets. Les résultats de tels calculs sont obtenus en utilisant, comme valeurs des paramètres $\varepsilon_{\infty i}$, ω_{Li} et ω_{Ti}, celles tirées de la référence [23] et consignées dans le tableau I. Ils sont illustrés, ici, par des courbes (voir les figures II-6, 7 et 8).

En effet, ces figures montrent les courbes de dispersion de polaritons d'interface (courbes en pointillés) correspondant aux systèmes composites InAs/GaP, GaAs/InAs et InP/AlSb. La plage de fréquences comprise entre ω_{T1} (respectivement ω_{T2}) et la branche foncée (la plus basse) définit la première mini-bande du substrat 1(respectivement 2); tandis que la branche foncée partant de ω_{L1} (respectivement ω_{L2}) indique la limite inférieure de la deuxième mini-bande de celui-ci. Dans ces mini-bandes, existent les phonon-polaritons qui se propagent à travers le substrat.

Nos résultats corroborent l'affirmation de P.Halevi [24] selon laquelle, une interface composée de deux milieux dont les fonctions diélectriques sont données par l'équation (II-6-1), possède toujours exactement deux modes de phonon-polariton d'interface. L'intervalle de fréquences (ω_{Ti},ω_{Li}) définit un gap où se peuvent se propager les phonon-polaritons d'interface.

Dans le cas du système composite InP/AlSb (fig. II-8), nous remarquons que la branche correspondant aux modes d'interface de plus grande énergie part de la fréquence longitudinale ω_{L2} pour $k_{//}=0$. Ceci est dû au fait que les fréquences longitudinales et transverses des deux matériaux sont assez proches. Dans ce cas, les modes d'interface ne peuvent apparaître que pour $\omega_{T1} < \omega < \omega_{T2}$ et $\omega_{L2} < \omega < \omega_{L1}$.

Soulignons que dans le cas de la polarisation -S, la relation de dispersion des polaritons s'écrit:

$$\alpha_1 (k_{//},\omega) + \alpha_2 (k_{//},\omega)=0.$$

Mais cette équation n'a pas de solution. Ceci montre bien que le couplage de deux milieux homogènes ne peut pas donner lieu à des modes d'interface pour cette géométrie.

Tableau I:

Paramètres caractéristiques des milieux diélectriques constituant les interfaces étudiées. Ces valeurs sont extraites de la référence [23]. Dans le cas de la présente étude , i=1,2.

Type de diélectrique	$\varepsilon_{\infty i}$	$\omega_{Ti}(cm^{-1})$	$\omega_{Li}(cm^{-1})$
AlSb	*10.2*	*318*	*345*
GaP	*8.5*	*366*	*401*
InAs	*12.3*	*218*	*243*
GaAs	*10.9*	*273*	*297*
GaSb	*14.4*	*231*	*241*
InP	*9.6*	*307*	*351*

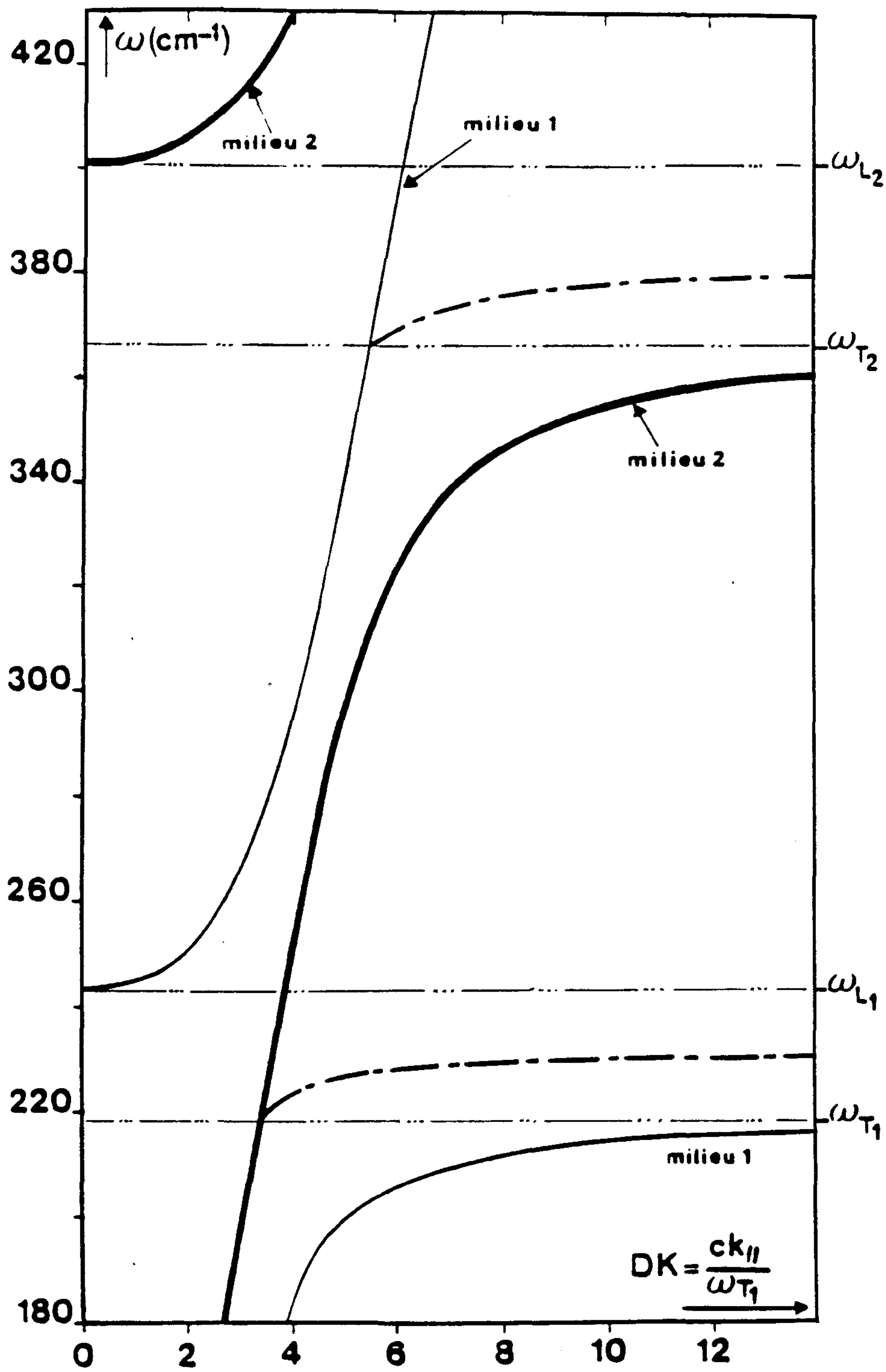
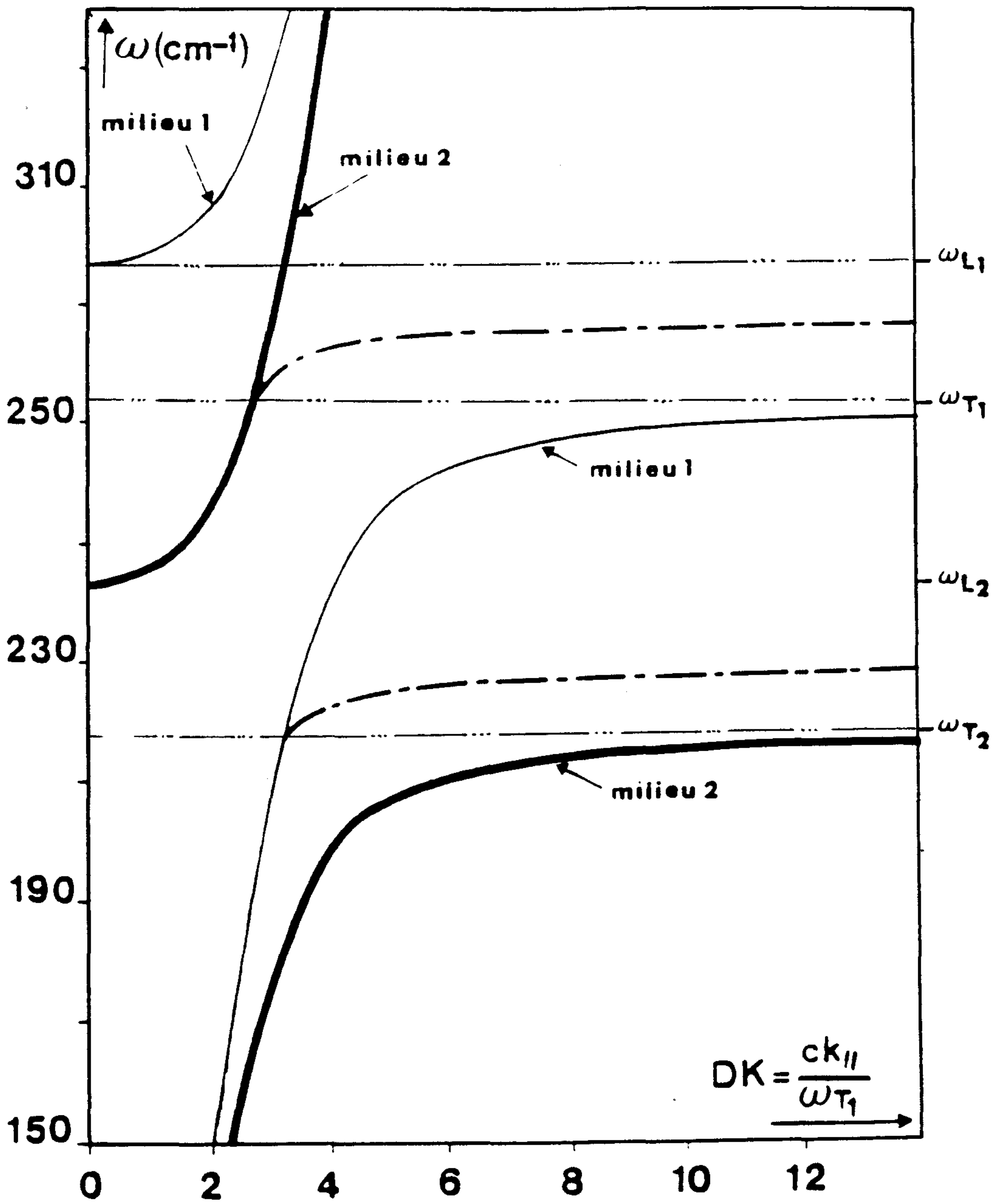


Figure II-6: *Dispersion des modes de polaritons pour l'interface entre deux diélectriques semi-infinis. Les courbes foncées (respectivement fines) représentent les limites des bandes de volume du matériau de type* GaP *(respectivement de type InAs).* ω_{T1} *(respect.* ω_{T2}*) définit la limite supérieure de la pemière mini-bande de InAs (respect. de GaP). Tandis que les branches en traits discontinus, correspondent aux fréquences des modes de polaritons d'interface (polarisation P).*



<u>Figure II-7</u>: *Dispersion des modes de polaritons pour l'interface GaAs/InAs. Les légendes des courbes restent identiquement les mêmes que celles de la figure II-6.*

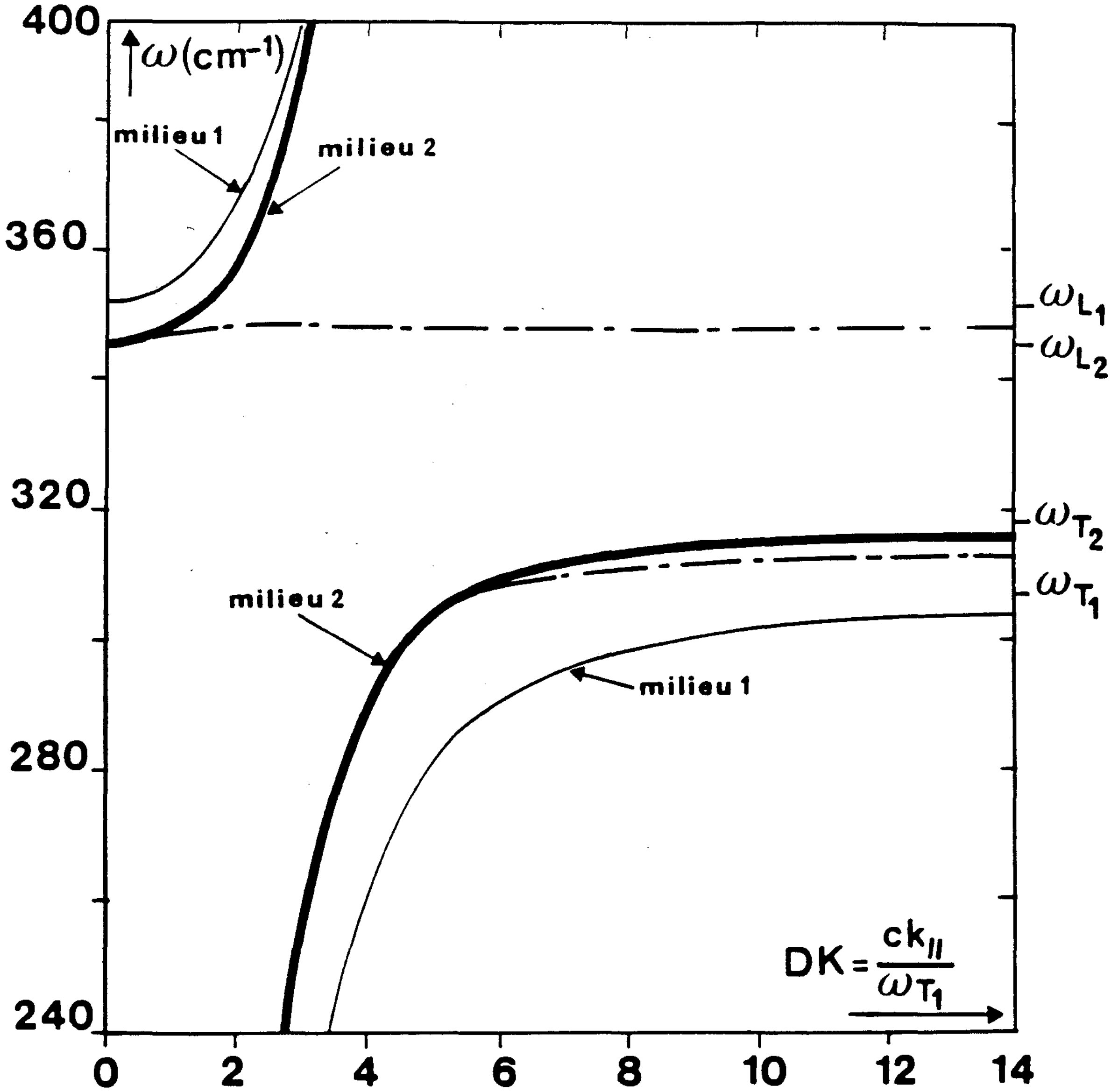


Figure II-8: *Dispersion des modes de polaritons pour l'interface InP/Al Sb. Les légendes des courbes restent identiquement les mêmes que celles de la figure II-6.*

II-6-2) Polaritons de "sandwich"

Considérons à présent une lame mince diélectrique , isotrope d'épaisseur $d = 2\,L$ insérée entre deux autres diélectriques semi - infinis différents de manière à créer deux interfaces. Repérons les trois matériaux de notre système composite et choisissons la position des interfaces comme l'indique la figure (II - 4).

Les deux milieux semi - infinis et la lame sont caractérisés par leurs fonctions diélectrique $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_3(\omega)$ et $\varepsilon_2(\omega)$, respectivement. Les polaritons confinés à l'intérieur de la lame mince sont fournis par les pôles des fonctions réponses [calculées au paragraphe (II-5)], c'est-à-dire, les fréquences $\omega(k_{//})$ pour lesquelles le terme

$$W(k_{//}, \omega) = F_1 F_3 + F_2 (F_1 + F_3) \coth(\alpha_2 d) + F_2^2 ,$$

commun aux dénominateurs de toutes les fonctions réponses, est nul.
Rappelons que (voir les équations (I-5-22) et (I-5-23)) :

$$F_i = -\frac{\omega^2}{c^2} \frac{\varepsilon_i(\omega)}{\alpha_i(k_{//}, \omega)} \text{ ; pour la polarisation P}$$

où $$\alpha_i^2(k_{//}, \omega) = k_{//}^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_i(\omega), \qquad (i = 1, 2, 3)$$

pour le milieu d'indice i.
Ici, $k_{//}$ représente la composante parallèle aux interfaces du vecteur d'onde caractéristique du champ électrique.

Précisons que, selon le type de polarisation du champ électrique envisagée, cette condition d'apparition des modes localisés se met sous la forme de l'équation (II-5-18) (polarisation-S) ou sous la forme de l'équation (II-5-19) (polarisation - P). Dans les deux cas, les fonctions diélectriques $\varepsilon_i(\omega)$ sont données par l'équation (II-6-1).

Notons que, dans notre étude, $\alpha_1(k_{//}, \omega)$ et $\alpha_3(k_{//}, \omega)$ sont pris réels car les amplitudes du champ électrique décroissent exponentiellement dans les milieux 1 et 3, dans la direction de l'axe x_3. En prenant ces quantités nulles, nous définissons les limites des bandes de volume de ces deux milieux semi - infinis. Tandis que pour les polaritons confinés, qui sont des modes se propageant dans la lame mince, $\alpha_2(k_{//}, \omega)$ est imaginaire. Pour les modes d'interface (modes localisés aux deux interfaces $x_3 = \pm L$), les α_i (i=1, 2 et 3) sont tous réels. Ces modes apparaissent dans la région où les gaps des trois matériaux sont disjoints.

Ainsi, par le truchement d'un traitement numérique de ces résultats analytiques, nous déterminons les polaritons localisés à l'intérieur de la lame diélectrique tout comme les modes de polaritons d'interface (dans le cas de la polarisation P). Les courbes des figures (II-9 à II-11) illustrent les résultats de cette démarche. Pour y aboutir, nous avons utilisé les valeurs des grandeurs physiques consignées dans le tableau I où l'indice i prend les valeurs 1, 2 et 3.

Les figures (II-9) montrent les courbes de dispersion des polaritons pour un système "sandwich" symétrique de type : (a) GaAs /InAs/GaAs et (b) InAs/GaAs/InAs. Dans les deux cas, l'épaisseur de la lame mince diélectrique [InAs en (II-9 a) et Ga As en (II-9 b)] est prise égale à 1 µm. Les modes confinés dans la lame mince sont représentés par la courbe en pointillés, tandis que les modes d'interface sont illustrés par les courbes en traits discontinus avec des points. L'aire comprise entre ω_{T1} et la branche épaisse (la plus basse) définit la première mini-bande des substrats (milieux diélectriques semi-infinis), tandis que la branche épaisse partant de ω_{L1} indique la limite inférieure de la deuxième mini-bande de ceux-ci. Les modes d'interface apparaissent dans les intervalles de fréquences (ω_{T1}, ω_{L1}) et (ω_{T2}, ω_{L2}) et les modes de polaritons confinés (ou modes guidés) dans la lame se trouvent soit dans la bande de volume supérieure de celle - ci (voir figure II - 9 a où $\omega_{T2}<\omega_{L2}<\omega_{T1}<\omega_{L1}$), soit dans la bande de volume inférieure (figureII-9a, où $\omega_{T1}<\omega_{L1}<\omega_{T2}<\omega_{L2}$). Ces derniers se prolongent dans le gap du film mince sous la forme de modes d'interface pour $\frac{k_{//}}{\omega_{T1}} \geq 3.2$ dans la figure. II-9a et pour $\frac{k_{//}}{\omega_{T1}} \geq 4.9$ dans la figure II-9b.

Les résultats pour la double interface InAs/GaAs/InAs sont illustrés par les courbes des figures (II-10) qui gardent les mêmes légendes que précédemment. En fixant l'épaisseur de la lame mince à 1µm, nous obtenons quatre modes d'interface comme dans les cas précédents, et deux modes confinés dans le film mince dont l'un au dessous de ω_{T2} et l'autre au-dessus de ω_{L2} (figure II - 10 a où $\omega_{T1}<\omega_{T2}<\omega_{L2}<\omega_{L1}$). Plus précisément, ces derniers apparaissent dans les intervalles de fréquences (ω_{T1},ω_{T2}) et (ω_{L2}, ω_{L1}). Pour une épaisseur plus importante (d =13 µm), le nombre de modes de polaritons confinés augmente et les modes d'interface sont repoussés vers les fréquences ω_{T2} et de ω_{L2} (voir figure II-10 b).

L'étude du système "sandwich" asymétrique de type GaP/GaAs/InAs nous a conduit aux résultats traduits par les courbes de la figure (II-11) pour une épaisseur du film diélectrique égale à 13 µm. Notons l'apparition de deux modes confinés dans la lame mince et l'existence de quatre modes d'interface répartis dans les gaps du GaAs.

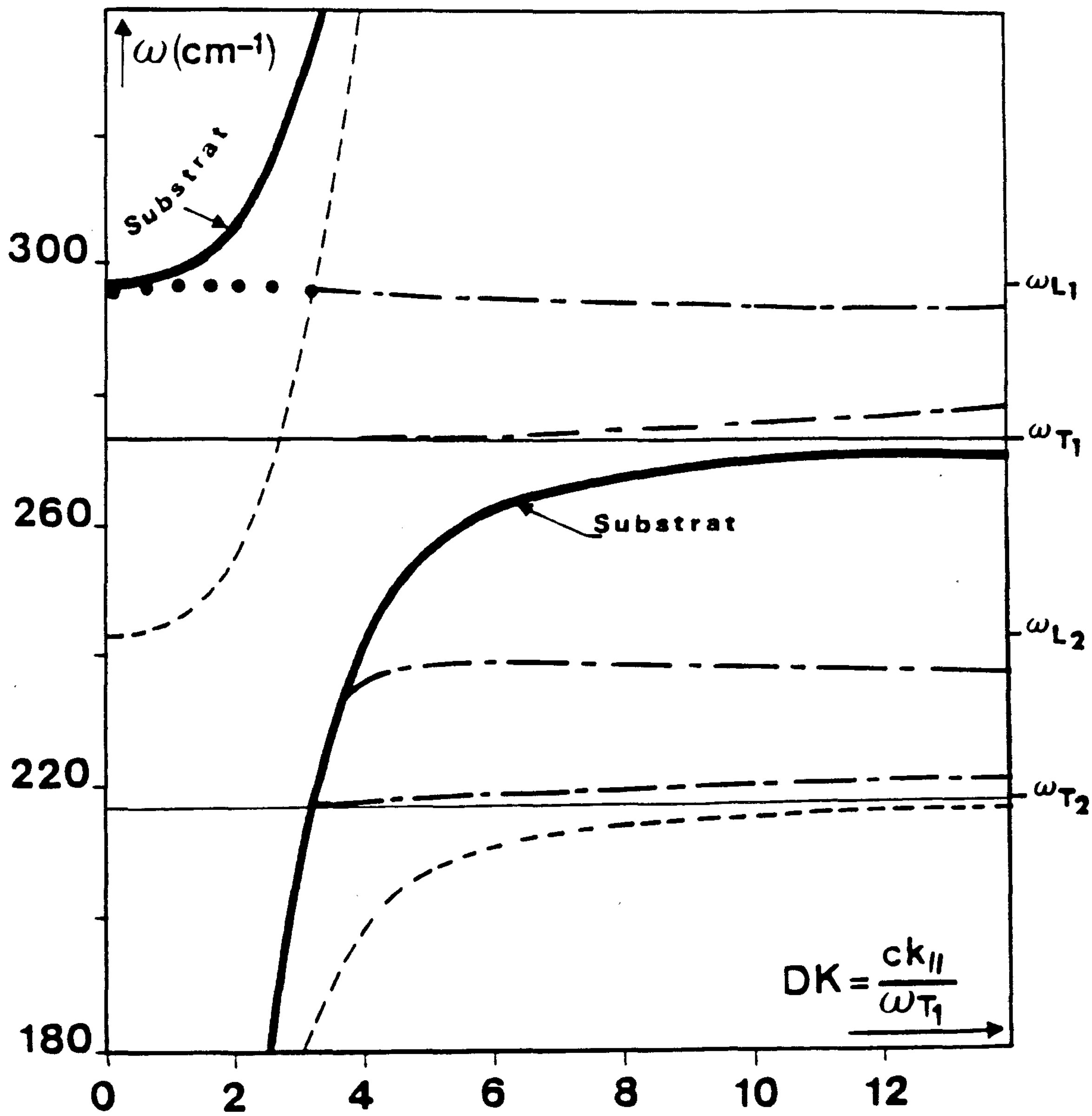


__Figure II-9a__: *Dispersion des modes de polaritons (de polarisation P) pour une lame mince diélectrique insérée entre deux autres diélectriques semi-infinis. Sur cette figure, sont représentées les variations de la fréquence des modes en fonction de la vitesse réduite $ck_{//}/\omega_{T_1}$ pour la double interface "GaAs/InAs/GaAs". Le paramètre c désigne la vitesse de la lumière dans le vide, $k_{//}$est la valeur du vecteur d'onde parallèle aux interfaces ; tandis que ω_{T_i}et ω_{L_i}définissent respectivement, les fréquences transverse et longitudinale des phonons optiques dans le matériau i (les indices i=1 et i=2 sont relatifs respectivement, au milieu de type GaAs et à la lame mince de InAs). L'épaisseur du film mince est prise égale à 1 μ. Les branches en traits épais représentent les limites des bandes de volume du substrat (GaAs). Celles en traits discontinus avec des points correspondent aux fréquences des polaritons d'interface et la ligne en pointillés indique les modes des polaritons confinés dans la lame insérée.*

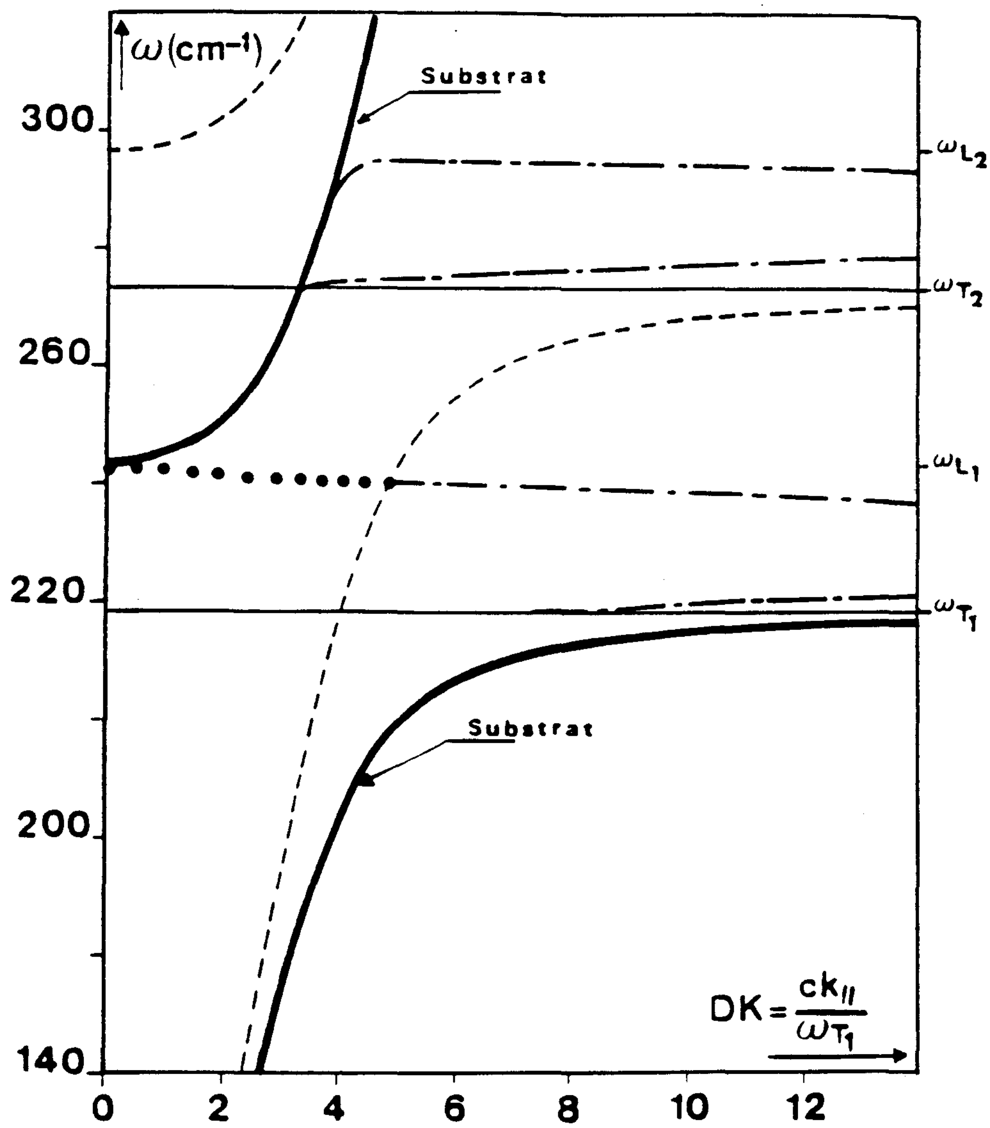


Figure II-9b: *Le système étudié est formé d'une lame mince de GaAs, d'épaisseur 1 μ, insérée entre deux substrats de InAs. Les légendes des courbes sont les mêmes que sur la figure II-9a.*

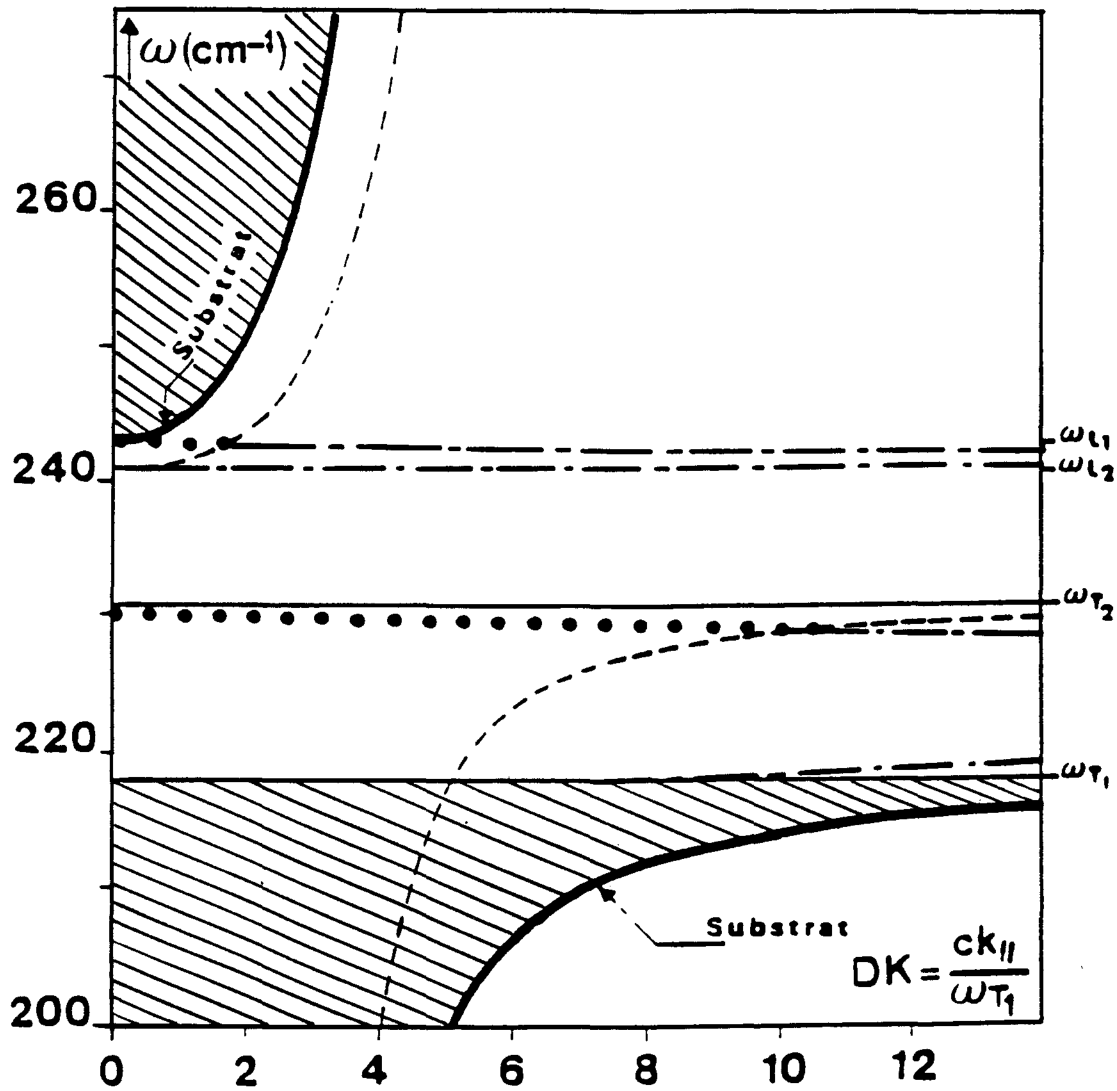


Figure II-10a: *Dispersion des modes de polaritons (de polarisation P) associés à la double interface "InAs/GaSb/InAs". L'épaisseur du film mince de GaSb est égale à 1 μ. Mêmes légendes que sur la figure II-9b.*

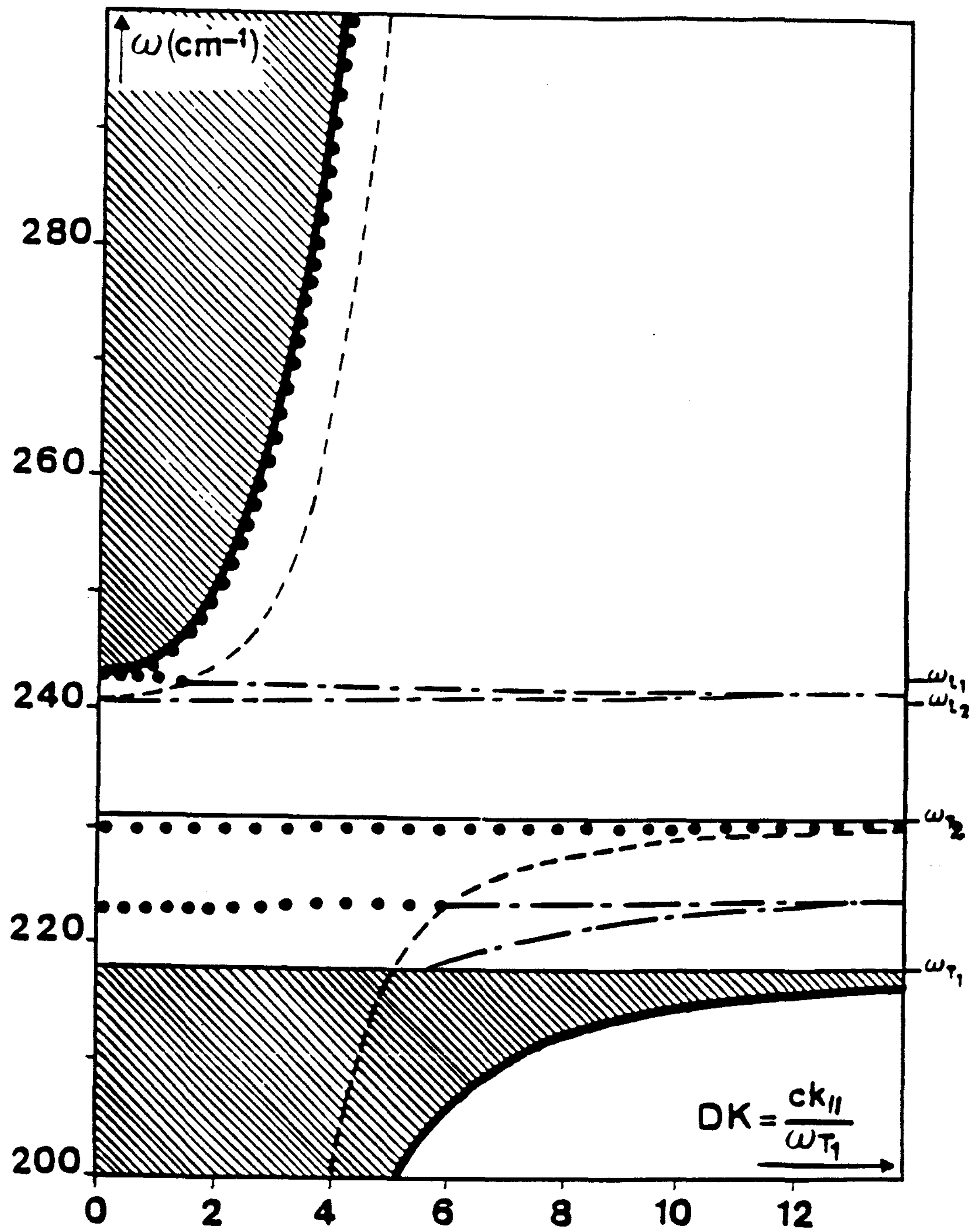
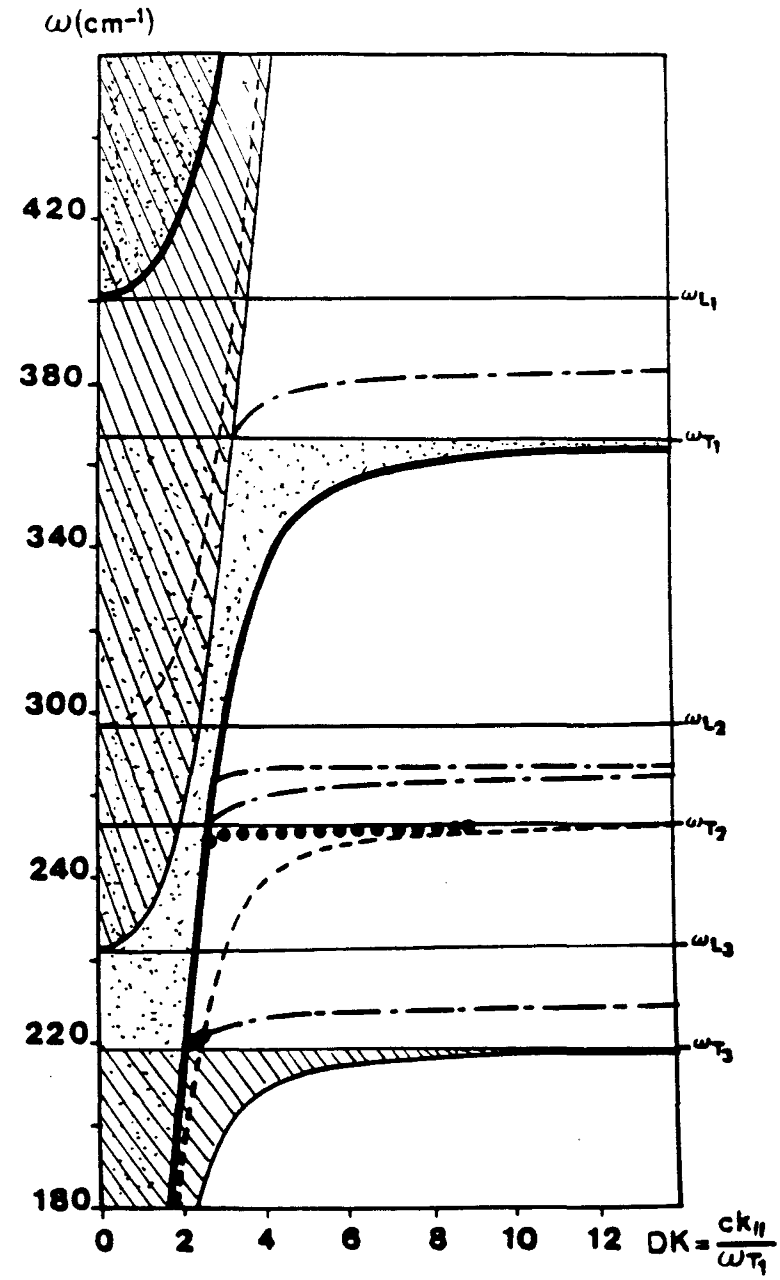


Figure II-10b: *Dispersion des modes de polaritons associés à la double interface InAs/GaSb/InAs. L'épaisseur du film mince de GaSb est égale à 1 3μ. Les zones hachurées représentent les bandes de volume des substrats (c'est-à-dire ici, le matériau InAs), alors que les traits discontinus avec des points indiquent les modes des phonon-polaritons d'interface. Les modes confinés dans la ame mince insérée (GaSb) sont illustrés par les courbes en pointillés.*



<u>Figure II-11</u>: *Dispersion des modes de polaritons associés au système "sandwich" asymétrique "GaP/GaAs/InAs". Lépaisseur de la couche mince est égale à 13 μ. Sur cette figure, sont représentées les variations de la fréquence des modes en fonction de la vitesse* $ck_{//}/\omega_{T1}$. *Le paramètre c désigne la vitesse de la lumière dans le vide,* $k_{//}$ *est la valeur du vecteur d'onde parallèle aux interfaces; tandis que* ω_{Ti} *et* ω_{Li} *définissent respectivement, les fréquences transverse et longitudinale des phonons optiques dans les matériaux i (les indices i=1, 2 et 3 sont relatifs respectivement, au substrat de type GaP, à la lame mince de GaAs et au deuxième substrat InAs. Les courbes en traits discontinus avec des points représentent les modes d'interface, tandis que la courbe en pointillés indique les modes confinés dans la lame mince.*

II-7) Conclusion

Sur la base de la théorie de réponse d'interface, nous avons construit les fonctions réponses de quelques systèmes composites, en l'occurrence : diélectrique semi-infini avec surface libre, lame diélectrique mince, interface entre deux diélectriques semi-infinis, film mince inséré entre deux diélectriques semi-infinis. De ces fonctions réponses, nous avons déduit les relations de dispersion des polaritons qui nous ont permis d'avoir les courbes de dispersion et les modes d'interface des polaritons et de mettre en évidence l'existence des modes de polaritons localisés dans le système "sandwich".

Une partie des courbes de dispersion auxquelles nous avons abouti (figures II-6 et II-7) sont en parfait accord avec celles déjà obtenues par P. Halevi [21,24] par une autre méthode.

L'examen des figures (II-10) et (II-11) met en relief une dépendance du nombre de modes confinés (cas du système "sandwich") avec l'épaisseur de la lame mince insérée entre les deux milieux semi - infinis et le choix du diélectrique fini. Nos résultats relatifs à ce système(symétrique ou asymétrique) nous permettent de noter l'existence de quatre modes d'interface quel que soit le type de matériaux étudiés et quelle que soit l'épaisseur de la lame mince insérée entre les deux diélectriques semi-infinis.

A l'exception des figures II-6 et II-7, les résultats présentés dans ce chapitre dont une partie a déjà l'objet d'une publiction , sont originaux.

Notons que l'appréciation de la dispersion des polaritons est extrêmement importante pour la compréhension des propriétés optiques des films diélectriques [25] entre autres. A cet égard, des mesures expérimentales directes de telles dispersions ont été faites par diffusion Raman [26-28], ainsi que par spectroscopie infra - rouge [29-31].

Un cas particulier intéressant des structures de double - interface étudiées ici est le film mince. Ce système a déjà fait l'objet d'importantes investigations [25,26,32] tant théoriques qu'expérimentales. Ceci a permis d'introduire la notion de polaritons d'onde guidée et d'en étudier la dispersion (voir par exemple la référence [26]).

Appendice A

A-1) Interface entre deux milieux dielectriques isotropes semi-infinis

Substituant dans les équations [(II-3-4) à (II-3-7)] F_1 et F_2 par leurs équivalents donnés par les équations (I- 4-22) et (I- 4-23) et utilisant les relations (I-4-13), (I-4-14) et (I-4-20), nous obtenons les expressions suivantes des composantes $g_{22}, g_{11}, g_{13}, g_{31}, g_{33}$ de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ associée à l'interface entre deux milieux diélectriqus semi-infinis :

$$g_{22}(k_{//}, \omega/x_3,x'_3) = -\frac{1}{2\alpha_2}\left(\exp(-\alpha_2 \, |x_3 - x'_3|) - \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} \exp[-\alpha_2(x_3 + x'_3)] \right),$$
$$x_3 > 0, x'_3 > 0, \qquad \text{(A-1a)}$$

$$= -\frac{1}{\alpha_1 + \alpha_2} \exp(\alpha_1 x_3 - \alpha_2 x'_3), \qquad x_3 < 0, x'_3 > 0; \qquad \text{(A-1b)}$$

$$g_{11}(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = \frac{c^2 \alpha_2}{2\omega^2 \varepsilon_2} \left(\exp(-\alpha_2 \, |x_3 - x'_3|) - \frac{\alpha_2 \varepsilon_1 - \alpha_1 \varepsilon_2}{\alpha_2 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_2} \exp[-\alpha_2(x_3 + x'_3)] \right)$$
$$x_3 > 0, x'_3 > 0, \qquad \text{(A-2a)}$$

$$= \frac{c^2 \alpha_1 \alpha_2}{\omega^2 (\alpha_2 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_2)} \exp(\alpha_1 x_3 - \alpha_2 x'_3), \qquad x_3 < 0, x'_3 > 0;$$
$$\text{(A-2b)}$$

$$g_{13}(k_{//},\omega/x_3,x'_3) = \frac{ik_{//} c^2}{2\omega^2 \varepsilon_2}$$
$$\times \left(\exp(-\alpha_2 \, |x_3 - x'_3|) \, \mathrm{sgn}(x_3 - x'_3) + \frac{\alpha_2 \varepsilon_1 - \alpha_1 \varepsilon_2}{\alpha_2 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_2} \exp[-\alpha_2(x_3 + x'_3)] \right),$$
$$x_3 > 0, x'_3 > 0; \qquad \text{(A-3a)}$$

$$g_{13}(k_{//},\omega/x_3,x_3') = \frac{ik_{//}\, c^2\, \alpha_1}{\omega^2\,(\alpha_2\,\varepsilon_1 + \alpha_1\,\varepsilon_2)}\, \exp(\alpha_1 x_3 - \alpha_2 x_3'), \qquad x_3 < 0, x_3' > 0; \quad \text{(A-3b)}$$

$$g_{31}(k_{//},\omega/x_3,x_3') = \frac{ik_{//}\, c^2}{2\,\omega^2\,\varepsilon_2}$$
$$\times \left(\exp(-\alpha_2 \,|\, x_3 - x'_3 \,|)\ \mathrm{sgn}(x_3 - x'_3) - \frac{\alpha_2\,\varepsilon_1 - \alpha_1\,\varepsilon_2}{\alpha_2\,\varepsilon_1 + \alpha_1\,\varepsilon_2} \exp\,[-\,\alpha_2(x_3 + x'_3)] \right),$$
$$x_3 > 0, x_3' > 0; \quad \text{(A-4a)}$$

$$= \frac{ik_{//}\, c^2\, \alpha_1}{\omega^2\,(\alpha_2\,\varepsilon_1 + \alpha_1\,\varepsilon_2)}\, \exp(\alpha_1 x_3 - \alpha_2 x_3'), \qquad x_3 < 0, x_3' > 0; \quad \text{(A-4b)}$$

$$g_{33}(k_{//},\omega/x_3,x_3') = \frac{c^2}{\omega^2\,\varepsilon_2}\, \delta(x_3 - x_3')$$
$$- \frac{k_{//}^2\, c^2}{2\,\omega^2\,\alpha_2\,\varepsilon_2} \left[\exp(-\,\alpha_2 \,|\, x_3 - x'_3 \,|) + \frac{\alpha_2\,\varepsilon_1 - \alpha_1\,\varepsilon_2}{\alpha_2\,\varepsilon_1 + \alpha_1\,\varepsilon_2} \exp\,[-\,\alpha_2(x_3 + x'_3)] \right],$$
$$x_3 > 0, x_3' > 0; \quad \text{(A-5a)}$$

$$= \frac{k_{//}^2\, c^2\, \alpha_1}{\omega^2\,(\alpha_2\,\varepsilon_1 + \alpha_1\,\varepsilon_2)}\, \exp(\alpha_1 x_3 - \alpha_2 x_3'), \qquad x_3 < 0, x_3' > 0. \quad \text{(A-5b)}$$

Les composantes $g_{\mu\gamma}$ (μ, γ = 1,2 et 3) pour $x_3 \leq 0$ et $x_3' < 0$ peuvent être aisément déduites à partir de celles pour $x_3 > 0$ et $x_3' > 0$ en permutant simplement les indices 2 et 1 et changeant x_3 en $-x_3'$ et x_3' en $-x_3$. De façon analogue, les éléments $g_{\mu\gamma}$ pour $x_3 > 0$ et $x_3' < 0$ peuvent aussi être déduits de ceux pour lesquels $x_3 < 0$ et $x_3' > 0$ par simple permutation des indices 2 et 1 et changement des $-x_3$ en x_3 et x_3'.

A-2) <u>Film mince diélectrique entre deux autres diélectriques semi-infinis</u>

Nous donnons, ci-dessous, la liste complète des composantes $g_{\mu\gamma}$ (μ, γ = 1, 2, 3) de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ de ce système composite (système "sandwich").

i) <u>Cas où le point</u> (x_3) *<u>et le point d'observation</u>* (x'_3) *<u>se situent dans le diélectrique</u>* **(1)**

$$g_{22}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{1}{2\alpha_1}\left[\exp(-\alpha_1 |x_3 - x'_3|) - \exp[\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)]\right]$$

$$- \frac{\alpha_3 + \alpha_2 \,\mathrm{ch}(2\alpha_2 L)}{\alpha_1 \alpha_3 + \alpha_2(\alpha_1 + \alpha_3)\coth(2\alpha_2 L) + \alpha_2^2} \exp[\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)] , \qquad \text{(A-6a)}$$

$$g_{11}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{\alpha_1 c^2}{2\omega^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon_1}\left[\exp(-\alpha_1|x_3 - x'_3|) - \exp[\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)]\right]\right.$$

$$\left. + \frac{2[\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2(\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3)\coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2)\varepsilon_2^2} \exp[\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)]\right\},$$

(A-6b)

$$g_{13}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{ik_{//}c^2}{2\omega^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon_1}\left[\exp(-\alpha_1|x_3 - x'_3|)\,\mathrm{sgn}(x_3 - x'_3) - \exp[\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)]\right]\right.$$

$$\left. + \frac{2[\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2(\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3)\coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2)\varepsilon_2^2} \exp[\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)]\right\}$$

(A-6c)

$$g_{31}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{ik_{//}c^2}{2\omega^2}\left\{\frac{1}{\varepsilon_1}\left[\exp(-\alpha_1|x_3 - x'_3|)\,\mathrm{sgn}(x_3 - x'_3) + \exp[\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)]\right]\right.$$

$$\left. - \frac{2[\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2(\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3)\coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2)\varepsilon_2^2} \exp[\alpha_1(x_3 + x'_3 + 2L)]\right\}$$

(A-6d)

$$g_{33}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{c^2}{\omega^2 \varepsilon_1} \delta(x_3 - x'_3)$$

$$- \frac{k_{//}^2 c^2}{2\alpha_1 \omega^2} \Big\{ \frac{1}{\varepsilon_1} \left[\exp(-\alpha_1 |x_3 - x'_3|) + \exp[\alpha_1 (x_3 + x'_3 + 2L)]\right]$$

$$- \frac{2\,[\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2)\, \varepsilon_2^2} \exp[\alpha_1 (x_3 + x'_3 + 2L)] \Big\}$$

(A-6e)

ii) ***Cas où les points d'excitation et d'observation se situent respectivement dans les diélectriques** (3) **et** (1) :*

$$g_{22}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = - \frac{\alpha_2 \exp[-\alpha_3 (x_3 - L)] \exp[\alpha_1 (L + x'_3)]}{[\alpha_1\alpha_3 + \alpha_2 (\alpha_1 + \alpha_3) \coth(2\alpha_2 L) + \alpha_2^2]\, \mathrm{sh}(2\alpha_2 L)} , \qquad \text{(A-7a)}$$

$$g_{11}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{c^2}{\omega^2\, \mathrm{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\alpha_1 \alpha_3 \varepsilon_2 \exp[-\alpha_3 (x_3 - L)] \exp[\alpha_1 (L + x'_3)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1\alpha_3/\alpha_2)\, \varepsilon_2^2} , \qquad \text{(A-7b)}$$

$$g_{13}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{ik_{//} c^2}{\omega^2\, \mathrm{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\alpha_3 \varepsilon_2 \exp[-\alpha_3 (x_3 - L)] \exp[\alpha_1 (L + x'_3)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2)\, \varepsilon_2^2} , \qquad \text{(A-7c)}$$

$$g_{31}(k_{//}, \omega/x_3, x'_3) = \frac{ik_{//} c^2}{\omega^2\, \mathrm{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\alpha_1 \varepsilon_2 \exp[-\alpha_3 (x_3 - L)] \exp[\alpha_1 (L + x'_3)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2)\, \varepsilon_2^2} , \qquad \text{(A-7d)}$$

$$g_{33}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = -\frac{1}{\alpha_3^2}\delta(x_3 - x_3') - \frac{k_{//}^2 c^2}{\omega^2 \operatorname{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\varepsilon_2 \exp[-\alpha_3 (x_3 - L)] \exp[\alpha_1 (L + x'_3)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2) \varepsilon_2^2} . \qquad \text{(A-7e)}$$

iii) <u>*Cas où le point source est dans le diélectrique*</u> **(1)** <u>*et le point d'observation dans le diélectrique*</u> **(2) :**

$$g_{22}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = -\frac{\exp[\alpha_1 (x_3 + L)]}{[\alpha_1 \alpha_3 + \alpha_2 (\alpha_1 + \alpha_3) \coth(2\alpha_2 L) + \alpha_2^2] \operatorname{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \left\{[\alpha_3 + \alpha_2 \coth(2\alpha_2 L)] \operatorname{sh}[\alpha_2 (L - x_3')] + \frac{\alpha_2}{\operatorname{sh}(2\alpha_2 L)} \operatorname{sh}[\alpha_2 (L + x_3')]\right\},$$

$$x_3 \leq -L, \quad -L \leq x_3' \leq L; \qquad \text{(A-8a)}$$

$$g_{22}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = -\frac{\exp[\alpha_1 (L + x'_3)]}{[\alpha_1 \alpha_3 + \alpha_2 (\alpha_1 + \alpha_3) \coth(2\alpha_2 L) + \alpha_2^2] \operatorname{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \left\{[\alpha_3 + \alpha_2 \coth(2\alpha_2 L)] \operatorname{sh}[\alpha_2 (L - x_3')] + \frac{\alpha_2}{\operatorname{sh}(2\alpha_2 L)} \operatorname{sh}[\alpha_2 (L + x_3)]\right\},$$

$$-L \leq x_3 \leq L, \quad x_3' \leq -L; \qquad \text{(A-8b)}$$

$$g_{11}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = \frac{c^2}{\omega^2 \operatorname{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\alpha_1 \exp[\alpha_1 (x_3 + L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2) \varepsilon_2^2}$$

$$\times \left\{[\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)] \operatorname{sh}[\alpha_2 (L - x_3')] + \frac{\alpha_3 \varepsilon_2}{\operatorname{sh}(2\alpha_2 L)} \operatorname{sh}[\alpha_2 (L + x_3')]\right\},$$

$$x_3 \leq -L, \quad -L \leq x_3' \leq L; \qquad \text{(A-9a)}$$

$$g_{11}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = \frac{c^2}{\omega^2 \operatorname{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\alpha_1 \exp[\alpha_1(x_3' + L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2) \varepsilon_2^2}$$

$$\times \left\{ [\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)] \operatorname{sh}[\alpha_2 (L - x_3)] + \frac{\alpha_3 \varepsilon_2}{\operatorname{sh}(2\alpha_2 L)} \operatorname{sh}[\alpha_2 (L + x_3)] \right\},$$

$$-L \leq x_3 \leq L, \; x_3' \leq -L; \qquad \text{(A-9b)}$$

$$g_{13}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = -\frac{ik_{//}c^2}{\omega^2 \alpha_2 \operatorname{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\alpha_1 \exp[\alpha_1(x_3 + L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2) \varepsilon_2^2}$$

$$\times \left\{ [\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)] \operatorname{ch}[\alpha_2 (L - x_3')] - \frac{\alpha_3 \varepsilon_2}{\operatorname{sh}(2\alpha_2 L)} \operatorname{ch}[\alpha_2 (L + x_3')] \right\},$$

$$x_3 \leq -L; -L \leq x_3' \leq L; \qquad \text{(A-10 a)}$$

$$= \frac{ik_{//}c^2}{\omega^2 \operatorname{sh}(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\exp[(x_3' + L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2) \varepsilon_2^2}$$

$$\times \left\{ [\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)] \operatorname{sh}[\alpha_2 (L - x_3)] + \frac{\alpha_3 \varepsilon_2}{\operatorname{sh}(2\alpha_2 L)} \operatorname{sh}[\alpha_2 (L + x_3')] \right\},$$

$$-L \leq x_3 \leq L, \; x_3' \leq -L; \qquad \text{(A-10 b)}$$

$$g_{31}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = - \frac{ik_{//}c^2}{\omega^2 \ \text{sh}\,(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\exp[\alpha_1(x_3 + L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2) \varepsilon_2^2}$$

$$\times \left\{ [\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)] \ \text{sh}\,[\alpha_2 (L - x_3')] + \frac{\alpha_3 \varepsilon_2}{\text{sh}\,(2\alpha_2 L)} \text{sh}\,[\alpha_2 (L + x_3')] \right\},$$

$$x_3 \leq - L\,; - L \leq x_3' \leq L\,; \qquad \text{(A-11 a)}$$

$$= \frac{ik_{//}c^2}{\omega^2 \alpha_2 \ \text{sh}\,(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\alpha_1 \exp[\alpha_1(x_3' + L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2) \varepsilon_2^2}$$

$$\times \left\{ [\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)] \ \text{ch}\,[\alpha_2 (L - x_3)] - \frac{\alpha_3 \varepsilon_2}{\text{sh}\,(2\alpha_2 L)} \text{ch}\,[\alpha_2 (L + x_3)] \right\},$$

$$- L \leq x_3 \leq L\,; \quad x_3' \leq - L\,; \qquad \text{(A-11 b)}$$

$$g_{33}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = - \frac{1}{\alpha_1^2} \delta(x_3 - x_3') - \frac{k_{//}^2 c^2}{\alpha_2 \omega^2 \ \text{sh}\,(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\exp[\alpha_1(x_3 + L)]}{\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth(2\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3/\alpha_2) \varepsilon_2^2}$$

$$\times \left\{ [\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth(2\alpha_2 L)] \ \text{ch}\,[\alpha_2 (L - x_3')] - \frac{\alpha_3 \varepsilon_2}{\text{sh}\,(2\alpha_2 L)} \text{ch}\,[\alpha_2 (L + x_3')] \right\},$$

$$x_3 \leq - L\,; \quad - L \leq x_3' \leq L\,; \qquad \text{(A-12 a)}$$

$$g_{33}(k_{//}, \omega/x_3, x_3^{'}) = -\frac{1}{\alpha_2^2}\,\delta(x_3 - x_3^{'}) - \frac{k_{//}^2 c^2}{\alpha_2\,\omega^2\,\mathrm{sh}\,(2\alpha_2 L)}$$

$$\times \frac{\exp[\alpha_1(x_3^{'} + L)]}{\alpha_2\,\varepsilon_1\,\varepsilon_3 + \varepsilon_2\,(\alpha_3\,\varepsilon_1 + \alpha_1\,\varepsilon_3)\,\coth\,(2\alpha_2 L) + (\alpha_1\,\alpha_3/\alpha_2)\,\varepsilon_2^2}$$

$$\times\left\{\left[\alpha_2\,\varepsilon_3 + \alpha_3\,\varepsilon_2 \coth\,(2\,\alpha_2\,L)\right] \mathrm{ch}\,[\alpha_2\,(L - x_3)] - \frac{\alpha_3\,\varepsilon_2}{\mathrm{sh}\,(2\alpha_2 L)}\,\mathrm{ch}\,[\alpha_2\,(L + x_3)]\right\},$$

$$-L \leq x_3 \leq L\,, \quad x_3^{'} \leq -L\,. \qquad \text{(A-12b)}$$

iv) <u>*Cas où les points source et d'observation se situent dans la lame (2)*</u> :

$$g_{22}(k_{//}, \omega/x_3, x_3^{'}) = -\frac{1}{2\alpha_2}\Big\{ \exp(-\alpha_2\,|x_3 - x_3^{'}|)$$

$$-\frac{1}{\mathrm{sh}\,(2\alpha_2 L)}\left(\mathrm{ch}\,[\alpha_2\,(x_3 + x_3^{'})] - \exp(-2\alpha_2\,L)\,\mathrm{ch}\,[\alpha_2\,(x_3 + x_3^{'})]\right)\Big\}$$

$$-\frac{1}{2[\alpha_1\alpha_3 + \alpha_2\,(\alpha_1 + \alpha_3)\,\coth\,(2\,\alpha_2\,L) + \alpha_2^2]\;\mathrm{sh}^2\,(2\alpha_2\,L)}$$

$$\times\Big\{[\alpha_3 + \alpha_2 \coth(2\alpha_2 L)]\left(\mathrm{ch}[\alpha_2\,(x_3 + x'_3 - 2\,L)] - \mathrm{ch}[\alpha_2(x_3 - x'_3)]\right)$$

$$+ [\alpha_1 + \alpha_2 \coth(2\alpha_2 L)]\left(\mathrm{ch}[\alpha_2\,(x_3 + x'_3 + 2\,L)] - \mathrm{ch}\,[\alpha_2\,(x_3 + x_3^{'})]\right)$$

$$+ \frac{\alpha_2}{\mathrm{sh}(2\alpha_2 L)}\Big(\mathrm{ch}[\alpha_2\,(x_3 - x'_3 - 2\,L)] - 2\,\mathrm{ch}[\alpha_2\,(x_3 + x'_3)]$$

$$+ \mathrm{ch}[\alpha_2\,(x_3 + x'_3 - 2\,L)]\Big)\Big\}, \qquad \text{(A-13)}$$

$$g_{11}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = \frac{\alpha_2 c^2}{2\,\omega^2 \varepsilon_2}$$

$$\times\left\{ \exp(-\alpha_2 |x_3 - x_3'|) - \frac{1}{\mathrm{sh}\,(2\alpha_2 L)} \left(\mathrm{ch}\,[\alpha_2 (x_3 + x_3')] - \exp(-2\alpha_2 L)\, \mathrm{ch}\,[\alpha_2 (x_3 - x_3')] \right)\right\}$$

$$+ \frac{\alpha_1 \alpha_3 c^2}{2\,\omega^2 [\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth (2\,\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3 / \alpha_2)\, \varepsilon_2^2]\, \mathrm{sh}^2 (2\alpha_2 L)}$$

$$\times\left\{ \frac{\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth (2\,\alpha_2 L)}{\alpha_3} \left(\mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 - 2\,L)] - \mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)]\right)\right.$$

$$+ \frac{\alpha_2 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_2 \coth (2\,\alpha_2 L)}{\alpha_1} \left(\mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 + 2\,L)] - \mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)]\right)$$

$$\left. + \frac{\varepsilon_2}{\mathrm{sh}(2\alpha_2 L)} \left(\mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 - 2\,L)] - 2\,\mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)] + \mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 + 2\,L)]\right)\right\},$$

(A-14)

$$g_{13}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = \frac{ik_{//} c^2}{2\omega^2 \varepsilon_2} \left\{\mathrm{sgn}\,(x_3 - x'_3)\ \exp(-\alpha_2 |x_3 - x'_3|)\right.$$

$$\left. - \frac{1}{\mathrm{sh}\,(2\alpha_2 L)} \left(\mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)] + \exp(-2\alpha_2 L)\, \mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)]\right)\right\}$$

$$+ \frac{ik_{//}\, \alpha_1 \alpha_3 c^2}{2\,\omega^2 \alpha_2 [\alpha_2 \varepsilon_1 \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth (2\,\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3 / \alpha_2)\, \varepsilon_2^2]\, \mathrm{sh}^2 (2\alpha_2 L)}$$

$$\times\left\{\frac{\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth (2\,\alpha_2 L)}{\alpha_3} \left(\mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 - 2\,L)] + \mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)]\right)\right.$$

$$+ \frac{\alpha_2 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_2 \coth (2\,\alpha_2 L)}{\alpha_1} \left(\mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 + 2\,L)] + \mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)]\right)$$

$$\left. - \frac{\varepsilon_2}{\mathrm{sh}(2\alpha_2 L)} \left(\mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 - 2\,L)] + 2\,\mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)] + \mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 + 2\,L)]\right)\right\},$$

(A-15)

$$g_{31}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = \frac{ik_{//}c^2}{2\omega^2 \varepsilon_2} \Big\{ \mathrm{sgn}\,(x_3 - x'_3)\ \exp(-\alpha_2 |x_3 - x'_3|)$$

$$+ \frac{1}{\mathrm{sh}\,(2\alpha_2 L)} \Big(\mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)] - \exp(-2\alpha_2 L)\, \mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)] \Big) \Big\}$$

$$- \frac{ik_{//}\, c^2 \alpha_1 \alpha_3}{2\,\omega^2 \alpha_2 [\alpha_2 \varepsilon_1\ \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth (2\,\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3 / \alpha_2)\, \varepsilon_2^2]\, \mathrm{sh}^2 (2\alpha_2 L)}$$

$$\times \Big\{ \frac{\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth (2\,\alpha_2 L)}{\alpha_3} \Big(\mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 - 2L)] - \mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)] \Big)$$

$$+ \frac{\alpha_2 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_2\ \coth (2\,\alpha_2 L)}{\alpha_1} \Big(\mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 + 2L)] - \mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)] \Big)$$

$$+ \frac{\varepsilon_2}{\mathrm{sh}(2\alpha_2 L)} \Big(\mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 - 2L)] - 2\, \mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)] + \mathrm{sh}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 + 2L)] \Big) \Big\},$$

(A-16)

$$g_{33}(k_{//}, \omega/x_3, x_3') = \frac{c^2}{\omega^2 \varepsilon_2} \delta(x_3 - x'_3) - \frac{k_{//}^2 c^2}{2\,\omega^2 \alpha_2 \varepsilon_2} \Big\{ \exp(-\alpha_2 |x_3 - x'_3|)$$

$$+ \frac{1}{\mathrm{sh}\,(2\alpha_2 L)} \Big(\mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)] + \exp(-2\alpha_2 L)\, \mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)] \Big) \Big\}$$

$$+ \frac{k_{//}\, c^2 \alpha_1 \alpha_3}{2\,\omega^2 \alpha_2^2 [\alpha_2 \varepsilon_1\ \varepsilon_3 + \varepsilon_2 (\alpha_3 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_3) \coth (2\,\alpha_2 L) + (\alpha_1 \alpha_3 / \alpha_2)\, \varepsilon_2^2]\, \mathrm{sh}^2 (2\alpha_2 L)}$$

$$\times \Big\{ \frac{\alpha_2 \varepsilon_3 + \alpha_3 \varepsilon_2 \coth (2\,\alpha_2 L)}{\alpha_3} \Big(\mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 - 2L)] + \mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)] \Big)$$

$$+ \frac{\alpha_2 \varepsilon_1 + \alpha_1 \varepsilon_2\ \coth (2\,\alpha_2 L)}{\alpha_1} \Big(\mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3 + 2L)] + \mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3)] \Big)$$

$$- \frac{\varepsilon_2}{\mathrm{sh}(2\alpha_2 L)} \Big(\mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 - 2L)] + 2\, \mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 + x'_3)] + \mathrm{ch}[\alpha_2 (x_3 - x'_3 + 2L)] \Big) \Big\}.$$

(A-17)

Bibliographie du chapitre II

[1] D. L. Mills and E. Burstein, Rep. Progr. Phys. , 37 (1974) 817.

[2] A. A. Maradudin and Zierau, Phys. Rev., B14 (1976) 484.

[3] G. Borstel and H. J. Falge, in: "Electromagnetic Surface Modes", Ed. A. D. Boardman (Wiley & Sons Ltd, New York, 1982).

[4] M. Born and K. Huang, in: "Dynamical Theory of Crystal Lattices" (Clarendon Press, Oxford, 1954).

[5] C. H. Henry and J. J. Hopfield, Phys. Rev. Lett., 15 (1965) 964.

[6] M. L. Bah, Rapport de Stage de Diplôme d'Etudes Approfondies en physique de la Matière et du Rayonnement (Université de Lille I, France, 1988).

[7] L. Dobrzynski, Phys. Rev., B 37 (1988) 1079.

[8] M. G. Cottam and A. A. Maradudin, in: " Surface Excitations", Vol. 9 vol. Modern Problems in Condensed Matter Sciences (North - Holland, Amsterdam, 1986).

[9] A. A. Maradudin and D. L. Mills, Phys. Rev. , B11 (1975) 1392.

[10] M. L. Bah, A. Akjouj and L. Dobrzynski, Surf. Sci. Rep., 16 (1992) 95.

[11] D. L. Mills, A. A. Maradudin and E. Burstein,Phys. Rev. Lett., 21 (1968) 1178.

[12] D. L. Mills, A. A. Maradudin and E. Burstein, in: "Light Scattering Spectra of Solids", Ed. G. B. Wright (Springer, New York,1969) 399.

[13] B. J. Bennet, A. A. Maradudin and L. R. Swanson, Ann. Phys. (NY), 71 (1972) 357.

[14] D. L. Mills, Solid State Commun., 24 (1977) 669.

[15] **L. Bonsall and A. A. Maradudin,** J. Appl. Phys., 49 (1978) 253.

[16] **A. A. Maradudin,** Surface Wave, in: "Modern Problems of Surface Physics", Ed. I. J. Lalov (Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, 1981) p.11.

[17] **A. A. Maradudin,** in: "Surface Polaritons", Vol.1 of Modern Problems in Condensed Matter Sciences (North-Holland, Amsterdam, 1982).

[18] **J., R. Loudon and D. R. Tilley,** J. Phys., C7 (1974) 3547.

[19] **E. Burstein, A. Harstein, J. Schoenwald, A. A. Maradudin, D.L. Mills and R. F. Wallis,** in: " Polaritons" (Pergamon, New York, 1974) 89.

[20] **B. Djafari - Rouhani and L. Dobrzynski,** Solid State Communications, 62 (1987) 609.

[21] **P. Halevi,** Optics Communications, 20 (1977) 167.

[22] **M. S. Kushwaha and P. Halevi,** Solid State Communications, 64 (1987) 1405.

[23] **E. Burstein** , in: "Phonons and Phonon Interactions", ed. by T. A Bak (Benjamin, New York, 1964) 296.

[24] **P. Halevi,** Surf. Sci.,76 (1978) 64.

[25] **E. A. Vinogradov,** Phys. Rep., 217 (1992) 159.

[26] **S. Ushioda and R. Loudon,** Raman Scattering by Surface Polaritons, in : "Surface Polaritons, Electromagnetic Waves at Surfaces and Interfaces", eds. V. M. Agranovich and D. L. Mills (North - Holland, Amsterdam, 1982) 585.

[27] **J. B. Valdes, G. Mattei and S. Ushioda,** Solid State Communications,27 (1978) 1089.

[28] **V. N. Denisov, B. N. Marvin and V. B. Podobedort,** Hyper - Raman Scattering by vibrational Excitations,in Crystals, Glasses, and Liquids, Phys. Rep., 151 (1987) 1.

[29] **D. N. Mirlin,** Surface Phonon polaritons in dielectric and semi - conductors, in : "Surface Polaritons, Electromagnetic Waves at Surfaces and Interfaces", eds. M. Agranovich and D. L. Mills (North - Holland, Amsterdam, 1982) 3.

[30] **H. J. Falge, A. Otto** and **W. Sohler,** Dispersion of Surface and Bulk Phonon - Polaritons on a Quartz Measured by Attenuated Total Reflection, Phys. Status Solidi, 63 (1974) 259.

[31] **G. Borstel, H. J. Falge** and **A. Otto,** Surface and Bulk Phonon - Polaritons Observed by Attenuated Total Reflection, Solid State Physics, 74 (Springer, Berlin, 1974) 107.

[32] **Alexei A. Maradudin,** Surface Waves, Festkörperprobleme (Advances in Solid State Physics, Vol. XXI, Treusch (ed.), Vieweg, Braunschweig, (1981) 25.

Chapitre III

CHAPITRE III

POLARITONS
DANS LES SUPER-RESEAUX DIELECTRIQUES

III - 1) Introduction

Dans le présent chapitre, nous nous intéressons à l'étude théorique des polaritons dans les super-réseaux diélectriques à deux couches. Les caractéristiques de ces quasi-particules, se modifiant considérablement en fonction des perturbations des systèmes composites (création de surfaces ou d'interfaces), ont été déjà traitées à travers un certain nombre de travaux résumés dans plusieurs revues [1 - 9]. Les modes de polaritons [3,5,10] qui se propagent dans le volume du super-réseau forment les bandes de volume. Celles-ci sont séparées par des bandes interdites ou minigaps où les modes localisés (modes de surface ou d'interface) peuvent exister.

L'utilisation de la théorie générale de réponse d'interface [11,12] nous permettra de construire les expressions analytiques des fonctions réponses (ou fonctions de GREEN) associées aux systèmes composites complexes tels que : super-réseaux infini et semi-infini, interface entre un super-réseau et un substrat, couche homogène, d'épaisseur d_0, déposée sur un super-réseau (cette couche, différente des couches de volume du super-réseau, étant en contact avec le vide). Nous en déduisons les relations de dispersion (qui sont les pôles de ces fonctions de Green) des phonon - polaritons localisés associées aux héterostructures ci-dessus (mode de polarisation P).

L'originalité dans ce chapitre, réside essentiellement dans l'étude des modes de phonon polaritons associés au système "Vide/Couche homogène/Super-réseau". Plus précisément, nous établirons les relations de dispersion de ces modes, examinerons leurs variations en fonction de l'épaisseur de la couche d'encapsulage et donnerons les expressions analytiques des variations des densités d'états.

Pour aboutir aux résultats escomptés, nous utiliserons l'expression générale de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ (DD) (équation I-2-42) pour construire les fonctions réponses de nos systèmes composites (paragraphes III-2 à III-4) dont la connaissance permet d'avoir accès aux vecteurs propres et aux densités d'états. Ici (voir paragraphe III-5), nous donnerons les expressions analytiques de la variation de densités d'états pour un super-réseau semi-infini recouvert ou non d'une couche d'encapsulage. Dans le paragraphe III-6, nous apprécierons de façon qualitative l'existence des modes de polaritons de volume et des polaritons localisés dans le cas concret des systèmes composites susmentionnés; ces systèmes étant constitués de matériaux de type GaAs, InAs, InP et/ou GaP. Nous examinerons les variations des fréquences associées aux modes localisés en fonction des épaisseurs des couches d'encapsulage respectives dans les cas de systèmes suivants: d'une part, lorsque la couche d'encapsulage est différente des couches de volume du super-réseau (par exemple "Vide/ **InP**/ GaAs/InAs/GaAs/..."), d'autre part, lorsque celle-ci est identique à l'une des couches de volume (par exemple"Vide/ **GaAs**/ InAs/GaAs/...").

Tous nos résultats seront illustrés par des courbes de dispersion des fréquences ω en fonction soit de la composante $k_{//}$ du vecteur de propagation parallèle aux interfaces, soit de l'épaisseur d_0 de la couche d'encapsulage.

III-2) Super-réseaux diélectriques infinis

III-2-1) Conception du modèle

Le super-réseau infini est formé d'une répétition infinie de deux couches diélectriques différentes repérées par la cellule unité n [12,13]. Chaque couche i (i = 1 ou 2) d'épaisseur $2L_i = d_i$ est caractérisée par sa fonction diélectrique $\varepsilon_i(\omega)$ dépendant de la fréquence ω. Toutes les interfaces sont prises parallèles au plan (x_1, x_2); l'axe x_3 étant choisi comme axe du super-réseau (voir figure III-1). Ce super-réseau constitué de n cellules $(-\infty < n < +\infty)$ a une période égale à $D = d_1 + d_2$; où $d_i = 2L_i$; $\varepsilon_i(\omega)$ est la fonction diélectrique de la couche i (i = 1 ou2).

Profitant de l'invariance de translation dans les directions parallèles aux interfaces[12], nous pouvons écrire:

$$\overleftrightarrow{g}(\vec{x}, \vec{x}') = \int \frac{d^2\vec{k}_{//}}{(2\Pi)^2} \overleftrightarrow{g}(\vec{k}_{//} / x_3, x'_3)\, e^{i\vec{k}_{//} (\vec{x}_{//} - \vec{x}'_{//})}, \qquad \text{(III-2-1)}$$

où $\vec{k}_{//}$ et $\vec{x}_{//}$ sont respectivement les vecteurs de propagation et de position dans l'espace réel. Ils sont tous parallèles aux interfaces des couches. Cette invariance de translation a aussi pour conséquence remarquable de nous permettre d'avoir un problème unidimensionnel en fonction de x_3.

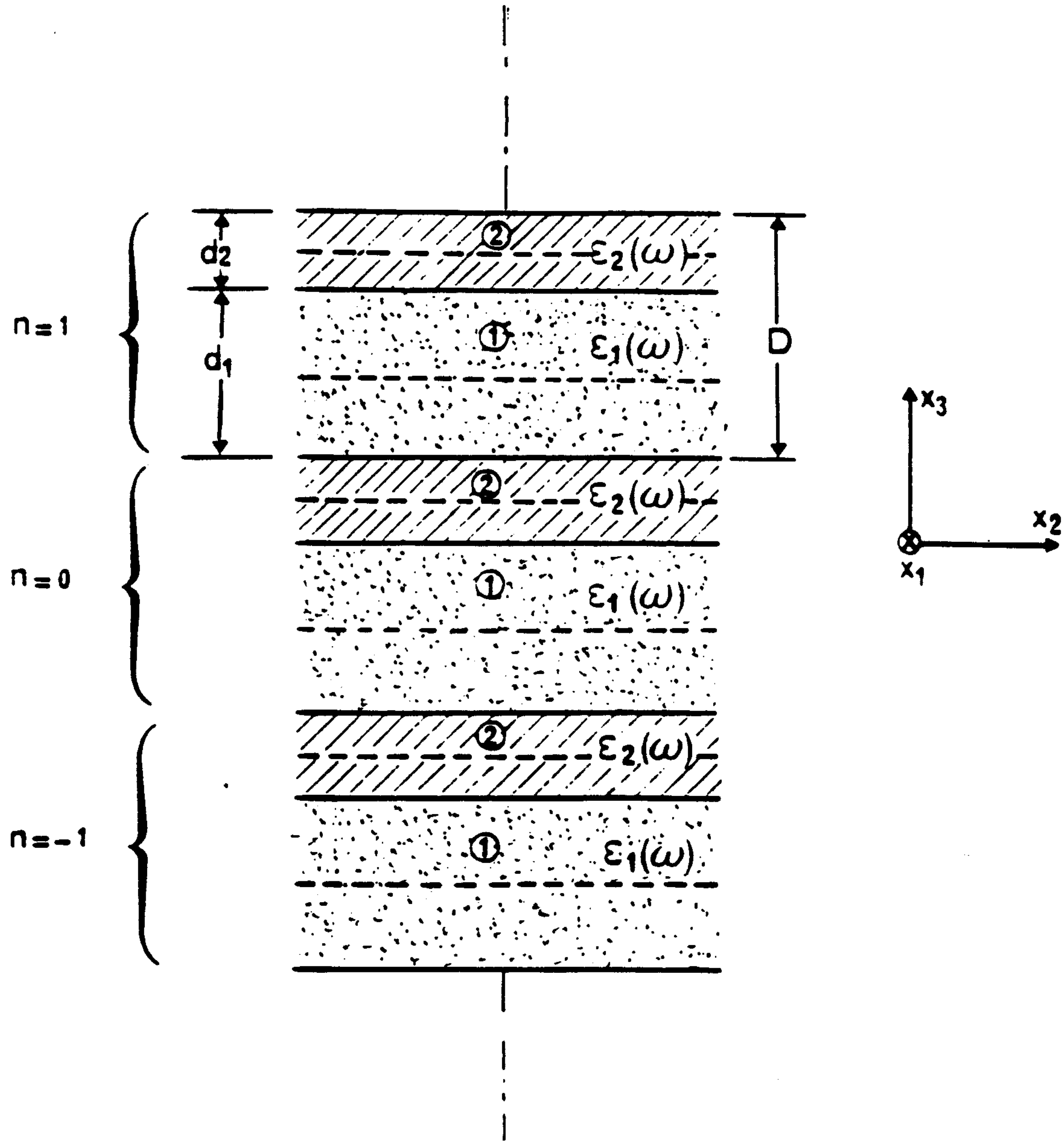


Figure III-1:*Schéma de la géométrie d'un super-réseau infini. Le super-réseau est constitué de n cellules* ($-\infty < n < +\infty$) *et a une période* $D=d_1+d_2$. *Sur cette figure* $d_i = 2L_i$ *et* $\varepsilon_i(\omega)$ *représentent respectivement, les épaisseurs et les fonctions diélectriques des couches du super-réseau (i=1, 2).*

Plutôt que d'utiliser le paramètre x_3 $(-\infty < x_3 < +\infty)$, nous trouvons plus simple, dans ce qui suit, de substituer cette coordonnée aux variables (n, i, z) . En effet, nous définissons, à l'intérieur de chaque couche (n, i) une coordonnée z d'espace réduit dénotant la position d'espace $\frac{x_3}{L_i}$; l'origine étant choisie au milieu de chaque couche. Ainsi :

$$m \equiv (n, i) = 2n + i, \qquad -\infty < n < +\infty; \tag{III-2-2}$$

$$-1 \leq \frac{x_3}{L_i} = z \leq +1, \qquad \text{à l'intérieur de la couche (n, i).} \tag{III-2-3}$$

Ce qui nous fournit deux façons différentes de noter une seule et même interface. Par exemple :

$$(m, \bar{1}) \equiv (n, i, \bar{1}) \equiv (m - 1, 1). \tag{III-2-4}$$

III-2-2) Fonction réponse pour une couche diélectrique

D'après la théorie de réponse d'interface exposée dans le chapitre I (théorie continue), à l'opérateur de volume $\overleftrightarrow{H}_{0i}(x_3)$ correspondant à un milieu infini i, nous pouvons associer la fonction réponse $\overleftrightarrow{G}_{0i}(x_3, x'_3)$ définie par :

$$\overleftrightarrow{H}_{0i}(x_3)\,\overleftrightarrow{G}_{0i}(x_3, x'_3) = \overleftrightarrow{I}\,\delta(x_3 - x'_3), \qquad -\infty < x_3 < +\infty. \tag{III-2-5}$$

Rappelons que $\overleftrightarrow{H}_{0i}$ et $\overleftrightarrow{G}_{0i}$ sont fonctions de $k_{//}$ et sont, ainsi que la matrice unité $\overleftrightarrow{I}$, en général des matrices (3 x 3).

Au moyen d'un opérateur de clivage $\overleftrightarrow{V}_{0i}(z)$, coupons dans le milieu infini une couche d'épaisseur $2L_i$ telle que $-1 \leq \frac{x_3}{L_i} \leq +1$; les surfaces $z = \pm 1$ étant parfaitement réfléchissantes. L'opérateur $\overleftrightarrow{h}_{si}(x_3)$, correspondant à $\overleftrightarrow{H}_{0i}(x_3)$, peut être écrit comme suit [12] :

$$\overleftrightarrow{h}_{si}(z) = \overleftrightarrow{H}_{0i}(z) + \left[- \delta (z - 1) + \delta (z + 1)\right] \overleftrightarrow{V}_{0i} (z); \qquad \text{(III-2-6)}$$

où $-1 \leq z \leq 1$, sachant que l'espace d'interface M associé à la couche est défini par $M \equiv (\bar{1}, 1)$.

Finalement, l'élément de la fonction réponse pour cette couche s'écrit [14] :

$$g_{si}(z, z') = G_{0i}(z, z') - \left[G_{0i}(z, \bar{1}) ; G_{0i}(z, 1)\right] \overleftrightarrow{\Delta}_i^{-1} \cdot \begin{bmatrix} A(\bar{1}, z') \\ A(1, z') \end{bmatrix}. \qquad \text{(III-2-7)}$$

où

$$\overleftrightarrow{\Delta}_i (MM) = \begin{pmatrix} 1 + A_{si}(\bar{1}, \bar{1}) & A_{si}(\bar{1}, 1) \\ A_{si}(1, \bar{1}) & 1 + A_{si}(1, 1) \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-2-8)}$$

et

$$A_{si}(z, z') = \begin{cases} - V_{oi}(z'') \quad G_{oi}(z'', z')\big|_{z'' = z = 1} \\ + V_{oi}(z'') \quad G_{oi}(z'', z')\big|_{z'' = z = -1} \end{cases}. \qquad \text{(III-2-9)}$$

Notons que dans l'espace des interfaces, la fonction réponse de surface prend la valeur particulière $\overleftrightarrow{g}_{si}(MM)$ dont l'inverse s'exprime, conformément à l'équation (I-2-35), par :

$$\overleftrightarrow{g}_{si}^{-1}(MM) = \overleftrightarrow{\Delta}_i (MM) \overleftrightarrow{G}_{oi}^{-1}(MM), \text{ dans } M;$$

ou encore :

$$\overleftrightarrow{g}_{si}^{-1}(MM) = \begin{pmatrix} g_{si}^{-1}(\bar{1}, \bar{1}) & g_{si}^{-1}(\bar{1}, 1) \\ g_{si}^{-1}(1, \bar{1}) & g_{si}^{-1}(1, 1) \end{pmatrix}. \qquad \text{(III-2-10)}$$

Nous pouvons maintenant transposer ces résultats au cas de n'importe quelle couche $m \equiv (n, i)$ prise dans notre super-réseau infini. Ainsi, utilisant les résultats précédents (voir l'équation II-4-6), l'inverse de la fonction réponse de surface devient (dans l'espace d'interfaces) :

$$g_{sm}^{-1}(MM) = \begin{bmatrix} g_{sm}^{-1}(\bar{1},\bar{1}) & g_{sm}^{-1}(\bar{1},1) \\ g_{sm}^{-1}(1,\bar{1}) & g_{sm}^{-1}(1,1) \end{bmatrix} = -\frac{F_m}{S_m}\begin{pmatrix} C_m & -1 \\ -1 & C_m \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-2-11)}$$

avec

$$C_m = \operatorname{ch}\left[\alpha_m(k_{//},\omega)\, d_m\right], \qquad \text{(III-2-12a)}$$

$$S_m = \operatorname{sh}\left[\alpha_m(k_{//},\omega)\, d_m\right]; \qquad \text{(III-2-12b)}$$

où α_m et F_m sont obtenus à partir des équations (I-5-15), (I-5-22) et (I-5-23), et d_m représente l'épaisseur de la couche diélectrique en question.

Soulignons que les fonctions réponses de couche ont été déjà calculées auparavant, en particulier en théorie de l'élasticité avec d'autres méthodes [15,16].

III-2-3) Expression complète de la fonction réponse

Définissons à présent une fonction réponse de référence $\overleftrightarrow{G}$ par :

$$G(n,i,z,n',i',z') = \delta_{nn'}\,\delta_{ii'}\,G_{oi}(z,z'), \qquad \text{(III-2-13)}$$

et désignons par $g(k_{//},\omega\,/m,z;m',z')$ l'élément de base de la fonction réponse du super-réseau infini. Dans l'équation (III-2-13), z et z' sont donnés par l'équation (III-2-3) et $\delta_{nn'}$ et $\delta_{ii'}$ sont les symboles habituels de Kronecker. Tenant compte des résultats donnés plus haut, nous pouvons ainsi construire aisément tous les éléments de la fonction réponse de notre système composite [12].

Soient M_m et $M_{m'}$ les espaces d'interface définis respectivement par :

$$M_m = (m, z = \pm 1), \qquad \text{(III-2-14a)}$$

et $\qquad M_{m'} = (m', z' = \pm 1).$ (III-2-14b)

Calculons tout d'abord les éléments d'interface $\overleftrightarrow{g}(k_{//},\omega/M_m M_{m'})$. Comme nous le verrons, dans les paragraphes suivants, ces éléments présentent un grand intérêt pour la construction de l'élément de base $d(k_{//},\omega/m, z; m', z')$ et de la fonction réponse complète $\overleftrightarrow{d}(k_{//},\omega/m, z; m', z')$ du super-réseau semi-infini en contact avec un autre diélectrique homogène semi-infini (substrat). Tandis que la connaissance de la fonction réponse complète $\overleftrightarrow{g}(k_{//},\omega/m, z; m', z')$ associée au super-réseau infini, permet de bien rendre compte des propriétés de volume des super-réseaux diélectriques.

L'inverse de la fonction réponse d'interface (à l'intérieur de l'espace d'interface discret) du super-réseau à deux couches est une matrice tridiagonale par bloc dont les éléments peuvent être obtenus à partir de l'équation (I-2-38c) et s'expriment alors par [14] :

$$g^{-1}(m,\bar{1};m',\bar{1}) = \delta_{mm'}\left(g_{sm}^{-1}(\bar{1},\bar{1}) + g_{s,m-1}^{-1}(1,1)\right), \qquad \text{(III-2-15a)}$$

$$g^{-1}(m,1;m',1) = \delta_{mm'}\left(g_{sm}^{-1}(1,1) + g_{s,m+1}^{-1}(\bar{1},\bar{1})\right). \qquad \text{(III-2-15b)}$$

$$g^{-1}(m,\bar{1};m',1) = \delta_{mm'}\, g_{sm}^{-1}(\bar{1},1), \qquad \text{(III-2-15c)}$$

$$g^{-1}(m,1;m',1) = \delta_{mm'}\, g_{sm}^{-1}(1,\bar{1}). \qquad \text{(III-2-15d)}$$

L'équation (III-2-11) nous permet de réécrire ces expressions sous la forme :

$$g^{-1}(m,\bar{1};m',\bar{1}) = -\delta_{mm'}\left(F_{m-1}\frac{C_{m-1}}{S_{m-1}} + F_m\frac{C_m}{S_m}\right), \qquad \text{(III-2-16a)}$$

$$g^{-1}(m,\bar{1};m',1) = g^{-1}(m,1;m',\bar{1}) = \delta_{mm'}\frac{F_m}{S_m}, \qquad \text{(III-2-16b)}$$

$$g^{-1}(m,1;m',1) \;=\; -\,\delta_{mm'}\left(F_m\,\frac{C_m}{S_m} + F_{m+1}\,\frac{C_{m+1}}{S_{m+1}}\right) \;. \qquad \text{(III-2-16c)}$$

La matrice tridiagonale par bloc $\overleftrightarrow{g}^{-1}(M,M)$ peut être inversée avec des méthodes mathématiques similaires à celles déjà utilisées [12] dans la théorie discrète de réponse d'interface. En effet, sachant que $\overleftrightarrow{g}^{-1}(M,M)\,.\,\overleftrightarrow{g}(M,M) = \overleftrightarrow{I}$, nous pouvons introduire [12] les matrices $\overleftrightarrow{K}(m)$ et $\overleftrightarrow{P}(m)$ et écrire :

$$\overleftrightarrow{K}(m)\begin{pmatrix} g(m,1;m',1) \\ g(m+1,1;m',1) \end{pmatrix} + \overleftrightarrow{P}(m)\begin{pmatrix} g(m,\bar{1};m',1) \\ g(m,1,1;m',1) \end{pmatrix} = \delta_{mm'}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-2-17)}$$

où

$$\overleftrightarrow{K}(m) = \begin{pmatrix} g^{-1}(m+1,\bar{1};m+1,\bar{1}) & g^{-1}(m+1,\bar{1};m+1,1) \\ -\;1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-2-18)}$$

et

$$\overleftrightarrow{P}(m) = \begin{pmatrix} g^{-1}(m,1;m,\bar{1}) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \qquad \text{(III-2-19)}$$

Tenant compte des équations (III-2-16), les matrices $\overleftrightarrow{K}(m)$ et $\overleftrightarrow{P}(m)$ deviennent :

$$\overleftrightarrow{K}(m) = \begin{pmatrix} -F_m\,\dfrac{C_m}{S_m} - F_{m+1}\,\dfrac{Cm+1}{Sm+1} & \dfrac{F_{m+1}}{S_{m+1}} \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-2-20)}$$

et

$$\overleftrightarrow{P}(m) = \begin{pmatrix} \dfrac{F_m}{S_m} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \qquad \text{(III-2-21)}$$

D'autre part, définissons les matrices $\overleftrightarrow{Q}(m)$ et $\overleftrightarrow{R}(m, m')$ comme suit :

$$\overleftrightarrow{Q}(m) = -\overleftrightarrow{K}^{-1}(m)\ \overleftrightarrow{P}(m) \tag{III-2-22a}$$

qui devient, en y substituant les équations (III-2-20 et 21) :

$$\overleftrightarrow{Q}(m) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\dfrac{F_m}{F_{m+1}}\dfrac{S_{m+1}}{S_m} & C_{m+1} + \dfrac{F_m}{F_{m+1}}\, S_{m+1}\, \dfrac{C_m}{S_m} \end{pmatrix}, \tag{III-2-22b}$$

et

$$\overleftrightarrow{R}(m, m') = \prod_{m''=m'+1}^{m} \overleftrightarrow{Q}(m''), \quad m \geq m'. \tag{III-2-23}$$

La matrice $\overleftrightarrow{R}(m, m')$ est appelée matrice de transfert et le symbole "$\prod$" signifie que l'on fait le produit des matrices.

Pour un super-réseau à N couches, l'équation (III-2-23) nous fournit :

$$\overleftrightarrow{R}(m, m-N) = \overleftrightarrow{Q}(m)\ \overleftrightarrow{Q}(m-1) \ldots \overleftrightarrow{Q}(m-N+1). \tag{III-2-24}$$

Cela nous conduit à déduire (pour N = 2) que :

$$\overleftrightarrow{R}(2, 1) = \overleftrightarrow{Q}(2) \text{ et } \overleftrightarrow{R}(2, 0) = \overleftrightarrow{Q}(2)\ \overleftrightarrow{Q}(1). \tag{III-2-25}$$

Par conséquent, en substituant $\overleftrightarrow{Q}(1)$ et $\overleftrightarrow{Q}(2)$ par leurs équivalents obtenus à partir de l'équation (III-2-22b), nous trouvons :

$$\overleftrightarrow{R}(2, 0) = \begin{pmatrix} -\dfrac{F_1}{F_2}\dfrac{S_1}{S_2} & \dfrac{F_1}{F_2}\dfrac{S_2}{S_1} C_1 + C_2 \\ -\left(C_2 + \dfrac{F_1}{F_2}\dfrac{S_2}{S_1} C_1 \right) & 2C_1C_2 + \dfrac{F_1}{F_2}\dfrac{S_2}{S_1} C_1^2 + \dfrac{F_2}{F_1} S_1S_2 \end{pmatrix}. \tag{III-2-26}$$

Il est intéressant de préciser ici que [12] la relation de dispersion de volume pour les polaritons (de même pour les électrons libres, les vibrations élastiques, les magnons, etc...) dans les super-réseaux diélectriques est donnée par :

$$\det\left[\overleftrightarrow{R}(2,0) - e^{i k_3 D}\overleftrightarrow{I}\right] = 0, \qquad \text{(III–2–27)}$$

où k_3 et D sont respectivement le module du vecteur de propagation et la période du super-réseau.

Multiplions à présent l'équation (III-2-17) par la matrice inverse $\overleftrightarrow{K}^{-1}(m)$ et faisons-le N fois. De proche en proche, nous aboutissons ainsi à :

$$\begin{pmatrix} g(n+1,1,\bar{1}\,;\ n',i',1) \\ g(n+1,1,1\,;\ n',i',1) \end{pmatrix} = \overleftrightarrow{R}(2,0)\begin{pmatrix} g(n,1,\bar{1}\,;\ n',i',1) \\ g(n,1,1\,;\ n',i',1) \end{pmatrix} + \delta_{nn'}\overleftrightarrow{B}(i'), \qquad \text{(III-2-28)}$$

où $\overleftrightarrow{B}(i')$ est une matrice (2 x 1) définie par :

$$\overleftrightarrow{B}(i') \equiv \begin{pmatrix} B_1(i') \\ B_2(i') \end{pmatrix} = \overleftrightarrow{R}(2,i')\,\overleftrightarrow{K}^{-1}(i')\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad i' \equiv 1,2. \qquad \text{(III-2-29)}$$

Nous pouvons montrer aisément que :

$$\overleftrightarrow{B}(1) = \begin{pmatrix} \dfrac{S_2}{F_2} \\ \dfrac{S_1C_2}{F_1} + \dfrac{S_2C_1}{F_2} \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-2-30)}$$

et

$$\overleftrightarrow{B}(2) = \begin{pmatrix} 0 \\ \dfrac{S_1}{F_1} \end{pmatrix}. \qquad \text{(III-2-31)}$$

Utilisant maintenant les résultats ci-dessus, l'équation (III-2-28) nous donne les éléments de la fonction réponse d'interface $\overleftrightarrow{g}(k_{//},\omega/M_m, M_{m'})$.

Soit :

$$g(n,i,1;n',i,1) = \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2-1}, \; i = 1,2 \qquad \text{(III-2-32a)}$$

$$g(n,1,1;n',2,1) = \frac{t}{t^2-1}\left(\frac{S_1}{F_1}t^{|n-n'|} + \frac{S_2}{F_2}t^{|n-n'-1|}\right), \qquad \text{(III-2-32b)}$$

$$g(n,2,1;n',1,1) = \frac{t}{t^2-1}\left(\frac{S_1}{F_1}t^{|n-n'|} + \frac{S_2}{F_2}t^{|n-n'+1|}\right), \qquad \text{(III-2-32c)}$$

où

$$t = \begin{cases} \eta - (\eta^2-1)^{1/2}, & \eta > 1, \\ \eta + i(1-\eta^2)^{1/2}, & -1 < \eta < 1, \\ \eta + (\eta^2-1)^{1/2}, & \eta < -1, \end{cases} \qquad \text{(III-2-33)}$$

et

$$\eta = C_1C_2 + \frac{1}{2}\left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1}\right) S_1S_2. \qquad \text{(III-2-34)}$$

Notons que la relation de dispersion donnée par l'équation (III-2-27) est identiquement la même que celle fournie par l'équation (III-2-34) :

$$2\cos(k_3D) = 2C_1C_2 + \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1}\right)S_1S_2 \equiv 2\eta. \qquad \text{(III-2-35)}$$

Tenant compte des résultats précédents, nous pouvons écrire les matrices (2 x 2) $\overleftrightarrow{g}(M_m, M_{m'})$ (dans l'espace réel). Suivant les combinaisons possibles des indices i(≡ 1,2) et i'(≡ 1,2) dans m ≡ (n i) et m' ≡ (n' i') des couches du super-réseau, nous en distinguons quatre. Soit :

$$\overleftrightarrow{g}(M_{n1}, M_{n'1}) = \frac{t}{t^2-1}\begin{bmatrix} \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) t^{|n-n'|} & \frac{S_1}{F_1} t^{|n-n'-1|} + \frac{S_2}{F_2} t^{|n-n'|} \\ \frac{S_1}{F_1} t^{|n-n'+1|} + \frac{S_2}{F_2} t^{|n-n'|} & \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) t^{|n-n'|} \end{bmatrix}$$

(III-2-36a)

$$\overleftrightarrow{g}(M_{n1}, M_{n'2}) = \frac{t}{t^2 - 1}\begin{bmatrix} \frac{S_1}{F_1} t^{|n-n'-1|} + \frac{S_2}{F_2} t^{|n-n'|} & \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) t^{|n-n'-1|} \\ \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) t^{|n-n'|} & \frac{S_1}{F_1} t^{|n-n'|} + \frac{S_2}{F_2} t^{|n-n'-1|} \end{bmatrix}$$

(III-2-36b)

$$\overleftrightarrow{g}(M_{n2}, M_{n'1}) = \frac{t}{t^2 - 1}\begin{bmatrix} \frac{S_1}{F_1} t^{|n-n'+1|} + \frac{S_2}{F_2} t^{|n-n'|} & \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) t^{|n-n'|} \\ \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) t^{|n-n'+1|} & \frac{S_1}{F_1} t^{|n-n'|} + \frac{S_2}{F_2} t^{|n-n'+1|} \end{bmatrix}$$

(III-2-36c)

$$\overleftrightarrow{g}(M_{n2}, M_{n'2}) = \frac{t}{t^2 - 1}\begin{bmatrix} \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) t^{|n-n'|} & \frac{S_1}{F_1} t^{|n-n'|} + \frac{S_2}{F_2} t^{|n-n'-1|} \\ \frac{S_1}{F_1} t^{|n-n'|} + \frac{S_2}{F_2} t^{|n-n'+1|} & \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) t^{|n-n'|} \end{bmatrix}$$

(III-2-36d)

Les éléments de la première ligne de ces matrices sont pris entre $(n\ i\ \bar{1})$ et, respectivement $(n'\ i'\ \bar{1})$ et $(n'\ i'\ 1)$; alors que ceux de la deuxième ligne sont entre $(n\ i\ 1)$ et, respectivement $(n'\ i'\ \bar{1})$ et $(n'\ i'\ 1)$.

Maintenant, il est nécessaire de réécrire la fonction réponse de référence (équation I-5-24) conformément aux notations utilisées pour le super-réseau. Ce qui impose la substitution des variables x_3 et x'_3 par zL_i et $z'L_i$. Alors :

$$G_i(z,z') = -\frac{e^{-\alpha_i L_i |z-z'|}}{2F_i}. \qquad \text{(III-2-37)}$$

Ceci signifie :

$$\overleftrightarrow{G}_i(M_i, M) = -\frac{1}{2F_i}\begin{pmatrix} 1 & e^{-2\alpha_i L_i} \\ e^{-2\alpha_i L_i} & 1 \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-2-38)}$$

$$\overleftrightarrow{G}_i^{-1}(M_i, M_i) = \frac{F_i}{\mathrm{sh}\,(2\alpha_i L_i)}\begin{pmatrix} e^{2\alpha_i L_i} & -1 \\ -1 & e^{2\alpha_i L_i} \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-2-39)}$$

$$G_i(z,1) = -\frac{e^{-\alpha_i (1-z) L_i}}{2F_i}, \qquad \text{(III-2-40a)}$$

$$G_i(z,\bar{1}) = -\frac{e^{-\alpha_i (z+1) L_i}}{2F_i}, \qquad \text{(III-2-40b)}$$

$$G_i(1,z') = -\frac{e^{-\alpha_i (1-z') L_i}}{2F_i}, \qquad \text{(III-2-40c)}$$

$$G_i(\bar{1},z') = -\frac{e^{-\alpha_i (z'+1) L_i}}{2F_i}. \qquad \text{(III-2-40d)}$$

Nous disposons à présent de tous les éléments nécessaires pour la construction de l'expression analytique de la fonction réponse complète du super-réseau infini à deux couches. En effet, l'utilisation des équations (I-2-42) et (III-2-13) nous permet d'en calculer l'élément g(mz; m'z') (ici nous n'écrivons pas la dépendance explicite de la composante parallèle $k_{//}$ du vecteur d'onde et de la fréquence ω), et obtenir :

$$g(m\,z,m'\,z') = \delta_{mm'}\left[G_m(z,z') - \left(G_m(z,\bar{1}),\ G_m(z,1)\right)\overleftrightarrow{G}_m^{-1}(M_m, M_m)\begin{pmatrix} G_m(\bar{1},z') \\ G_m(1,z') \end{pmatrix}\right]$$

$$+\left(G_m(z,\bar{1}), G_m(z,1)\right)\overleftrightarrow{G}_m^{-1}(M_m, M_m)\,\overleftrightarrow{g}(M_m, M_{m'})\,\overleftrightarrow{G}_{m'}^{-1}(M_{m'}, M_{m'})$$

$$\times\begin{pmatrix} G_{m'}(\bar{1},z') \\ G_{m'}(1,z') \end{pmatrix}. \qquad \text{(III-2-41)}$$

En y substituant les équations (III-2-37) - (III-2-40) et revenant aux variables d'espace x_3 et x'_3, nous aboutissons finalement à l'expression de l'élément de la fonction réponse escomptée :

$$g(m\,x_3\,;\,m'\,x'_3) = \delta_{mm'}\,U_m(x_3\,,\,x'_3) + \frac{1}{S_m S_{m'}}\Big[\mathrm{sh}\,[\alpha_m(L_m - x_3)\,],\ \mathrm{sh}\,[\alpha_m(L_m + x_3)\,]\Big]$$

$$\times\,\overleftrightarrow{g}(M_m\,,M_{m'})\begin{pmatrix}\mathrm{sh}\,[\alpha_{m'}(L_{m'} - x'_3)\,]\\ \\ \mathrm{sh}\,[\alpha_{m'}(L_{m'} + x'_3)]\end{pmatrix}, \qquad \text{(III-2-42)}$$

où $$U_m(x_3,x'_3) = -\,\frac{e^{-\alpha_m\,|\,x_3 - x'_3\,|}}{2F_m}$$
$$+\frac{1}{2F_m S_m}\Big\{\,\mathrm{sh}\,[\alpha_m(L_m - x_3)\,]\,e^{-\alpha_m(L_m - x'_3)} + \mathrm{sh}\,[\alpha_m(L_m + x_3)\,]\,e^{-\alpha_m(L_m + x'_3)}\Big\}$$

(III-2-43)

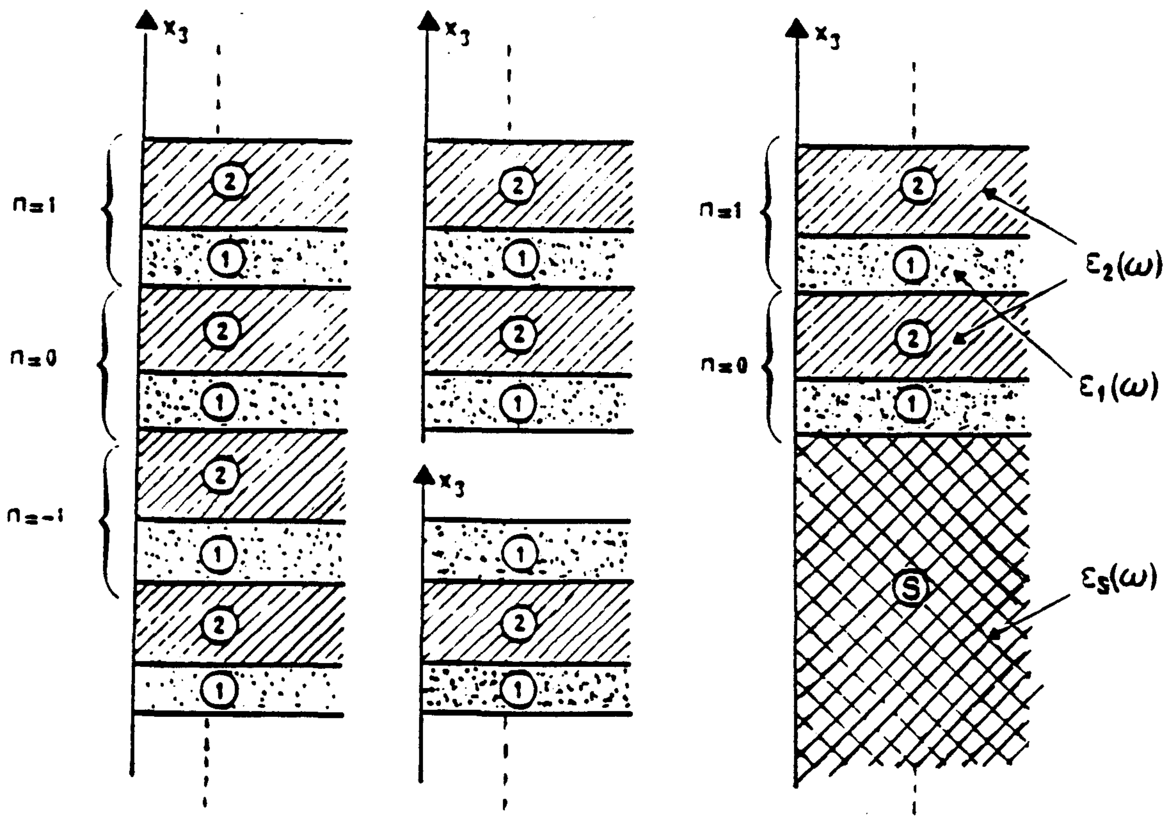
et la matrice (2 x 2) $\overleftrightarrow{g}(M_m,M_{m'})$ est donnée par les équations (III-2-27) pour les quatre différentes combinaisons possibles des indices i et i' ($m \equiv ni$ et $m' \equiv n'\,i'$).

Finalement, toutes les composantes non nulles de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}(m\,z\,,\,m\,z')$ d'un super-réseau diélectrique infini peuvent être calculées à partir de l'équation (III-2-42) en utilisant les relations (I-5-13), (I-5-14), (I-5-20), (I-5-22) et (I-5-23).

III-3) <u>Interface entre un super-réseau semi-infini et un diélectrique homogène semi-infini</u> [12-13]

III-3-1) <u>Conception du modèle</u>

Considérons un super-réseau infini (comme celui dont le schéma est indiqué par la figure III-1). Enlevons lui l'une de ses couches [dans notre cas, la couche ($n = \bar{1}$, $i = z$)]. Couplons l'un des deux super-réseaux semi-infinis ainsi créés avec un diélectrique homogène (substrat) semi-infini de fonction diélectrique $\varepsilon_s(\omega)$ (voir les figures III-2). La déconnexion de la couche $m \equiv (\bar{1}\,,2\,)$ induit une perturbation des interfaces $(\,0\,1\,\bar{1}\,) \equiv (\,\bar{1}\,2\,1)$ et $(\,\bar{1}\,2\,\bar{1}\,)$ du super-réseau infini. A cette perturbation, nous associons l'opérateur de clivage $\overleftrightarrow{V}_c(M_{\bar{1}\,2},\,M_{\bar{1}\,2})$. Ceci a pour corollaire, la création d'une surface libre $(0\,1\,\bar{1})$. Tandis que le remplissage de la région $-\infty < x_3 < 0$ (figure III-2c) par le substrat introduit une perturbation de cette surface $(0\,1\,\bar{1})$



(a) (b) (c)

Figure III-2: *Schémas de la géométrie d'un super-réseau infini à deux couches* (a),*de deux super-réseaux semi-infinis découplés* (b) *et de l'interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat* (c). *Les épaisseurs des couches de volume i=1, 2 des super-réseaux sont respectivement,* d_1 *et* d_2 *et la période* $D=d_1+d_2$. *Les paramètres* $\varepsilon_i(\omega)$ *(i=1, 2, s) représentent les les fonctions diélectriques caractéristiques des matériaux mis en contact.*

caractérisée par l'opérateur de remplissage (ou "filling operator") $V_f(0\bar{1}\bar{1}; 0\bar{1}\bar{1}) = -F_s$ (l'indice $i = s$ désignant le substrat). Nous pouvons ainsi calculer l'opérateur réponse d'interface $\overleftrightarrow{A}(M_s,M_{m'})$ correspondant à la perturbation intégrale (découplage - remplissage). Ici, $M_s \equiv (0,1,\bar{1})$ et $M_{m'} \equiv \{(n', 1, \bar{1}), (n', 2, \bar{1})\}$.

III-3-2) Opérateur réponse d'interface

D'après les résultats précédents (équation I-2-13), l'opérateur réponse d'interface pour notre système s'écrit sous la forme :

$$\overleftrightarrow{A}(M_s,M_{m'}) = \overleftrightarrow{A}_c(M_s,M_{m'}) + \overleftrightarrow{A}_f(M_s, M_{m'}); \qquad \text{(III-3-1)}$$

où $\overleftrightarrow{A}_c$ et $\overleftrightarrow{A}_f$ sont les opérateurs réponses associés à $\overleftrightarrow{V}_c$ et $\overleftrightarrow{V}_f$, respectivement. Notons que $\overleftrightarrow{V}_c(M_{\bar{1}2},M_{\bar{1}2})$ obtenu à partir des équations (III-2-11) et (III-2-12), s'exprime par :

$$\overleftrightarrow{V}_c(M_{\bar{1}2}, M_{\bar{1}2}) = \frac{F_2}{C_2}\begin{pmatrix} C_2 & -1 \\ -1 & C_2 \end{pmatrix}. \qquad \text{(III-3-2)}$$

Alors, les éléments non nuls de $\overleftrightarrow{A}_c(M_s,M_{m'})$ (encore appelé opérateur réponse de surface) s'écrivent :

$$A_c(0\,1\,\bar{1}; M_{m'}) = \sum_{M_s} V_c(\bar{1}\,2\,1;\ M_s)\ g(M_s, M_{m'}) \qquad \text{(III-3-3)}$$

ou encore

$$A_c(0\,1\,\bar{1}; M_{m'}) = V_c(\bar{1}\,2\,1; \bar{1}\,2\,\bar{1})\ g(\bar{1}\,2\,\bar{1}; M_{m'}) + V_c(\bar{1}\,2\,1; \bar{1}\,2\,1)\ g(\bar{1}\,2\,1; M_{m'}).$$

Tenant compte des équations (III-2-36) et (III-3-2), nous obtenons :

$$A_c(0\bar{1}\bar{1}; n'\bar{1}\bar{1}) = \frac{t^{n'+1}}{t^2-1}\left(C_1C_2 + \frac{F_2}{F_1}S_1S_2 - t\right), \qquad n' < 0, \qquad \text{(III-3-4)}$$

$$A_c(0\bar{1}\bar{1}; n'2\bar{1}) = \frac{t^{n'+1}}{t^2-1}\left\{ C_2 - C_{1t} - F_0\left(\frac{S_1}{F_1}t + \frac{S_2}{F_2}\right)\right\}, \qquad n' < 0. \qquad \text{(III-3-5)}$$

De façon analogue, nous construisons les éléments non nuls de l'opérateur $\overleftrightarrow{A}_f$. En effet, nous avons :

$$A_f(0\,1\,\bar{1};M_{m'}) = V_f(0\;1\;\bar{1};0\;1\;\bar{1})\;g(0\;1\;\bar{1};M_{m'}). \qquad \text{(III-3-6)}$$

Les résultats précédents nous permettent d'avoir :

$$A_f(0\,1\,\bar{1};n'\,1\,\bar{1}) = -F_s\left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right)\frac{t^{n'+1}}{t^2-1}, \qquad n' > 0. \qquad \text{(III-3-7)}$$

et

$$A_f(0\,1\,\bar{1};n'\,2\,\bar{1}) = -F_s\left(\frac{S_1}{F_1}t + \frac{S_2}{F_2}\right)\frac{t^{n'+1}}{t^2-1}, \qquad n' > 0. \qquad \text{(III-3-8)}$$

Finalement, les éléments non nuls de l'opérateur réponse d'interface $\overleftrightarrow{A}$ $(M_s, M_{m'})$ peuvent être aisément calculés en utilisant les équations (III-3-1) - (III-3-5), (III-3-7) et (III-3-8). Il vient ainsi :

$$A(0\,1\,\bar{1};m'\;i'\;\bar{1}) = \frac{t^{n'+1}}{t^2-1}\,Y_{i'}, \qquad i' = 1,2; \qquad m' \geq 0, \qquad \text{(III-3-9)}$$

où
$$Y_1 = C_1C_2 + \frac{F_2}{F_1}S_1S_2 - t - F_s\left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right), \qquad \text{(III-3-10a)}$$

et
$$Y_2 = C_2 - C_1t - F_s\left(\frac{S_1}{F_1}t + \frac{S_2}{F_2}\right). \qquad \text{(III-3-10b)}$$

Ces résultats sont fort intéressants pour la détermination de la fonction réponse d'interface.

III-3-3) <u>Fonction réponse d'interface</u>

Soit $\overleftrightarrow{d}$ la fonction réponse associée à notre système composite (super-réseau / substrat). Ses éléments, dans l'espace d'interface M_m peuvent être obtenus, à partir de la théorie discrète de réponse d'interface (voir équation I-2-17) :

$$\overleftrightarrow{d}(M_m,M_{m'}) = \overleftrightarrow{g}(M_m,M_{m'}) - \overleftrightarrow{g}(M_m,M_s)\;\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(M_s,M_s)\;\overleftrightarrow{A}(M_s,M_{m'}). \qquad \text{(III-3-11)}$$

Etant donné que $M_s \equiv (0\,1\,\bar{1})$ est le seul élément du domaine d'interface, la matrice $\overleftrightarrow{\Delta}(M_s,M_s) = \overleftrightarrow{I}(M_s,M_s) + \overleftrightarrow{A}(M_s,M_s)$ se réduit à :

$$\Delta(01\bar{1};01\bar{1}) = 1 + A(01\bar{1};01\bar{1}). \tag{III-3-12a}$$

En substituant $A(0\,1\bar{1};\,0\,1\bar{1})$ par son équivalent, construit au moyen des équations (III-3-9) et (III-3-10a), nous obtenons :

$$\Delta(01\bar{1};01\bar{1}) = \frac{t}{t^2-1}\,\frac{F_2W}{Y_1}\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right), \tag{III-3-12b}$$

$$\text{où } W(k_{//},\omega) = \frac{F_s}{F_2}\left[\left(\frac{F_s}{F_1}-\frac{F_1}{F_s}\right)S_1C_2+\left(\frac{F_s}{F_2}-\frac{F_2}{F_s}\right)S_2C_1+\left(\frac{F_1}{F_2}-\frac{F_2}{F_1}\right)S_1S_2\right]. \tag{III-3-13}$$

L'équation (III-3-13) revêt un grand intérêt pour l'étude des modes localisés des polaritons à l'interface entre le super-réseau semi-infini et le milieu homogène semi-infini. Nous y reviendrons à la fin du paragraphe (III-3).

Ainsi, nous réécrivons l'équation (III-3-11) sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} d(n\,i\,\bar{1};n'\,i'\,\bar{1}) &= g(n\,i\,\bar{1};n'\,i'\,\bar{1}) \\ &\quad - g(n\,i\,\bar{1};0\,1\,\bar{1})\,\Delta^{-1}(0\,1\,\bar{1};0\,1\,\bar{1})\,A(0\,1\,\bar{1};n'\,i'\,\bar{1}). \end{aligned} \tag{III-3-14}$$

Avec l'aide des équations (III-2-32), (III-3-9), (III-3-10) et (III-3-12), la relation (III-3-14) nous fournit tous les éléments d'interface de la fonction réponse de base $\overleftrightarrow{d}$. Après toute simplification, nous trouvons, pour $n, n' \geq 0$:

$$d(n\,1\,\bar{1};n'\,1\,\bar{1}) = \frac{t}{t^2-1}\left[\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right)t^{|n-n|} - \frac{Y_1^2}{F_2W}\,t^{n+n'}\right], \tag{III-3-15a}$$

$$d(n\,2\,\bar{1};n'\,2\,\bar{1}) = \frac{t}{t^2-1}\left[\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right)t^{|n-n'|} - \frac{Y_2^2}{F_2W}\,t^{n+n'}\right], \tag{III-3-15b}$$

$$d(n\,1\,\bar{1};n'\,2\,\bar{1}) = \frac{t}{t^2-1}\left[\frac{S_1}{F_1}t^{|n-n'-1|} + \frac{S_2}{F_2}t^{|n-n'|} - \frac{Y_1Y_2}{F_2W}\,t^{n+n'}\right], \tag{III-3-15c}$$

$$d(n\,2\,\bar{1};n'\,1\,\bar{1}) = \frac{t}{t^2-1}\left[\frac{S_1}{F_1}t^{|n-n'+1|} + \frac{S_2}{F_2}t^{|n-n'|} - \frac{Y_1Y_2}{F_2W}\,t^{n+n'}\right]. \tag{III-3-15d}$$

Dans le but de calculer la fonction réponse complète de base $\overleftrightarrow{d}$, nous avons besoin d'écrire les matrices (2 x 2) $\overleftrightarrow{d}\,(M_m, M_{m'})$. Comme dans le cas précédent du super-réseau infini, ici aussi, nous avons quatre matrices (2 x 2) différentes selon les quatre combinaisons possibles de i et i', à savoir pour n et n' $\geq$ 0 :

$$\overleftrightarrow{d}\,(M_{n1}, M_{n'1}) = \begin{pmatrix} d(n1\bar{1}; n'1\bar{1}) & d(n1\bar{1}; n'2\bar{1}) \\ d(n2\bar{1}; n'1\bar{1}) & d(n2\bar{1}; n'2\bar{1}) \end{pmatrix} \qquad \text{(III-3-16a)}$$

$$\overleftrightarrow{d}\,(M_{n2}, M_{n'2}) = \begin{pmatrix} d(n2\bar{1}; n'2\bar{1}) & d(n2\bar{1}; n'+1, 1\bar{1}) \\ d(n+1, 1\bar{1}; n'2\bar{1}) & d(n+1, 1\bar{1}; n'+1, 1\bar{1}) \end{pmatrix} \qquad \text{(III-3-16b)}$$

$$\overleftrightarrow{d}\,(M_{n1}, M_{n'2}) = \begin{pmatrix} d(n1\bar{1}; n'2\bar{1}) & d(n1\bar{1}; n'+1, 1\bar{1}) \\ d(n2\bar{1}; n'2\bar{1}) & d(n2\bar{1}; n'+1, 1\bar{1}) \end{pmatrix} \qquad \text{(III-3-16c)}$$

et

$$\overleftrightarrow{d}\,(M_{n2}, M_{n'1}) = \begin{pmatrix} d(n2\bar{1}; n'1\bar{1}) & d(n2\bar{1}; n'2\bar{1}) \\ d(n+1, 1\bar{1}; n'1\bar{1}) & d(n+1, 1\bar{1}; n'2\bar{1}) \end{pmatrix} \qquad \text{(III-3-16d)}$$

où tous les éléments sont donnés par les équations (III-3-15).

III-3-4) Fonction réponse complète

La fonction réponse complète $\overleftrightarrow{d}$ de notre système composite est obtenue en utilisant l'équation (I-2-42). En supposant que $-L_m < x_3, x'_3 < L_m$, des démarches analogues à celles qui nous ont mené à $\overleftrightarrow{g}\,(m\ x_3, m'\ x'_3)$ (équation III-2-42), nous fournissent l'expression suivante de l'élément $d(m\ x_3, m'\ x'_3)$ à l'intérieur du super-réseau semi-infini, à savoir :

$$d(m\,x_3,\ m'\,x'_3) = \delta_{mm'}U_m(x_3,x'_3)$$

$$+ \frac{1}{S_m S_{m'}} \big(\mathrm{sh}\,\alpha_m(L_m - x_3)\,,\ \mathrm{sh}\,\alpha_m(L_m + x_3)\big)\ \overleftrightarrow{d}\,(M_m, M_{m'})$$

$$\times \begin{pmatrix} \mathrm{sh}\,\left[\alpha_{m'}(L_{m'} - x'_3)\right] \\ \mathrm{sh}\,\left[\alpha_{m'}(L_{m'} + x'_3)\right] \end{pmatrix} . \qquad \text{(III-3-17)}$$

où $\overleftrightarrow{d}\,(M_m,M_{m'})$ est donné par les équations (III-3-16), tandis que S_m et $U_m(x_3,x_3)$ sont définis par les équations (III-2-12b) et (III-2-43), respectivement.

Afin d'avoir la fonction réponse de base complète $\overleftrightarrow{d}$, écrivons ses éléments, d'une part entre deux points du milieu diélectrique homogène et, d'autre part entre un point situé dans le milieu homogène et un autre pris dans le super-réseau semi-infini. Ces résultats sont aussi facilement obtenus à l'aide de l'équation générale (I-2-42) et de la fonction réponse de volume donnée par l'équation (I-5-24).

En effet, sachant que $x_3 = 0 \equiv (0\,1\,\bar{1})$ définit l'interface entre le super-réseau et le substrat et supposant avoir les variables d'espace x_3, x'_3 toutes deux dans le diélectrique homogène ($-\infty < x_3, x'_3 < 0$), nous pouvons alors écrire l'élément correspondant de la fonction réponse complète comme suit :

$$d(x_3\,,\ x'_3) = G_s(x_3\,,\ x'_3) - G_s(x_3\,,\ 0)\ G_s^{-1}(0\,,0)\ G_s(0\,,x'_3)$$

$$+ G_s(x_3\,,0)\ G_s^{-1}(0\,,0)\ d(0\,1\,\bar{1};0\,1\,\bar{1})\ G_s^{-1}(0\,,0)\ G_s(0\,,x'_3). \qquad \text{(III-3-18a)}$$

Soit :

$$d(x_3,x'_3) = -\frac{e^{\alpha_s|x_3 - x'_3|}}{2F_s} + e^{\alpha_s(x_3 + x'_3)}\left\{\frac{1}{2F_s} + \left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2} - \frac{Y_1^2}{F_2W}\right)\frac{t}{t^2-1}\right\}, \qquad \text{(III-3-18b)}$$

où l'indice "s" est relatif au substrat.

Lorsque nous choisissons le point source dans le milieu diélectrique homogène ($x_3 < 0$) et observons la réponse dans le super-réseau ($- L_{m'} < x'_3 < L_{m'}$), l'élément de la fonction réponse prend la forme ci-dessous (pour $m' \geq 1$) :

$$d(x_3, n' 1\, x'_3) = G_s(x_3, 0)\, G_s^{-1}(0, 0) \begin{pmatrix} d(0\,1\,\bar{1}, n'\,1\,\bar{1}) & , & d(0\,1\,\bar{1}, n'\,1\,1) \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} G_1(-L_1, -L_1) & G_1(-L_1, L_1) \\ G_1(L_1, -L_1) & G_1(L_1, L_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_1(-L, x'_3) \\ G_1(L, x'_3) \end{pmatrix} \qquad \text{(III-3-19a)}$$

En y injectant les équations (III-2-37) et (III-2-39), nous trouvons :

$$d(x_3, n' 1\, x'_3) = \frac{e^{\alpha_s x_3}}{S_1} \Big[d(0 1 \bar{1}, n' 1 \bar{1})\ \mathrm{sh}\,[\alpha_1(L_1 - x'_3)] + d(0\,1\,\bar{1}, n'\,1\,1)\ \mathrm{sh}\,[\alpha_1(L_1 + x'_3)] \Big]$$

Soit :

$$d(x_3, n' 1\, x'_3) = \frac{e^{\alpha_s x_3}}{S_1} \frac{t^{n'+1}}{t^2 - 1}$$

$$\times \left\{ \left(\frac{S_1 C_2}{F_1} + \frac{S_2 C_1}{F_2} - \frac{Y_1^2}{F_2 W} \right) \mathrm{sh}\,[\alpha_1(L_1 - x'_3)] + \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} - \frac{Y_1 Y_2}{F_2 W} \right) \mathrm{sh}\,[\alpha_1(L_1 + x'_3)] \right\}$$

(III-3-19b)

Des démarches analogues nous permettent d'avoir l'expression suivante de l'élément $d(n\,1\,x_3, x'_3)$ (pour $m \geq 1$, $- L_m < x_3 < L_m$, $x'_3 < 0$) :

$$d(n\,1\,x_3, x'_3) = \frac{e^{-\alpha_s x'_3}}{S_1} \frac{t^{n+1}}{t^2 - 1}$$

$$\times \left\{ \left(\frac{S_1 C_2}{F_1} + \frac{S_2 C_1}{F_2} - \frac{Y_1^2}{F_2 W} \right) \mathrm{sh}\,[\alpha_1(L_1 - x_3)] + \left(\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2} - \frac{Y_1 Y_2}{F_2 W} \right) \mathrm{sh}\,[\alpha_1(L_1 + x_3)] \right\}$$

.

(III-3-20)

Finalement, à partir des équations (III-3-18b), (III-3-19b) et (III-3-20), nous pouvons écrire toutes les composantes $d_{\mu\gamma}(m\ x_3, m'\ x'_3)$ ($\mu, \gamma = 1, 2, 3$) de la fonction réponse $\overleftrightarrow{d}$ de notre système composite diélectrique (super-réseau/substrat) en nous servant des relations (I-5-13), (I-5-14), (I-5-20), (I-5-22) et (I-5-23).

Mettons l'accent sur le fait qu'il apparaît un nouveau terme W dans le dénominateur de tous les éléments de la fonction réponse. Son expression est donnée par l'équation (III-3-13). Ainsi, les polaritons d'interface associés à ce système sont obtenus lorsque la quantité W ($k_{//}$, ω) [où les F_i prennent les valeurs données par l' équation (I-5-23)] s'annule. Plus précisément, des quatre composantes non nulles de $\overleftrightarrow{d}$ (correspondant au mode de polarisation P), nous obtenons :

$$\left(\frac{\varepsilon_s(\omega)}{\alpha_s(k_{//},\omega)}\ \frac{\alpha_1(k_{//},\omega)}{\varepsilon_1(\omega)} - \frac{\alpha_s(k_{//},\omega)}{\varepsilon_s(\omega)}\ \frac{\varepsilon_1(\omega)}{\alpha_1(k_{//},\omega)}\right) S_1C_2$$

$$+\left(\frac{\varepsilon_1(\omega)}{\alpha_1(k_{//},\omega)}\ \frac{\alpha_2(k_{//},\omega)}{\varepsilon_2(\omega)} - \frac{\alpha_1(k_{//},\omega)}{\varepsilon_1(\omega)}\ \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\alpha_2(k_{//},\omega)}\right) S_1S_2$$

$$+\left(\frac{\varepsilon_s(\omega)}{\alpha_s(k_{//},\omega)}\ \frac{\alpha_2(k_{//},\omega)}{\varepsilon_2(\omega)} - \frac{\alpha_s(k_{//},\omega)}{\varepsilon_s(\omega)}\ \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\alpha_2(k_{//},\omega)}\right) S_2C_1 = 0. \qquad \text{(III-3-21)}$$

<u>Remarques</u> :

a) Dans le schéma de la figure (III-2c), faisons tendre l'épaisseur d_2 de la couche m ≡ (0 , 2) du super-réseau vers l'infini $\left(\frac{C_2}{S_2} \to 1\right)$. Alors , le terme W ($k_{//}$,$\omega$) [voir l'équation (III-3-13)], tend vers $F_sF_2 + F_1(F_s + F_2) \coth \alpha_1 d_1 + F_1^2 = 0$. Ce résultat n'est autre que la relation qui fournit les modes des polaritons confinés dans une lame mince (m ≡ (0 , 1)) insérée entre deux diélectriques semi-infinis (i =s et 2).

b) En faisant tendre F_s vers zéro, nous obtenons la relation de dispersion pour un super-réseau semi-infini limité par une surface parfaitement réfléchissante

$$\frac{F_1}{F_2} S_1C_2 + S_2C_1 = 0. \qquad \text{(III-3-22)}$$

c) Pour $\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_2(\omega)$ (c'est-à-dire $F_1 = F_2$), le super-réseau se transforme en un milieu homogène. Par conséquent, le système composite se reduit à une interface entre deux milieux homogènes (i = 1 et i = s) dont la relation de dispersion est :

$$F_1 + F_s = 0. \qquad \text{(III-3-23)}$$

III-4) Super-réseau limité par une couche diélectrique homogène finie différente de celle de volume [17]

III- 4-1) Conception du modèle - Opérateur de perturbation

Pour obtenir notre système physique, nous procédons comme suit :

i) à partir du super-réseau infini (voir fig. III-3a) nous créons deux super-réseaux semi-infinis découplés en déconnectant la couche (n = 1, i = 1) (figure III-3b);

ii) dans le super-réseau semi-infini, défini dans la région $-\infty < x_3 < 0$, nous remplaçons la lame (n = 0, i = 2) par la couche (n = 0, i = 0) (fig. III-3c); cette couche étant différente des couches du super-réseau.

Ces opérations induisent la perturbation d'un ensemble de trois états défini par $M_s \equiv \{ (011), (11\bar{1}), (111) \}$. En effet, la déconnexion de la couche (0,1) du super-réseau infini affecte les surfaces $(11\bar{1})$ et (111) et est caractérisée par l'opérateur de clivage $\overleftrightarrow{V}_c(M_s,M_s)$ défini comme une matrice (3 x 3) :

$$\overleftrightarrow{V}_c(M_s,M_s) = -\overleftrightarrow{g}_{s1}^{-1}(M_s,M_s) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{s1}^{-1}(11\bar{1},11\bar{1}) & g_{s1}^{-1}(11\bar{1},111) \\ 0 & g_{s1}^{-1}(111,11\bar{1}) & g_{s1}^{-1}(111,111) \end{pmatrix} \qquad \text{(III-4-1)}$$

A la perturbation des surfaces (011) et $(11\bar{1})$ due au découplage de la couche (n=0, i=2), nous associons l'opérateur $\overleftrightarrow{V}'_c(M_s,M_s)$ qui est aussi une matrice (3 x 3) donnée par :

$$\overleftrightarrow{V}'_c(M_s,M_s) = -\overleftrightarrow{g}_{s2}^{-1}(M_s,M_s) = \begin{pmatrix} g_{s2}^{-1}(011,011) & g_{s2}^{-1}(011,11\bar{1}) & 0 \\ g_{s2}^{-1}(11\bar{1},011) & g_{s2}^{-1}(11\bar{1},11\bar{1}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{(III-4-2)}$$

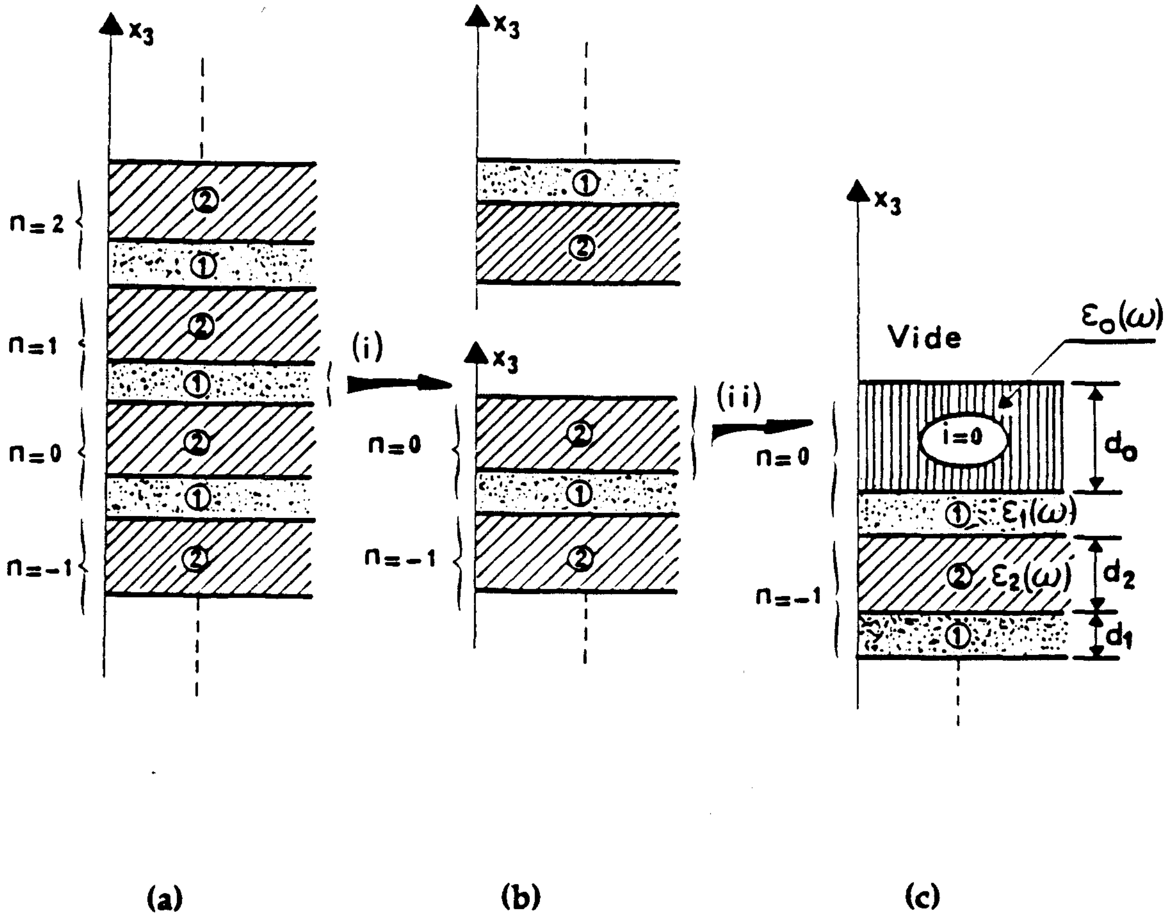


Figure III-3a:
Schéma de la géométrie du super-réseau infini à deux couches.

Figure III-3b:
Schéma de la géométrie de deux super-réseaux découplés.

Figure III-3c:
Schéma du super-réseau semi-infini recouvert d'une couche homogène (limitée par le vide), d'épaisseur d_0 et de fonction diélectrique $\varepsilon_0(\omega)$.

Alors que le dépôt de la couche diélectrique homogène (i = 0) (couplage avec le vide et le super-réseau semi-infini) est caractérisé par l'opérateur $\overleftrightarrow{V}_p(M_s,M_s)$:

$$\overleftrightarrow{V}_p(M_s,M_s) = \begin{bmatrix} g_{s0}^{-1}(011,011) & g_{s0}^{-1}(011,1\bar{1}\bar{1}) & 0 \\ g_{s0}^{-1}(1\bar{1}\bar{1},011) & g_{s0}^{-1}(1\bar{1}\bar{1},1\bar{1}\bar{1}) + g_{sv}^{-1}(1\bar{1}\bar{1},1\bar{1}\bar{1}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \text{(III-4-3)}$$

où l'indice "v" désigne le vide.

En définitive, l'opérateur $\overleftrightarrow{V}(M_s,M_s)$ associé à la perturbation totale (clivage-couplage) est défini comme une matrice (3 x 3) résultant de la somme des trois opérateurs introduits ci-dessus :

$$\overleftrightarrow{V}(M_s,M_s) = \overleftrightarrow{V}_c(M_s,M_s) + \overleftrightarrow{V}'_c(M_s,M_s) + \overleftrightarrow{V}_p(M_s,M_s). \qquad \text{(III-4-4a)}$$

En substituant les matrices par leurs équivalents obtenus au moyen des résultats précédents (équations (III-2-11 à 12)), nous trouvons :

$$\overleftrightarrow{V}(M_s,M_s) = \begin{bmatrix} -\frac{F_0C_0}{S_0}+\frac{F_2C_2}{S_2} & \frac{F_0}{S_0}-\frac{F_2}{S_2} & 0 \\ \frac{F_0}{S_0}-\frac{F_2}{S_2} & -F_v-\frac{F_0C_0}{S_0}+\frac{F_1C_1}{S_1}+\frac{F_2C_2}{S_2} & -\frac{F_1}{S_1} \\ 0 & \frac{F_1}{S_1} & \frac{F_1C_1}{S_1} \end{bmatrix}. \qquad \text{(III-4-4b)}$$

La connaissance de l'opérateur de perturbation nous permet alors de calculer l'opérateur réponse d'interface de notre système composite.

III-4-2) Opérateur réponse d'interface

Désignant par $M_0 \equiv \{ (011), (001) \}$ l'espace des interfaces perturbés du super-réseau final (figure III-3c), nous pouvons écrire l'opérateur réponse d'interface comme suit :

$$\overleftrightarrow{A}(M_o,M_{m'}) = \sum_{M_s} \overleftrightarrow{V}(M_0,M_s)\overleftrightarrow{g}(M_s,M_{m'}); \qquad \text{(III-4-5)}$$

où les éléments de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}(M_s,M_{m'})$, dans l'espace des interfaces, sont donnés par les équations (III-2-36).

Après toutes simplifications, les éléments non nuls de cet opérateur s'expriment par :

$$A(0\,1\,1,\ n'\,1\,\bar{1}) = \frac{t^{-n'+2}}{t^2-1}\left[-\frac{F_0C_0}{S_0}\frac{S_1}{F_1} - C_1 + \frac{F_0}{S_0}\left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right)\right]$$

$$+\frac{S_2}{F_2}\left(\frac{F_2C_2}{S_2} - \frac{F_0C_0}{S_0}\right)\frac{t^{|n'|+1}}{t^2-1}, \qquad \text{(III-4-6a)}$$

$$A(0\,1\,1, n'\,1\,1) = \frac{t^{-n'+2}}{t^2-1}\left(\frac{F_0}{S_0}\frac{S_2}{F_2} - 1\right)$$

$$+\left[C_1C_2 + \frac{F_2}{S_1}S_1S_2 + \frac{F_0}{S_0}\frac{S_1}{F_1} - \frac{F_0C_0}{S_0}\left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right)\right]\frac{t^{|n'|+1}}{t^2-1}, \qquad \text{(III-4-6b)}$$

$$A(0\,0\,1, n'\,1\,\bar{1}) = \frac{t^{-n'+2}}{t^2-1}\left[\frac{F_0}{S_0}\frac{S_1}{F_1} + \frac{1}{t} - \left(F_v - \frac{F_0C_0}{S_0}\right)\left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right)\right]$$

$$+\left(\frac{F_0}{S_0}\frac{S_2}{F_2} - 1\right)\frac{t^{|n'|+1}}{t^2-1}, \qquad \text{(III-4-6c)}$$

$$A(0\,1\,\bar{1},\ n'\,1\,1) = \frac{t^{-n'+2}}{t^2-1}\left(-\frac{S_2}{F_2}\right)\left(F_v + \frac{F_0C_0}{S_0}\right)$$

$$+\left[\frac{F_0}{S_0}\left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) - \frac{S_1}{F_1}\left(F_v + \frac{F_0C_0}{S_0}\right)\right]\frac{t^{|n'|+1}}{t^2-1}. \qquad \text{(III-4-6d)}$$

III-4-3) Fonction réponse dans l'espace des interfaces

Introduisons la matrice $\overleftrightarrow{d}$ comme fonction réponse associée à notre système physique. Rappelons que ses éléments, dans l'espace discret des interfaces, sont donnés par :

$$\overleftrightarrow{d}(M_s,M_{m'}) = \overleftrightarrow{g}(M_m,M_{m'}) - \overleftrightarrow{g}(M_m,M_s)\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(M_0,M_0)\overleftrightarrow{A}(M_0,M_{m'}), \qquad \text{(III-4-7)}$$

où les éléments de $\overleftrightarrow{g}(M_m,M_{m'})$ sont fournis par les équations (III-2-36) et

$$\overleftrightarrow{\Delta}(M_0,M_0) = \overleftrightarrow{I}(M_0,M_0) + \overleftrightarrow{A}(M_0,M_0). \qquad \text{(III-4-8)}$$

L'inverse de la matrice carrée $\overleftrightarrow{\Delta}$ est aussi une matrice (2 x 2) qui s'exprime alors par:

$$\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(M_0,M_0) = \frac{1}{\det\overleftrightarrow{\Delta}}\begin{pmatrix} 1+A(0\,0\,1,0\,0\,1) & -A(0\,1\,1,0\,0\,1) \\ -A(0\,0\,1,0\,1\,1) & 1+A(0\,1\,1,0\,1\,1)\end{pmatrix}. \qquad \text{(III-4-9)}$$

La substitution, dans cette équation, des éléments A(011, 011), A(011, 001), A(0 0 1, 0 1 1) et A(0 0 1, 0 0 1), par leurs équivalents obtenus à partir des équations (III-4-6), nous permet d'écrire les expressions suivantes de $\det\overleftrightarrow{\Delta}$ et de $\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(M_0,M_0)$:

$$\det\overleftrightarrow{\Delta} = \frac{t}{t^2-1}\,W(k_{//},\omega), \qquad \text{(III-4-10)}$$

et

$$\overleftrightarrow{\Delta}^{-1}(M_0,M_0) = \frac{1}{W(k_{//},\omega)}\begin{pmatrix} \mathcal{X}_{11} & \mathcal{X}_{12} \\ \mathcal{X}_{21} & \mathcal{X}_{22}\end{pmatrix}, \qquad \text{(III-4-11)}$$

avec :

$$W(k_{//},\omega) = F_0\frac{S_2}{F_2}\left[\left(\frac{C_0}{S_0}+\frac{F_v}{F_0}\right)(C_2t-C_1) - \left(F_0+\frac{C_0}{S_0}F_v\right)\left(\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2}\right)\right], \qquad \text{(III-4-12)}$$

$$\mathcal{X}_{11} = \frac{F_0}{S_0}\left(\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2}\right) - \left(F_v+\frac{F_0C_0}{S_0}\right)\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right), \qquad \text{(III-4-13a)}$$

$$\mathcal{X}_{12} = -C_2t + C_1 - \frac{F_0}{S_0}\left[\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2} - C_0\left(\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2}\right)\right], \qquad \text{(III-4-13b)}$$

$$\mathcal{X}_{21} = -\frac{F_0}{S_0}\left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right) + \left(F_v + \frac{F_0C_0}{S_0}\right)\left(\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2}\right), \qquad \text{(III-4-13c)}$$

et

$$\mathcal{X}_{22} = C_1C_2 + \frac{F_2}{F_1}S_1S_2 - \frac{1}{t} + \frac{F_0}{S_0}\left[\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2} - C_0\left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right)\right]. \qquad \text{(III-4-13d)}$$

Soulignons que les modes des polaritons localisés sont donnés par les pôles de la fonction réponse $\overleftrightarrow{d}(M_m,M_{m'})$ de notre système composite. Ce qui se traduit par :

$$\det\left[\overleftrightarrow{\Delta}(M_0,M_0)\right] = 0. \qquad \text{(III-4-14)}$$

Maintenant, nous pouvons calculer les éléments de la fonction réponse $\overleftrightarrow{d}(M_m,M_{m'})$ dans l'espace des interfaces. Pour ce faire, nous distinguons deux cas et obtenons :

i) pour n = n' = 0, lorsque les interfaces considérées sont celles de la couche i = 0, c'est-à-dire que $M_m \equiv \{(00\bar{1}),(001)\}$:

$$d(00\bar{1},001) = d(001,00\bar{1}) = \frac{\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2}}{C_0\left(1+\frac{F_vS_0}{F_0C_0}\right)\left[C_2t - C_1 - \mathcal{R}_v\left(\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2}\right)\right]},$$

(III-4-15a)

$$d(001,001) = \frac{1}{1+F_v\frac{S_0}{F_0C_0}}\;\frac{\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2}+\frac{S_0}{F_0C_0}(C_1-C_2t)}{C_2t - C_1 - \mathcal{R}_v\left(\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2}\right)}, \qquad \text{(III-4-15b)}$$

$$d(0\,0\,\bar{1},0\,0\,\bar{1}) = \frac{\dfrac{S_1}{F_1}+\dfrac{S_2t}{F_2}}{C_2t-C_1-\mathcal{R}_v\left(\dfrac{S_1}{F_1}+\dfrac{S_2t}{F_2}\right)}\,; \qquad \text{(III-4-15c)}$$

où

$$\mathcal{R}_v = \frac{F_v+\dfrac{F_0S_0}{C_0}}{1+\dfrac{F_vS_0}{F_0C_0}}\,; \qquad \text{(III-4-16)}$$

ii) n, n' $\leq$ 0, i $\neq$ 0, si les interfaces sont celles du super-réseau, donc

$M_m \equiv \{(n\,i\,\bar{1}),\ (n\,i\,1)\}$ (en l'occurrence i = 1) :

$$d(n\,1\,\bar{1},n'\,1\,\bar{1}) = \frac{t}{t^2-1}\left[\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right)t^{|n-n'|}-t^{-n-n'}\left(\frac{S_1t}{F_1}+\frac{S_2}{F_2}\right)\frac{Y'_2}{Y'_1}\right],$$
(III-4-17a)

$$d(n\,1\,\bar{1},n'\,1\,1) = \frac{t}{t^2-1}\left[\frac{S_2}{F_2}t^{|n-n'|}+\frac{S_1}{F_1}t^{|n-n'-1|}-t^{-n-n'}\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right)\frac{Y'_2}{Y'_1}\right]$$
(III-4-17b)

$$d(n\,1\,1,n'\,1\,\bar{1}) = \frac{t}{t^2-1}\left[\frac{S_2}{F_2}t^{|n-n'|}+\frac{S_1}{F_1}t^{|n-n'+1|}-t^{-n-n'}\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right)\frac{Y'_2}{Y'_1}\right]$$
(III-4-17c)

$$d(n\,1\,1,n'\,1\,1) = \frac{t}{t^2-1}\left[\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right)t^{|n-n'|}-t^{-n-n'-1}\left(\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2t}{F_2}\right)\frac{Y'_2}{Y'_1}\right]$$
(III-4-17d)

avec

$$Y'_1 = C_1C_2+\frac{F_2}{F_1}S_1S_2-\frac{1}{t}-\mathcal{R}_v\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right), \qquad \text{(III-4-18a)}$$

et

$$Y'_2 = C_2-C_1t-\mathcal{R}_v\left(\frac{S_1t}{F_1}+\frac{S_2}{F_2}\right). \qquad \text{(III-4-18b)}$$

Les modes localisés sont définis à partir de l'équation (III-4-10) en y prenant le terme W ($k_{//}$,ω) égal à zéro. Nous obtenons ainsi la relation de dispersion des polaritons associés au système composite diélectrique "super-réseau/couche homogène finie/vide", sous la forme :

$$C_1 S_2 \left(\frac{F_2}{\mathcal{R}_v} - \frac{\mathcal{R}_v}{F_2}\right) + S_1 S_2 \left(\frac{F_2}{F_1} - \frac{F_1}{F_2}\right) + C_2 S_1 \left(\frac{F_1}{\mathcal{R}_v} - \frac{\mathcal{R}_v}{F_1}\right) = 0. \quad \text{(III-4-19)}$$

En substituant dans cette relation les F_i (i=0, 1, v) par leurs équivalents donnés par l'équation (I-5-23), nous obtenons la relation de dispersion suivante pour les phonon-polaritons (cas du mode de polarisation P) associés au système composite sus-mentionné:

$$C_1S_2\left(\frac{\alpha_0\,\varepsilon_2}{\alpha_2\,\varepsilon_0}\;\frac{\alpha_v\,\varepsilon_0\,C_0+\alpha_0\,\varepsilon_v\,S_0}{\alpha_v\,\varepsilon_0\,S_0+\alpha_0\,\varepsilon_v\,C_0} - \frac{\alpha_2\varepsilon_0}{\alpha_0\,\varepsilon_2}\;\frac{\alpha_v\,\varepsilon_0\,S_0+\alpha_0\,\varepsilon_v\,C_0}{\alpha_v\,\varepsilon_0\,C_0+\alpha_0\,\varepsilon_v\,S_0}\right) -$$

$$S_1S_2\left(\frac{\alpha_1\;\varepsilon_2}{\alpha_2\;\varepsilon_1} - \frac{\alpha_2\,\varepsilon_1}{\alpha_1\,\varepsilon_2}\right)+C_2S_1\left(\frac{\alpha_0\varepsilon_1}{\alpha_1\varepsilon_0}\;\frac{\alpha_v\,\varepsilon_0\,C_0+\alpha_0\,\varepsilon_v\,S_0}{\alpha_v\,\varepsilon_0\,S_0+\alpha_0\,\varepsilon_v\,C_0} - \frac{\alpha_1\varepsilon_0}{\alpha_0\varepsilon_1}\;\frac{\alpha_v\,\varepsilon_0\,S_0+\alpha_v\,\varepsilon_0\,C_0}{\alpha_0\,\varepsilon_v\,C_0+\alpha_0\,\varepsilon_v\,S_0}\right)=0$$

(III-4-20)

<u>Remarques</u> : l'examen de l'équation (III-4-19) montre que nous pouvons retrouver les relations de dispersion de quelques systèmes composites. En particulier :
i) en supposant que la grandeur F_v est nulle, nous trouvons à partir de l'équation (III-4-19), la relation de dispersion déjà obtenue [18] pour le système "super-réseau/couche homogène finie (sans le vide). Soit :

$$C_1S_2\left(\frac{F_2C_0}{F_0S_0} - \frac{F_0S_0}{F_2C_0}\right) + S_1S_2\left(\frac{F_2}{F_1} - \frac{F_1}{F_2}\right) + C_2S_1\left(\frac{F_1C_0}{F_0S_0} - \frac{F_0S_0}{F_1C_0}\right) = 0;$$

ii) lorsque dans notre système physique (voir fig. III-3c) nous faisons tendre l'épaisseur d_0 de la couche homogène vers l'infini, alors $\frac{C_0}{S_0} \cong \frac{S_0}{C_0} \cong 1$ et le résultat (III-4-19) se réduit à la relation de dispersion pour l'interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat (voir l'équation III-3-13 et les résultats de la référence [12]) :

$$C_1S_2\left(\frac{F_2}{F_0} - \frac{F_0}{F_2}\right) + S_1S_2\left(\frac{F_2}{F_1} - \frac{F_1}{F_2}\right) + C_2S_1\left(\frac{F_1}{F_0} - \frac{F_0}{F_1}\right) = 0.$$

Notons que l'un des avantages de la théorie de réponse d'interface est de nous permettre d'avoir accès à la densité d'état qui rend bien compte de l'évolution des modes de polaritons localisés jusqu'à la limite des bandes de volume, voire à l'intérieur de celles-ci (modes résonants). Ainsi, à l'aide des résultats obtenus précédemment, nous pouvons calculer les densités d'états pour notre système physique.

III-4-4) Fonction réponse complète

La fonction réponse complète $\overleftrightarrow{d}$ du système "super-réseau semi-infini/couche homogène/vide" peut être maintenant calculée facilement au moyen de l'équation (I-2-42). Lorsque nous fixons les points source et observation dans le super-réseau semi-infini ($-L_m < x_3, x'_3 < L_m$), nous obtenons l'expression suivante de l'élément $d(m\, x_3, m'\, x'_3)$:

$$
\begin{aligned}
d(m\, x_3, m'\, x'_3) = {} & \delta_{mm'}\, U_m(x_3, x'_3) \\
& + \frac{1}{S_m S_{m'}} \Big(\mathrm{sh}\, \alpha_m(L_m - x_3)\, ,\, \mathrm{sh}\, \alpha_m(L_m + x_3) \Big)\ \overleftrightarrow{d}(M_m, M_{m'}) \\
& \times \begin{pmatrix} \mathrm{sh}\, \alpha_{m'}(L_{m'} - x'_3) \\ \mathrm{sh}\, \alpha_{m'}(L_{m'} + x'_3) \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-4-21)}
\end{aligned}
$$

où : $m \equiv (n\, i)$, $m' \equiv (n'\, i')$ avec $n, n' \leq 0$;

S_m et $U_m\,(x_3, x'_3)$ sont donnés par les équations (III-2-12b) et (III-2-43), respectivement;

les éléments de $\overleftrightarrow{d}(M_m, M_{m'})$ sont fournis par les équations (III-4-17).

Calculons maintenant l'élément de la fonction réponse de base en supposant avoir les variables d'espace x_3, x'_3 dans la couche diélectrique homogène $i = 0$ ($-L_0 \leq x_3, x'_3 \leq +L_0$). Dans ce cas, l'espace des interfaces mises en jeu est défini par $M_0 \equiv \{ (0\,0\,\bar{1}), (0\,0\,1) \}$ et, à partir de l'équation (I-2-42), nous trouvons :

$$
\begin{aligned}
d(0,0,x_3; 0,0,x'_3) = {} & U_0(x_3, x'_3) + \frac{1}{S_0^2} \Big(\mathrm{sh}\, \alpha_0(L_0 - x_3)\, ,\ \mathrm{sh}\, \alpha_0(L_0 + x_3) \Big)\ \overleftrightarrow{d}(M_0, M_0') \\
& \times \begin{pmatrix} \mathrm{sh}\alpha_0(L_0 - x'_3) \\ \mathrm{sh}\alpha_0(L_0 + x'_3) \end{pmatrix}, \qquad \text{(III-4-22)}
\end{aligned}
$$

où $\overleftrightarrow{d}\,(M_0,M_{0'})$ est une matrice (2 x 2) dont les éléments sont donnés par les équations (III-4-15) et $U_0\,(x_3, x'_3)$ est obtenu à partir de (III-4-43).

III-5) Densités d'états

D'une façon générale, pour une valeur donnée du vecteur d'onde $\vec{k}_{//}$, la fonction réponse $\overleftrightarrow{d}$ permet d'obtenir les densités d'états locales et totales pour le super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage limitée par le vide. Dans le cas précis des modes de polarisation P, ces densités d'états se calculent au moyen des composantes d_{jj} (j =1 et 3) des fonctions réponses. Nous donnerons dans ce paragraphe, leurs expressions analytiques pour ce système composite ainsi que pour le cas limite de l'interface super-réseau/substrat.

III-5-1) Densités d'états locales des modes P

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

$$n(\omega^2, k_{//} \mid n, i, x_3) = -\frac{A_i(\omega^2)}{\pi} \sum_{j=1,3} \mathrm{Im}\,[d^+_{jj}(\omega^2, k_{//} \mid x_3, x_3)]; \qquad \text{(III-5-1)}$$

où

$$d^+_{jj}(\omega^2) = \lim_{\varepsilon \to 0} d_{jj}(\omega^2 + i\,\varepsilon). \qquad \text{(III-5-2)}$$

et

$$A_i(\omega^2) = \frac{d}{d\omega^2}\left(\frac{\omega^2 \varepsilon_i(\omega)}{c^2}\right); \qquad i=0, 1, 2\,.$$

Les densités d'états peuvent aussi être exprimées en fonction de la fréquence ω, plutôt que de son carré, en utilisant la relation bien connue $n(\omega) = 2\omega n(\omega^2)$.

III-5-2) Variation des densités d'états totales des modes P

Pour une valeur donnée de $k_{//}$, la densité d'états totale se calcule en intégrant, sur la variable d'espace x_3, la densité d'états locale et sommant sur n et i. Mais dans le cadre de la présente étude, nous examinons la variation de densités d'états $\Delta n(\omega^2)$ autrement dit, la différence entre la densité d'états du super-réseau semi-infini recouvert par la couche d'encapsulage et celle d'un super-réseau infini ayant le même nombre de couches que le super-réseau semi-infini. Analytiquement, cette variation est définie comme étant la somme des variations des densités d'états des couches du super-réseau et des densités d'états de la couche d'encapsulage et du vide:

$$\Delta n(\omega^2) = \Delta_1 n(\omega^2) + \Delta_2 n(\omega^2) + n_0(\omega) + \Delta_v n(\omega); \qquad \text{(III-5-3)}$$

où

$$\Delta_1 n(\omega^2) = -\frac{A_1(\omega^2)}{\pi}\sum_{n=-\infty}^{0} \mathrm{Im}\int_{-d_1/2}^{+d_1/2} [d_{11}(n,1,x_3\,;n,1,x_3) - g_{11}(n,1,x_3\,;n,1,x_3)$$

$$+ d_{33}(n,1,x_3\,;n,1,x_3) - g_{33}(n,1,x_3\,;n,1,x_3)]\,dx_3, \qquad \text{(III-5-4)}$$

$$\Delta_2 n(\omega^2) = -\frac{A_2(\omega^2)}{\pi}\sum_{n=-\infty}^{-1} \mathrm{Im}\int_{-d_2/2}^{+d_2/2} [d_{11}(n,2,x_3\,;n,2,x_3) - g_{11}(n,2,x_3\,;n,2,x_3)$$

$$+ d_{33}(n,2,x_3\,;n,2,x_3) - g_{33}(n,2,x_3\,;n,2,x_3)]\,dx_3, \qquad \text{(III-5-5)}$$

$$n_0(\omega^2) = -\frac{A_0(\omega^2)}{\pi}\mathrm{Im}\int_{-d_0/2}^{+d_0/2} [\,d_{11}(0,0,x_3\,;0,0,x_3) + d_{33}(0,0,x_3\,;0,0,x_3)\,]\,dx_3, \qquad \text{(III-5-6)}$$

$$\Delta_v n(\omega^2) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\int_{+d_0/2}^{+\infty} [\,d_{11}(x_3\,;x_3) - G_{11}(x_3\,,x_3) + d_{33}(x_3\,;x_3) - G_{33}(x_3\,,x_3)]dx_3. \qquad \text{(III-5-7)}$$

A l'aide des composantes des fonctions réponses données dans l'appendice B, nous obtenons les expressions suivantes des différentes contributions:

$$\Delta_1 n(\omega^2) = -\frac{A_1(\omega^2)}{\pi}\,\mathrm{Im}\frac{t}{(t^2-1)^2}\left\{\frac{S_1}{\alpha_1 F_1}\left(2-\frac{F_1}{\alpha_1}\right)\left[C_2S_1+\frac{1}{2}C_1S_2\left(\frac{F_1}{F_2}+\frac{F_2}{F_1}\right)\right]\right.$$

$$\left.+\frac{d_1S_2}{2\alpha_1}\left(\frac{F_1}{F_2}-\frac{F_2}{F_1}\right)\right\}\frac{Y'_2}{Y'_1}, \qquad \text{(III-5-8)}$$

$$\Delta_2 n(\omega^2) = -\frac{A_2(\omega^2)}{\pi}\,\mathrm{Im}\frac{t^2}{(t^2-1)^2}\left\{\frac{S_2}{\alpha_2 F_2}\left(2-\frac{F_2}{\alpha_2}\right)\left[C_1S_2+\frac{1}{2}C_2S_1\left(\frac{F_2}{F_1}+\frac{F_1}{F_2}\right)\right]\right.$$

$$\left.+\frac{d_2S_1}{2\alpha_2}\left(\frac{F_2}{F_1}-\frac{F_1}{F_2}\right)\right\}\frac{Y'_2}{Y'_1}, \qquad \text{(III-5-9)}$$

$$n_0(\omega^2) = -\frac{A_0(\omega^2)}{2\pi}\,\mathrm{Im}\left\{\frac{S_0\left(2-\frac{F_0}{\alpha_0}\right)}{\alpha_0 C_0\left(1+\frac{F_v S_0}{F_0 C_0}\right)}\left[\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}-\frac{F_v}{F_0^2}\left(C_1C_2+\frac{F_1}{F_2}S_1S_2-t\right)\right]\right.$$

$$\left.+\,d_0\frac{F_0}{\alpha_0}\left[\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}+\frac{\mathcal{R}_v}{F_0^2}\left(C_1C_2+\frac{F_1}{F_2}S_1S_2-t\right)\right]\right\}\frac{1}{Y'_1}; \qquad \text{(III-5-10)}$$

$$\Delta_v n(\omega^2) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{2\alpha_v}\left(2-\frac{F_v}{\alpha_v}\right)\left[\frac{1}{2F_v}\right.\right.$$

$$\left.\left.+\;\frac{\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}+\frac{S_0}{F_0C_0}\left(C_1C_2+\frac{F_1}{F_2}S_1S_2-t\right)}{1+\frac{F_vS_0}{F_0C_0}}\right]\frac{1}{Y'_1}\right\}; \qquad \text{(III-5-11)}$$

Les quantités $\mathcal{R}_v$, Y'_1 et Y'_2 sont données, respectivement, par les équations (III-4-16) (III-4-18a) et (III-4-18b).

Considérons à présent le cas limite d'un super-réseau semi-infini sans une couche d'encapsulage. En effet, lorsque nous faisons tendre l'épaisseur d_0 de la couche d'encpsulage vers zéro, le schéma de la figure (III-3c) se réduit à celui de la géométrie d'un super-réseau avec surface libre ou de l'inteface super-réseau/substrat. Cela entraîne que la quantité $S_0 = \mathrm{sh}(\alpha_0 d_0)$, contenue dans les expressions (III-4-18) et (III-5-11), tend vers zéro. Dans ces conditions, la contribution $n_0(\omega^2)$ de la couche i=0 s'annule. La variation de la densité d'états pour un super-réseau limité par le vide (sans la couche d'encapsulage) s'écrit alors:

$$\Delta n'(\omega^2) = \Delta_1 n'(\omega^2) + \Delta_2 n'(\omega^2) + \Delta_v n'(\omega); \qquad \text{(III-5-12)}$$

avec

$$\Delta_1 n'(\omega^2) = -\frac{A_1(\omega^2)}{\pi}\,\mathrm{Im}\frac{t}{(t^2-1)^2}\left\{\frac{S_1}{\alpha_1 F_1}\left(2-\frac{F_1}{\alpha_1}\right)\left[C_2S_1+\frac{1}{2}C_1S_2\left(\frac{F_1}{F_2}+\frac{F_2}{F_1}\right)\right]\right.$$

$$\left.+\,\frac{d_1S_2}{2\alpha_1}\left(\frac{F_1}{F_2}-\frac{F_2}{F_1}\right)\right\}\frac{Y_2^*}{Y_1^*}, \qquad \text{(III-5-13)}$$

$$\Delta_2 n'(\omega^2) = -\frac{A_2(\omega^2)}{\pi}\,\mathrm{Im}\,\frac{t^2}{(t^2-1)^2}\left\{\frac{S_2}{\alpha_2 F_2}\left(2-\frac{F_2}{\alpha_2}\right)\left[C_1S_2+\frac{1}{2}C_2S_1\left(\frac{F_2}{F_1}+\frac{F_1}{F_2}\right)\right]\right.$$

$$\left.+\frac{d_2S_1}{2\alpha_2}\left(\frac{F_2}{F_1}-\frac{F_1}{F_2}\right)\right\}\frac{Y_2^*}{Y_1^*}, \qquad \text{(III-5-14)}$$

$$\Delta_v n'(\omega^2) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left\{\frac{1}{2\alpha_v}\left(2-\frac{F_v}{\alpha_v}\right)\left[\frac{1}{2F_v}+\frac{1}{Y_1^*}\left(\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}\right)\right];\right. \qquad \text{(III-5-15)}$$

Les termes Y_1^* et Y_2^* se déduisent des expressions (III-4-18) et sont de la forme:

$$Y_1^* = C_1C_2 + \frac{F_2}{F_1}S_1S_2 - \frac{1}{t} - F_v\left(\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}\right), \qquad \text{(III-5-16)}$$

et

$$Y_2^* = C_2 - C_1 t - F_v\left(\frac{S_1}{F_1}t+\frac{S_2}{F_2}\right). \qquad \text{(III-5-17)}$$

Pour l'interface entre un super-réseau et un substrat (dont le vide en est un cas particulier), la variation de densités d'états se calcule alors au moyen des expressions analytiques ci-dessus en y substituant l'indice"v" par "s" (s étant un paramètre relatif au substrat).

III- 6) Applications et discussions des résultats pour les modes P [17]

Les polaritons (ou plus exactement, les phonon-polaritons et les plasmon-polaritons) dans les super-réseaux ont déjà fait l'objet de nombreuses études, aussi bien théoriques qu'expérimentales [6, 10, 19-24]. Dans ce paragraphe, nous nous intéressons aux applications liées aux phonons - polaritons de polarisation P dans les super-réseaux à deux couches.

L'application des résultats de la théorie de réponse d'interface (exposée précédemment) aux phonon-polaritons, nous permet d'apprécier les propriétés physiques telles que : les modes localisés, les densités d'état (locale et totale) dans : le super-réseau semi-infini , le super-réseau avec une couche d'encapsulage et l'interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat. Nous étudierons également les variations des fréquences des modes localisés en fonction de l'épaisseur de la couche d'encapsulage.

Notons que les fonctions diélectriques $\varepsilon_i(\omega)$ caractéristiques des différents matériaux en contact, dépendent de la fréquence ω et représentent des oscillateurs harmoniques amortis. Soit [25] :

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{\infty i} \frac{\omega_{Li}^2 - \omega^2 - i\,\Gamma\omega}{\omega_{Ti}^2 - \omega^2 - i\,\Gamma\omega} \,, \qquad i = 0, 1, 2, s\,; \qquad \text{(III-6-1)}$$

où ω_{Li} et ω_{Ti} sont, respectivement, les fréquences longitudinale et transverse des phonons optiques dans le matériau i et Γ, le paramètre d'amortissement. Pour le vide, ε est une constante.

Nous présenterons dans la section III-6-1, l'étude des phonon-polaritons pour un super-réseau semi-infini en contact avec le vide, puis, dans la section III-6-2, nous développerons l'étude de super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage en contact avec le vide. Enfin, dans la section III-6-3 , nous aborderons l'interface entre un super-réseau et un substrat. Toutes les applications sont données dans le cas de la polarisation P où le paramètre F_i , introduit précédemment, prend la valeur par l'équation (I-5-23) et la vitesse de la lumière c tend vers l'infini.

III-6-1) Polaritons dans un super-réseau semi-infini limité par le vide

Schématiquement, le système composite que nous étudions ici peut être obtenu simplement en substituant dans la figure III-2c le substrat par le vide. Dans ce cas, $\varepsilon_s(\omega)$ devient $\varepsilon_v(\omega) = 1$ et par conséquent, la condition d'apparition des modes localisés s'exprime par (à partir de l'équation III-3-13) :

$$S_1C_2\left(\frac{F_v}{F_1} - \frac{F_1}{F_v}\right) + S_1S_2\left(\frac{F_1}{F_2} - \frac{F_2}{F_1}\right) + S_2C_1\left(\frac{F_v}{F_2} - \frac{F_2}{F_v}\right) = 0, \qquad \text{(III-6-2a)}$$

avec la condition,

$$\left| C_1C_2 + \frac{F_2}{F_1}S_1S_2 - F_v\left(\frac{S_1C_2}{F_1} + \frac{S_2C_1}{F_2}\right)\right| > 1 \qquad \text{(III-6-2b)}$$

qui assure que l'amplitude de ces modes décroît en pénétrant à l'intérieur du super-réseau et dans le vide. Les valeurs des F_i (i = 1, 2 et v) sont données par l'équation (I-5-23).

Maintenant, supposons avoir le super-réseau semi-infini de type GaAs/InAs en contact avec le vide. A l'aide d'un traitement numérique des résultats analytiques susmentionnés, nous apprécions l'existence des modes de phonon-polaritons localisés correspondants, en utilisant les valeurs numériques consignées dans le tableau I (voir chapitre II). Ainsi, dans le cas du super-réseau terminé par une couche de GaAs, nous avons obtenu les résultats indiqués par les courbes des figures III-4a (pour $\frac{d_1}{d_2} = \frac{1}{2}$) et III-4b (pour $\frac{d_1}{d_2} = 2$).

Remarquons que dans ces figures, comme dans toutes celles de ce chapitre, la ligne de la lumière est verticale et n'est donc pas représentée; les effets de retard étant négligés.

Celles-ci traduisent les variations des fréquences des modes de polaritons de volume et localisés en fonction de $k_{//} D$; $k_{//}$ étant la composante parallèle aux interfaces du vecteur d'onde et $D = d_1 + d_2$, pris égal à 300A°, la période du super-réseau. Sur ces figures, les zones hachurées correspondent aux bandes de volume (éq. III-2-35) qui sont définies dans les intervalles de fréquences (ω_{T1}, ω_{L1}) et (ω_{T2}, ω_{L2}) où les phonon-polaritons apparaissent. Ces bandes de volume sont séparées par des gaps où peuvent exister des modes de surface. Lorsque $d_1=0.5d_2$ (pour d_1/d_2 = constante), la figure (III-4a) met en relief les modes localisés dans les deux gaps pour une grande plage de $k_{//} D$; tandis que pour $d_1=2d_2$ (fig. III-4b), les états localisés n'existent que dans la région $\omega_{T1} < \omega < \omega_{L1}$. Le mode de surface qui apparaît entre les deux mini-gaps, pour des valeurs de $k_{//} D$ faibles, disparaît à partir de $k_{//} D=0.6$ et devient un mode résonnant à l'intérieur de la bande de volume. Notons que dans le cas exceptionnel où les couches du super-réseau ont même épaisseur ($d_1 = d_2$), les mini-bandes comprises dans l'intervalle de fréquences (ω_{Ti}, ω_{Li}) (i=1, 2) se confondent et seule la branche du mode localisé de surface, correspondant à la plus haute valeur, reste observable.

Notons finalement que le nombre et la position des modes de surface ainsi que les largeurs des bandes de volume, dépendent du rapport des épaisseurs d_1 et d_2 des couches qui forment le super-réseau.

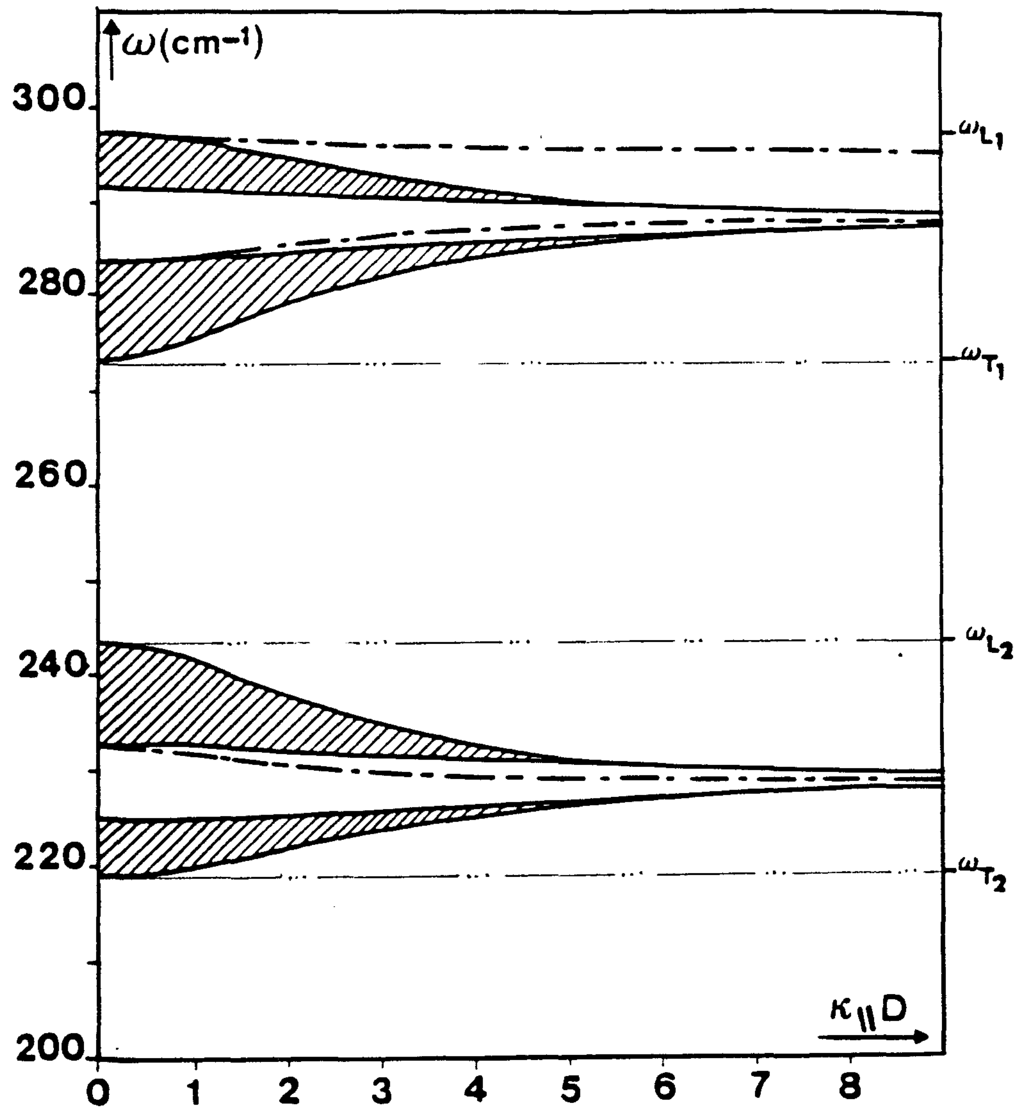
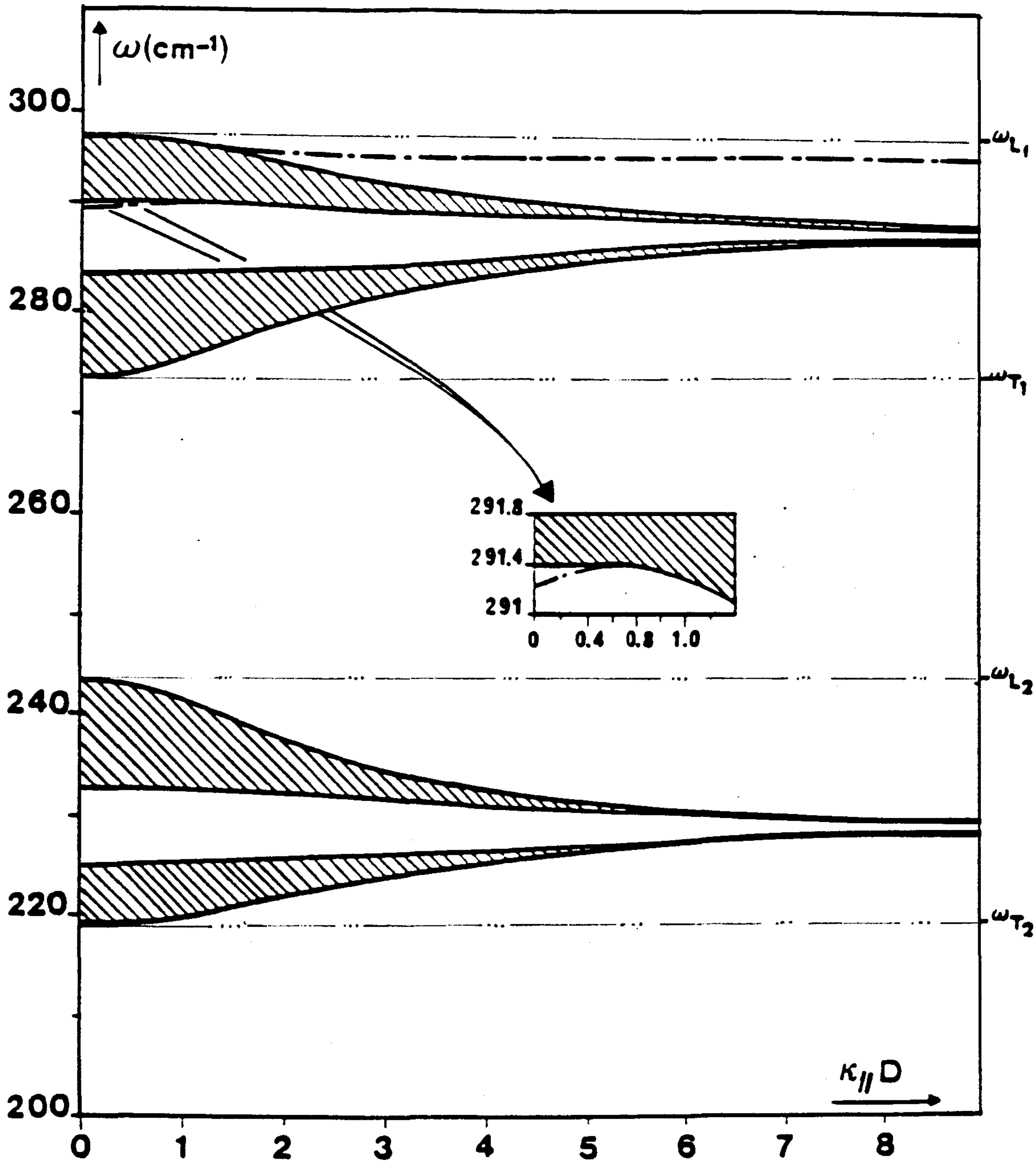


Figure III-4a: *Dispersion des phonon-polaritons localisés et de volume dans un super-réseau semi-infini constitué des matériaux diélectriques de types GaAs et InAs et terminé par une couche de GaAs et le vide. Les courbes représentent les variations de la fréquence* ω *en fonction de* $k_{//}D$; $k_{//}$ *est le module du vecteur de propagation parallèle aux interfaces,* $D=d_1+d_2$, *la période du super-réseau. Les zones hachurées correspondent aux bandes de volume, tandis que les lignes en traits discontinus représentent les phonon-polaritons de surface (de polarisation P) pour le super-réseau semi-infini terminé par une couche de GaAs (et le vide), d'épaisseur* $d_1 = 0.5d_2$.



<u>Figure III-4b</u>: *Mêmes légendes que sur la figure III-4a sauf qu'ici, l'épaisseur de la couche de surface du super-réseau semi-infini est prise égale à* $d_1 = 2d_2$.

III-6-2) <u>Polaritons dans un super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage en contact avec le vide</u>

Le schéma de la géométrie d'un tel système est représenté par la figure III-3c. Les fonctions diélectriques $\varepsilon_i(\omega)$ des différentes couches en contact dépendent de la fréquence ω et sont données par l'équation (III-6-1). Au moyen de la relation de dispersion (éq.III-4-19)

$$C_1S_2\left(\frac{F_2}{\mathcal{R}_v} - \frac{\mathcal{R}_v}{F_2}\right) + S_1S_2\left(\frac{F_2}{F_1} - \frac{F_1}{F_2}\right) + C_2S_1\left(\frac{F_1}{\mathcal{R}_v} - \frac{\mathcal{R}_v}{F_1}\right) = 0, \quad \text{(III-6-3a)}$$

avec la condition

$$\left| C_1C_2 + \frac{F_2}{F_1}S_1S_2 - \mathcal{R}_v\left(\frac{C_1S_2}{F_1} + \frac{C_2S_1}{F_2}\right)\right| > 1; \quad \text{(III-6-3b)}$$

où $\mathcal{R}_v$ est fourni par l'équation (III-4-16), nous pouvons étudier, de façon qualitative, l'existence des modes de polaritons localisés. Pour ce faire, nous supposons qu'une couche d'encapsulage de InP, d'épaisseur d_0, est déposée sur le super-réseau du type GaAs/InAs terminé par une couche de GaAs (la couche de InP étant en contact avec le vide). Par le biais d'un traitement numérique des résultats analytiques ci-dessus, nous avons obtenu les dispersions des modes de volume et des modes localisés en utilisant les données portées dans le tableau I.

Les courbes des figures III-5a et III-5b en donnent l'illustration respectivement pour $\frac{d_1}{d_2} = \frac{1}{2}$, $d_0 = D = 300$Å et $\frac{d_1}{d_2} = 2$, $d_0 = D$. Nous notons une importante variation des fréquences des modes localisés. Dans la figure III-5a, les deux modes localisés dans le gap, pour des fréquences comprises ente ω_{T1} et ω_{L1}, apparaissent au-dessous des deux bandes de volume. Ces deux états localisés deviennent des modes résonnants en pénétrant à l'intérieur des bandes de volume pour $k_{//} D \approx 1$. Sans la couche d'encapsulage, nous avons trouvé ces deux modes (figure III-4a) au-dessus des mêmes bandes de volume. Dans la figure III-5b, le mode localisé qui apparaît dans les gaps du spectre de volume du GaAs pour $k_{//} D < 1.9$, tend à devenir résonnant en pénétrant dans la bande de volume pour $k_{//}D \approx 1.9$. Pour $k_{//} D > 2$, ce mode reprend sa nature de mode localisé mais, cette fois-ci, au-dessous

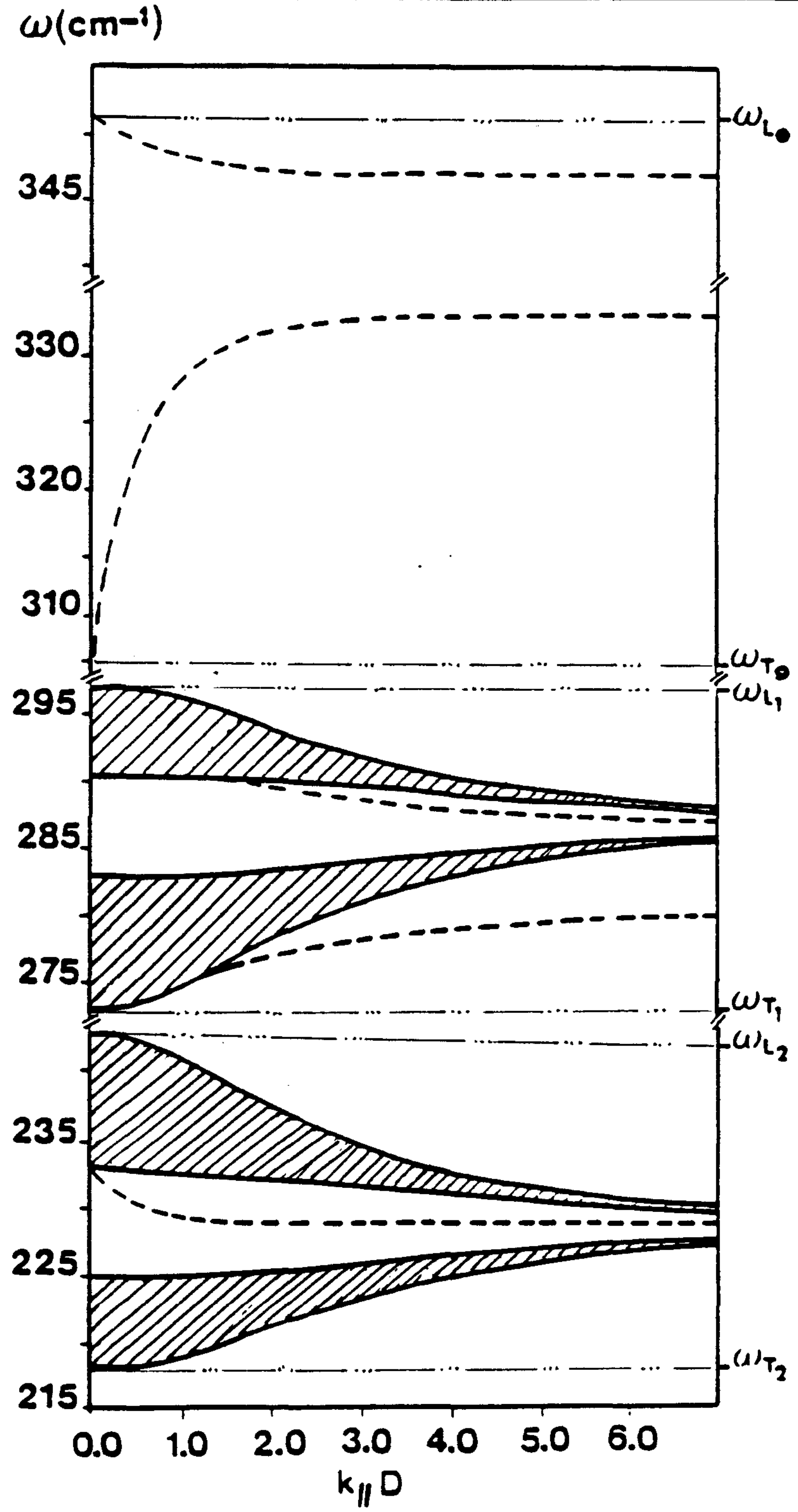


Figure III-5a: *Dispersion des phonon-polaritons de volume et localisés pour un super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage (limitée par le vide) (modes P). Les zones hachurées représentent les bandes de volume du super-réseau semi-infini GaAs/InAs sur lequel est déposée une couche homogène de InP, d'épaisseur $d_0 = D$; D est la période du su-per-réseau et $d_1 = 0.5d_2$. Les branches en traits discontinus correspondent aux fréquences des modes localisés.*

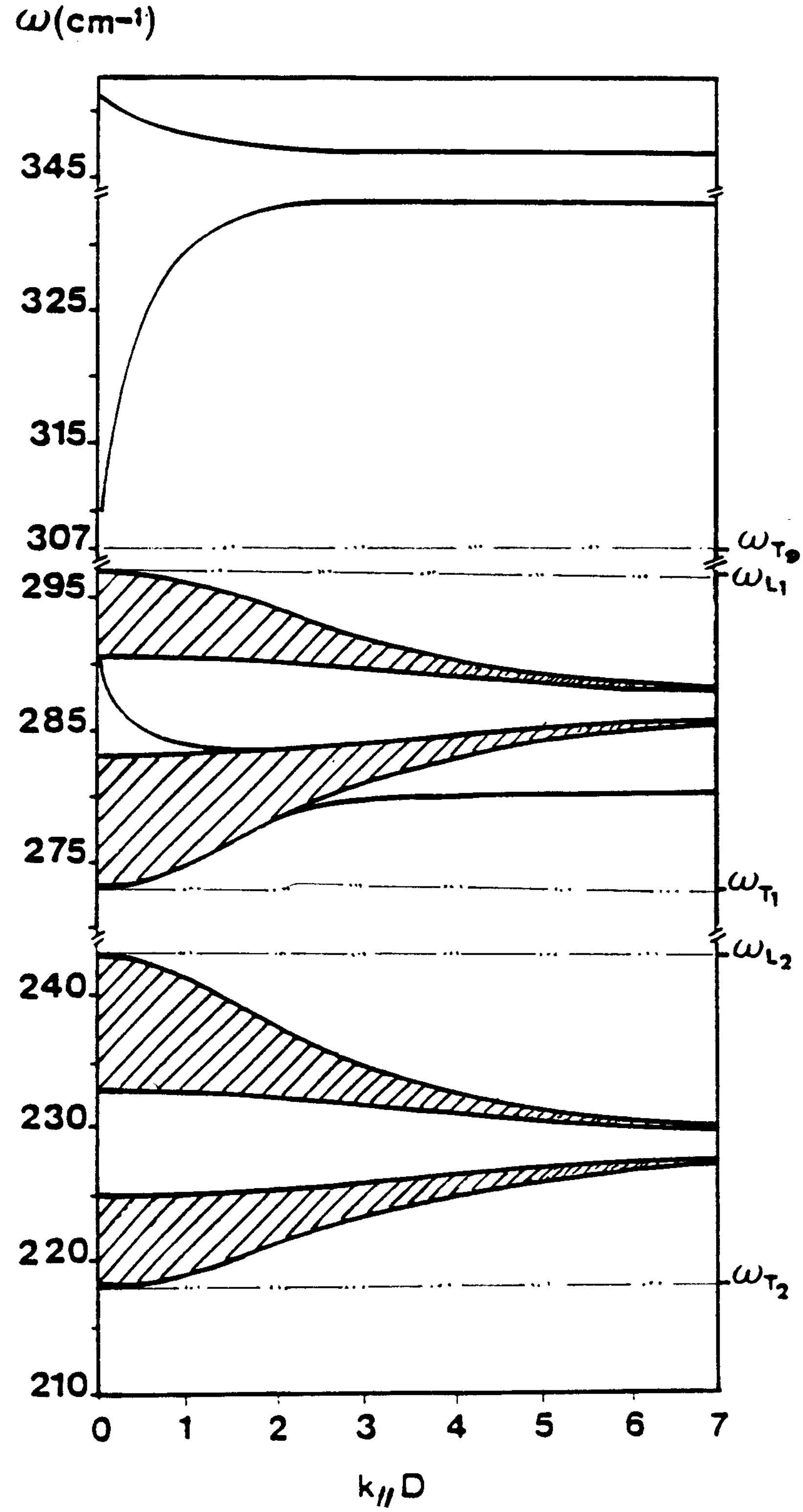


__Figure III-5b__: *Mêmes légendes que sur la figure III-5a. Ici, les modes de surface et d'interface sont obtenus pour $d_1 = 2d_2$ et indiqués par les lignes pleines.*

de la troisième bande de volume. Notons encore qu'en l'absence de la couche d'encapsulage, ce mode localisé se propage dans le gap au-dessus des deux bandes de volume du super-réseau comprises entre les fréquences ω_{T1} et ω_{L1}(voir fig. III-4b).

Dans les figures III-5, la branche qui correspond aux fréquences les plus élevées représente des modes localisés à l'interface "couche finie de InP/vide". La comparaison de ces résultats avec ceux indiqués sur les figures III-4a et III-4b fait remarquer que la présence de la couche d'encapsulage, avec des fréquences ω_{T0} et ω_{L0} supérieures à celles des matériaux qui forment le super-réseau, tend à pousser les modes de surface vers des fréquences plus faibles. Lorsque cette couche est semi-infinie (son épaisseur d_0 tendant alors vers l'infini), cette branche disparaît. Notons aussi que la position et le nombre de modes varient lorsque c'est la couche de InAs du super-réseau qui est en contact avec la couche d'encapsulage.

Les fréquences des modes localisés varient avec l'épaisseur d_0 de la couche d'encapsulage. La figure III-6 présente ces variations en fonction de $\frac{d_0}{D}$ pour $k_{//} D=2.5$. Celles-ci sont plus marquées pour les valeurs de d_0 variant entre 0 et 0.75 D. Pour $d_0 < 0.25$ D, les deuxième et troisième branches localisées tendent à pénétrer dans la bande de volume pour donner des modes résonnants. Notons aussi que pour $d_0 > D$, les fréquences des branches localisées tendent vers des valeurs asymptôtiques indépendantes de l'épaisseur d_0.

Nous avons aussi considéré le cas particulier où la couche d'encapsulage est de même nature que l'une des couches du super-réseau. L'application présentée ici se réfère au super-réseau GaAs/InAs pour $d_1=2d_2$ et la période $D = d_1 + d_2$. La figure III-7a donne la courbe de dispersion des bandes de volume et des modes de surface de deux super-réseaux complémentaires, obtenus en coupant le super-réseau infini au niveau d'une couche de GaAs. Le clivage est effectué de telle manière que les épaisseurs des couches de surface des deux super-réseaux semi-infinis, soient respectivement $d_0=0.2d_2$ et $d_0=0.8d_2$. Sur cette figure, les zones hachurées correspondent aux bandes de volume (phonon-polaritons de volume) séparées par des gaps où peuvent exister les modes localisés de surface. On observe trois branches d'états de surface associées soit à un super-réseau semi-infini, soit à son complémentaire. Les fréquences associées à ces modes dépendent fortement de l'épaisseur de la couche de surface de GaAs; nous reviendrons sur ce point dans la discussion de la figure III-7b.

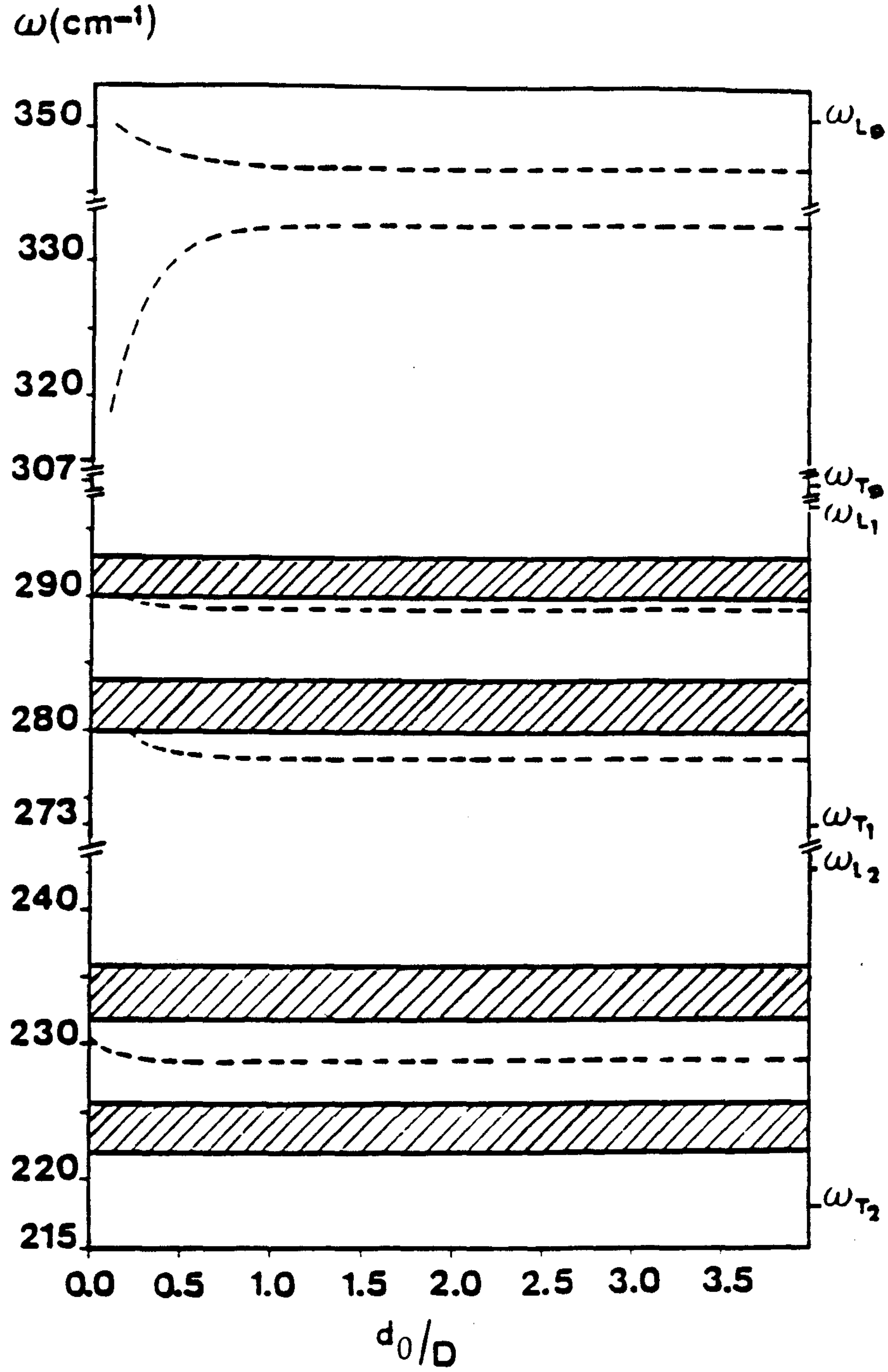
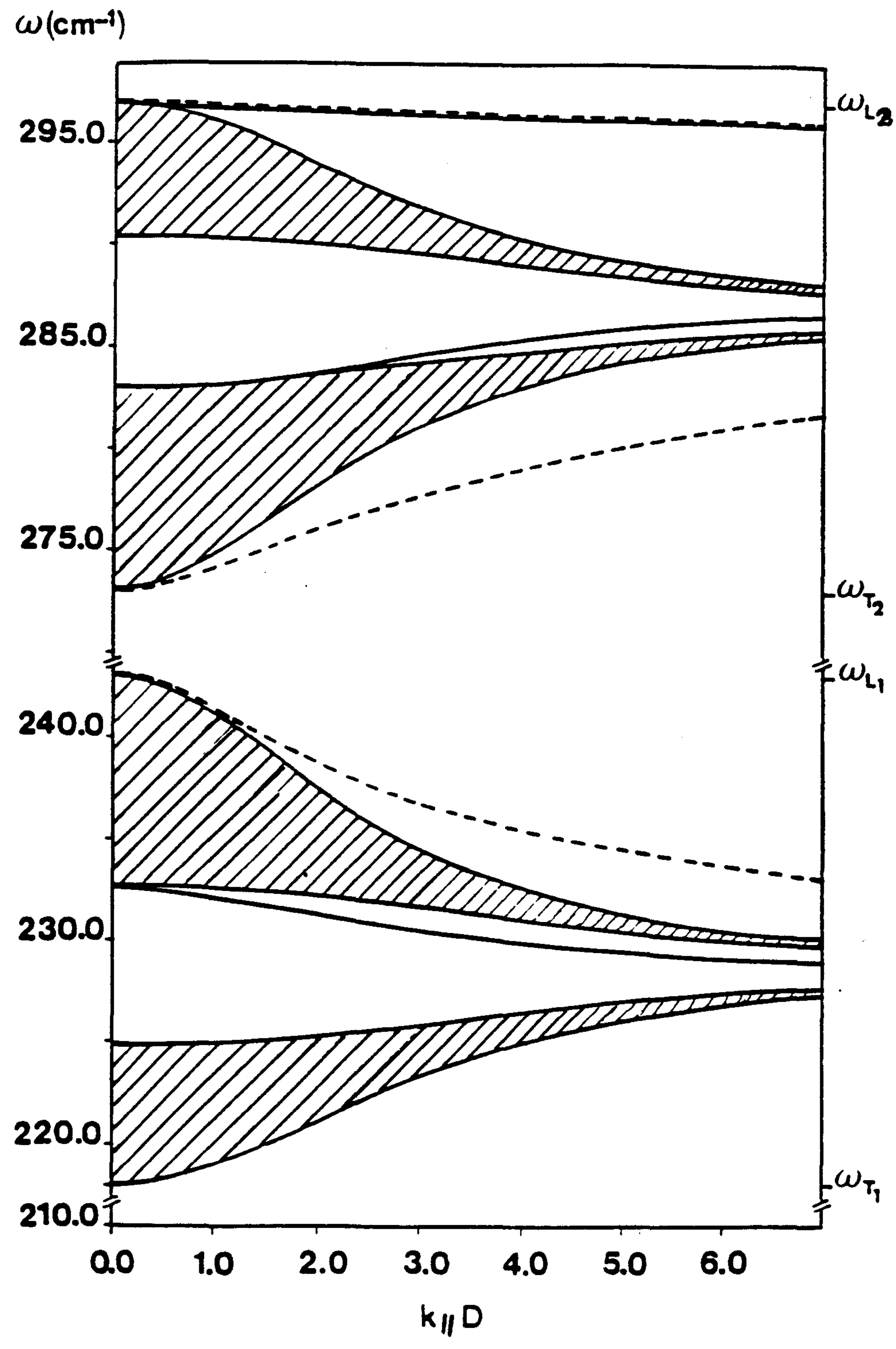


Figure III-6: *Variation des modes de polaritons (présentés sur la figure III-5a) en fonction de l'épaisseur de la couche d'encapsulage. Sur cette figure, sont représentées les fréquences ω des modes de polaritons localisés (courbes en tirets) en fonction de d_0 / D pour $k_{//}D=2.5$. La grandeur d_0 est l'épaisseur de la couche de InP ajoutée. Les parties hachurées représentent les quatre bandes de volume du super-réseau semi-infini séparées par des gaps.*



<u>Figure III-7a</u>: *Dispersion des modes de phonon-polaritons dans deux super-réseaux complémentaires. Les zones hachurées représentent les bandes de volume du super-réseau semi-infini ,terminé par une couche de GaAs , obtenu en coupant le super-réseau infini InAs/GaAs. Les branches en traits continus (respectivement discontinus) indiquent les modes de phonon-polaritons localisés lorsque l'épaisseur de la couche GaAs du super-réseau semi-infini est égale à* $d_0=0.8\ d_2$ *(respectivement,* $d_0=0.2\ d_2$*).* d_2 *désigne l'épaisseur de InAs dans le super-réseau.*

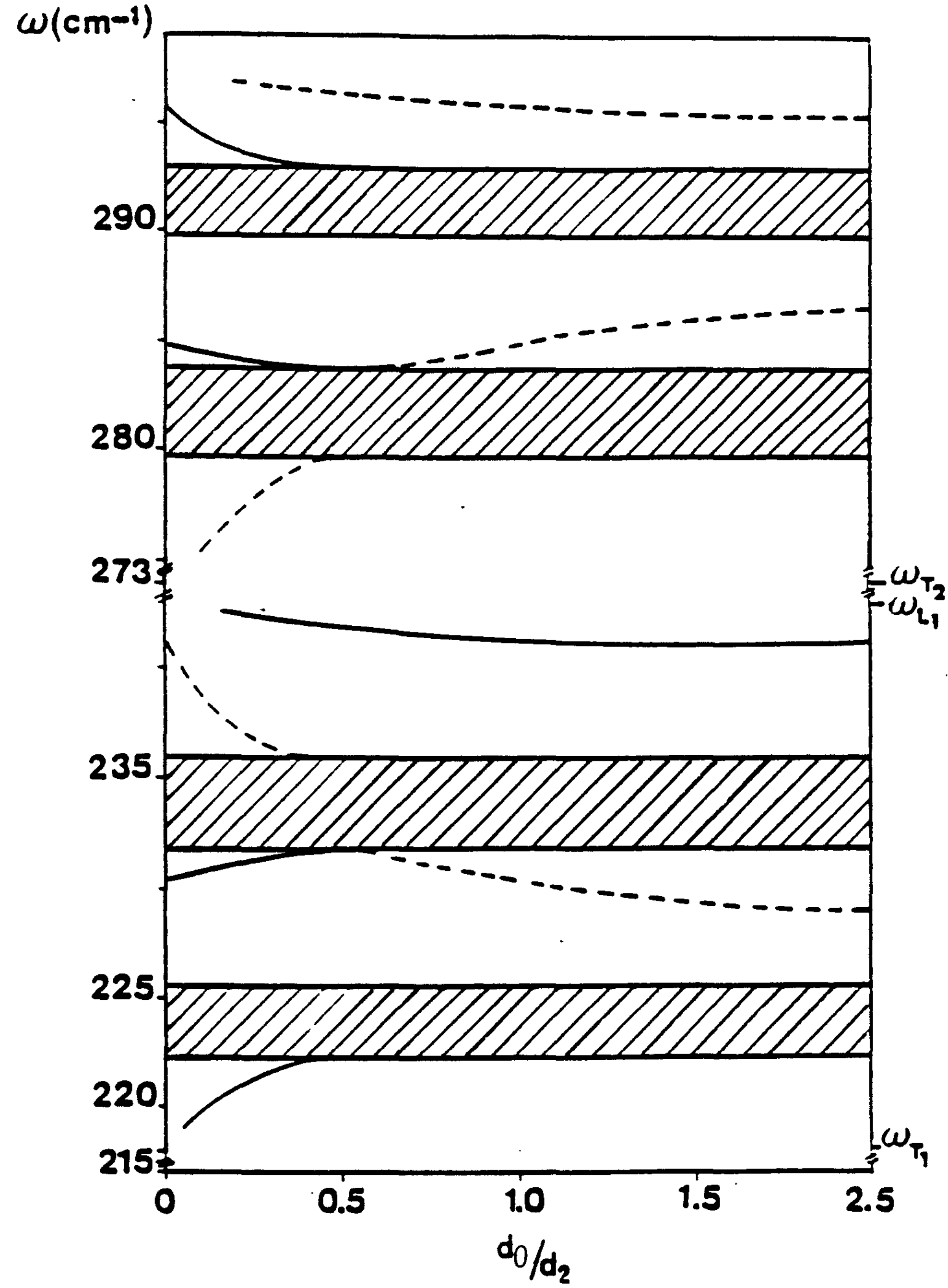


Figure III-7b: *Variation des modes de polaritons en fonction de l'épaisseur de la couche d'encapsulage ; cette couche étant de même nature que l'une des couches de volume du super-réseau semi-infini GaAs/InAs. Sur cette figure, sont représentées, pour $k_{//}D=2.5$, les fréquences en fonction de d_0 / d_2. Les branches de surface sont indiquées soit par des traits discontinus (lorsque la couche d'encapsulage est du type GaAs), soit par des courbes pleines (lorsque la couche d'encapsulage est du type InAs). Les zones hachurées correspondent aux bandes de volume du super-réseau.*

Des démarches analogues à celles qui précèdent (fig.III-6) nous ont permis ainsi d'étudier les variations des états localisés en fonction de ladite couche. Les courbes de la figure III-7b en donnent l'illustration dans le cas concret d'un tel système composite formé d'un super-réseau semi-infini de type GaAs/InAs en contact avec une couche d'encapsulage de GaAs (traits discontinus) ou de InAs (traits pleins). Ces courbes, obtenues pour $k_{//} D = 2.5$, traduisent les variations des fréquences correspondant aux états localisés en fonction de $\frac{d_0}{d_2}$. Nous voyons, à travers cette figure, que pour $\frac{d_0}{d_2} = 1$, il y a autant de branches localisées que de bandes de volume (zones hachurées) pour les deux systèmes complémentaires réunis. Notons par ailleurs, qu'au fur et à mesure que l'épaisseur de la couche d'encapsulage devient importante, les fréquences des modes localisés augmentent ou diminuent sauf pour la région $0.4 < \frac{d_0}{d_2} < 0.6$ pour laquelle certaines branches ont tendance à pénétrer dans les bandes de volume pour devenir des états résonants. Pour $\frac{d_0}{d_2} > 0.6$, deux des branches correspondant aux modes tels que la couche d'encapsulage soit du GaAs, se détachent des bandes de volume pour retrouver la nature des modes localisés de surface. Notons aussi que pour $\frac{d_0}{d_2} < 0.4$, on observe l'existence de quatre à cinq états de surface lorsque le super-réseau se termine par une couche de InAs. Les branches de surface dont les prolongements n'arrivent pas jusqu'à $d_0 = 0$, sont limitées par les fréquences transverses ω_{Ti} et longitudinales ω_{Li} $(i=1, 2)$.

III-6-3) Interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat

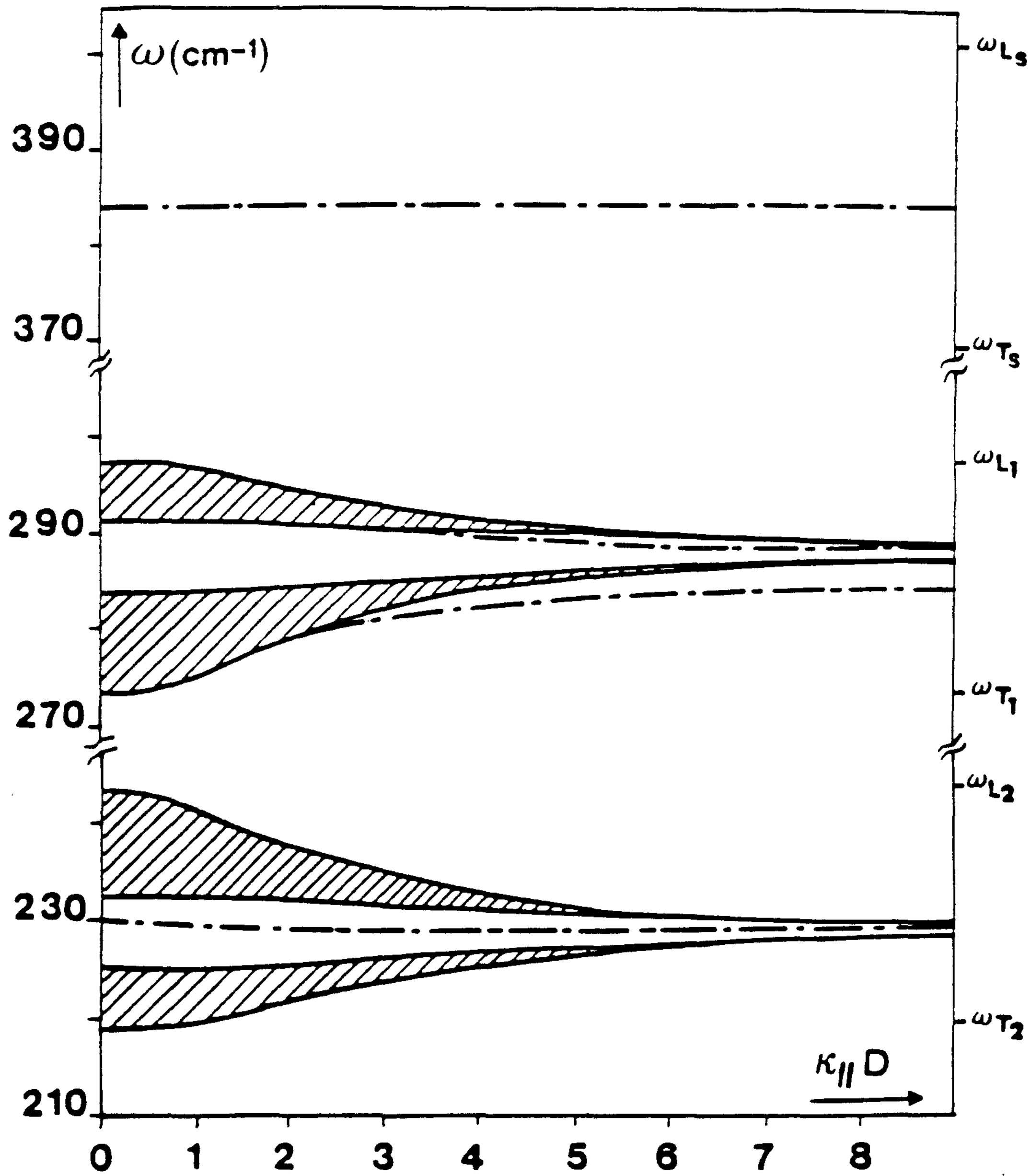
Ce système composite peut être défini comme étant le cas limite de celui dont le schéma est donné par la figure III-3c lorsque l'épaisseur d_0 de la couche homogène tend vers l'infini. L'existence des états localisés des phonon-polaritons est régie ainsi, comme nous l'avons déjà fait remarquer au paragraphe III-4-3, par les conditions suivantes (F_0 devenant alors F_s) :

$$C_1S_2\left(\frac{F_2}{F_s}-\frac{F_s}{F_2}\right)+S_1S_2\left(\frac{F_2}{F_1}-\frac{F_1}{F_2}\right)+C_2S_1\left(\frac{F_1}{F_s}-\frac{F_s}{F_1}\right)=0; \qquad \text{(III-6-4a)}$$

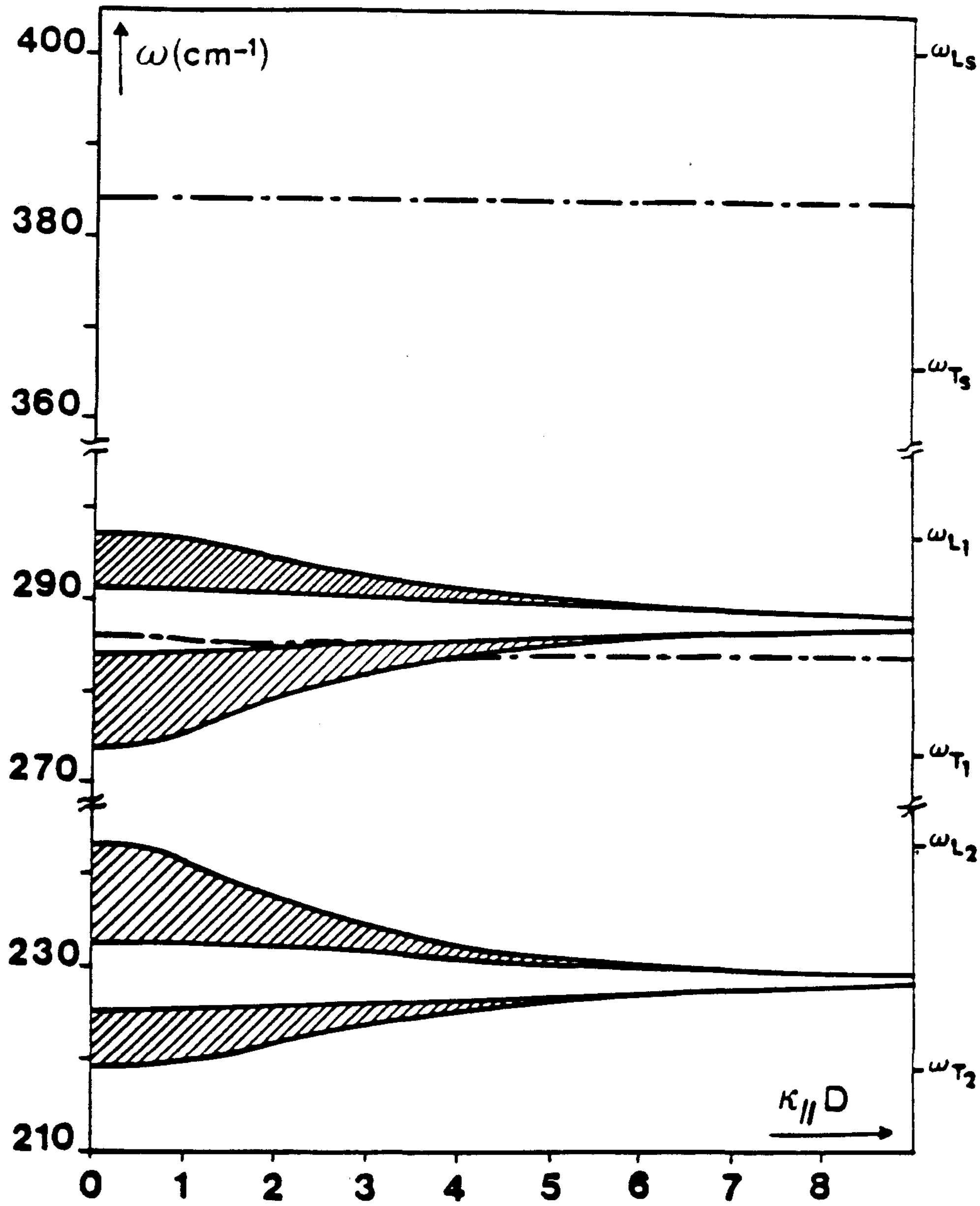
avec la condition,

$$\left|\,C_1C_2+\frac{F_2}{F_1}S_1S_2-F_s\left(\frac{S_1C_2}{F_1}+\frac{S_2C_1}{F_2}\right)\right|>1; \qquad \text{(III-6-4b)}$$

où l'indice "s" est relatif au substrat et F_s est défini de la même manière que F_1 et F_2 (éq. I-5-23). Les fonctions diélectriques $\varepsilon_i(\omega)$ qui entrent dans l'expression de ces F_i ($i = 1,2$ et s)· sont données par l'équation (III-6-1).



<u>Figure III-8a</u>: *Dispersion des modes de polaritons localisés et de volume pour l'interface entre un super- réseau semi-infini et un substrat. Sur cette figure, sont illustrés les résultats pour le super-réseau semi-infini GaAs/InAs (terminé par du GaAs) adsorbé sur le substrat GaP. Les branches en traits discontinus correspondent aux fréquences des modes de polaritons localisés pour d (GaAs) = 0.5 d (InAs).*



<u>Figure III-8b</u>: *Dispersion des modes de polaritons localisés et de volume pour l'interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat. Sur cette figure, sont illustrés les résultats pour le super-réseau semi-infini GaAs/InAs (terminé par du GaAs) adsorbé sur le substrat GaP. Les branches en traits discontinus correspondent aux fréquences des modes de polaritons localisés pour d (GaAs) = 2 d (InAs).*

Des démarches analogues aux précédentes nous ont permis alors d'apprécier, de façon qualitative, l'apparition des états de phonon-polaritons localisés dans le cas de l'interface entre un super-réseau du type GaAs/InAs, terminé par une couche de GaAs, et un substrat de GaP.

En effet, les courbes des figures (III-8) illustrent l'évolution de ces modes d'interface en fonction de $k_{//} D$.

Dans le premier cas (fig. III-8a, pour $\frac{d_1}{d_2} = \frac{1}{2}$ et D = 300Å), nous comptons trois branches localisées qui apparaissent au-dessous des mini-bandes de la couche GaAs et de la seconde mini-bande de la couche InAs du super-réseau; une autre se retrouve dans l'intervalle de fréquences (ω_{Ts}, ω_{Ls}). Les fréquences correspondantes varient très peu avec $k_{//} D$. Dans le deuxième cas (fig. III-8b, pour $\frac{d_1}{d_2} = 2$ et D=300Å), les deux branches localisées situées au-dessus et au-dessous de la troisième mini-bande du super-réseau, tendent à devenir des modes résonnants en pénétrant dans la bande volume de GaAs pour $k_{//} D \geq 3.1$ et $k_{//} D \leq 3.5$; tandis que le mode localisé qui apparaît dans l'intervalle (ω_{Ts}, ω_{Ls}) reste identiquement le même que celui présenté dans la figure III-8a. Les branches situées dans les intervalles de fréquences (ω_{Ti}, ω_{Li}), avec i=1ou 2 possèdent des fréquences plus faibles que celles qui apparaissent dans le cas de l'interface super-réseau/vide. Ceci est dû à la présence du substrat dont les fréquences ω_{Ts} et ω_{Ls} sont supérieures à celles des éléments du super-réseau. Cette situation est observée aussi dans le cas du super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage en contact avec le vide. Signalons enfin que dans le cas où le substrat est de même nature que l'un des éléments du super-réseau, il n'existe pas de modes d'interface.

A travers ces résultats, nous remarquons que l'existence des modes localisés est très influencée par le rapport entre les épaisseurs d_1 et d_2 des couches du super-réseau semi-infini et la nature de la couche par laquelle se termine le super-réseau.

III-7) <u>Conclusion</u>

Dans ce chapitre, nous avons appliqué la théorie de réponse d'interface à l'étude des phonon-polaritons dans les super-réseaux diélectriques à deux couches. Nous avons ainsi pu bâtir les expressions analytiques des fonctions réponses (ou fonctions de Green) associées plus précisément aux systèmes multicouches tels que: le super-réseau semi-infini, l'interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat et la couche d'encapsulage déposée sur un super-réseau semi-infini. Les relations de dispersion correspondantes, données par les pôles de ces fonctions réponses ont été établies. En plus, la connaissance des éléments de la fonction réponse nous a permis de construire les expressions analytiques des variations de densités d'états dans les matériaux composites cités ci-dessus.

Chemin faisant, nous avons, par un traitement numérique de ces résultats analytiques, apprécié l'existence des modes de polaritons localisés dans les cas concrets de systèmes composites constitués de matériaux de GaAs, InAs, InP et/ou GaP.

L'examen des résultats originaux (déjà soumis et acceptés pour publication) obtenus et illustrés par les courbes des figures données plus haut montre :

i) une varition des états localisés de surface et d'interface en fonction de la nature de la couche de surface du super-réseau;

ii) une variation des états localisés de surface et d'interface (en fréquence et en nombre) et des largeurs des bandes de volume en fonction du rapport des épaisseurs des couches du super-réseau (cas du système "vide/GaAs/InAs/..."; voir les figures III-4);

iii) une tendance de certaines branches localisées à pénétrer dans les bandes de volume pour devenir des modes résonnants.

iv) une variation des fréquences associées aux modes localisés en fonction de l'épaisseur de la couche d'encapsulage.

Ces modes de surface et d'interface peuvent être observés expérimentalement par les méthodes de réflexion totale atténuée.

Faisons remarquer que les résultats analytiques présentés ici, pour les phonon-polaritons peuvent être transposés directement aux structures électroniques des super-réseaux dans l'approximation de la masse effective [26], aux ondes élastiques transverses [27] et aux polaritons associés aux plasmons. Dans l'esprit de telle extension, nous présentons, dans le chapitre suivant, une application de la théorie de réponse d'interface pour l'étude des ondes optiques (cas des modes de polarisation S) [28-30].

Notons que les calculs effectués ci-dessus peuvent être faits pour les mêmes excitations dans des hétérostructures plus complexes par exemple, un super-réseau fini pris en sandwich entre deux substrats, un super-réseau à trois couches [31]. Signalons aussi que les résultats analytiques obtenus dans ce chapitre peuvent être utilisés pour l'étude des plasmon-polaritons et des ondes optiques en polarisation P.

Bibliographie du chapitre III

[1] **N. Raj** and **D.R. Tilley**, Solid State Commun., 55 (1985) 373.

[2] **W.M. Liu, G. Eliasson** and **J.J. Quinn**, Solid State Commun., 55 (1985) 533.

[3] **A. Dereux, J.-P. Vigneron, PH. Lambin** and **A.A. Lucas**, Phys. Rev. B38 (1988) 5438; Physica Stripta 38 (1988) 462.

[4] **H. Chu** and **Y.-C. Chang**, Phys. Rev. B 38 (1988) 1236.

[5] **G.F. Guiliani** and **J.J. Quinn**, Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 919.

[6] **R.E. Camley** and **D.L. Mills**, Phys. Rev. B29 (1984) 1695.

[7] **N.C. Constantinou** and **M.G. Cottam**, J. Phys. C. (Solid State Phys.) 19 (1986) 739.

[8] **N. Raj, R.E. Camley** and **D.R. Tilley**, J. Phys. C. (Solid State Phys.) 20 (1987) 5203; **N.C. Constantinou** and **M.G. Cottam**, Solid State Commun. 81 (1992) 321.

[9] **S. Ushioda**, J. Phys., Colloque C5 (1984) 243.

[10] **PH. Lambin , J.-P. Vigneron** and **A.A. Lucas**, Solid State Commun., 54(1985) 257.

[11] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. Rep. 6 (1986) 119; Surf. Sci. 175 (1986) 1.

[12] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 182 (1987) 362; Phys. Rev. B37 (1988) 8027 et B 43 (1991) 1830.

[13] **M.L. Bah, A. Akjouj** and **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. Rep. 16 (1992) 95.

[14] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 180 (1987) 489.

[15] **M.G. Cottam and A.A. Maradudin**, in : "Surface Excitations", Modern Problems in Condensed Matter Sciences, Vol. 9 Eds by V.M. Agranovich and R. Loudon (North Holland, Amsterdam, 1986).

[16] **K. Portz** and **A.A. Maradudin**, Phys. Rev. B16 (1977) 3535.

[17] **M.L. Bah, A. Akjouj, El H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani** and **L. Dobrzynski**, Influence of capping layers on Surface phonon - polaritons in superlattices, J. Phys.C: Condensed Matter, sous presse (1995).

[18] **El H. El Boudouti**, Thèse de Doctorat de l'Université de Lille I (1994).

[19] **J. J. Quinn, G. Eliasson** and **P. Hawrylak**, in: " Spatial Dispersion in Solids and Plasmons", Vol. 1, edited by P. Halevi (North-Holland 1992).

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

[21] **J.S. Nkoma**, Solid State Commun. 64 (1987) 1383.

[22] **M. Babiker, N.C. Constantinou** and **M.G. Cottam**, J. Phys. C (Solid State Phys.) 20 (1987) 4581.

[23] **N.F. Gashimzade**, Physica Status Solidi (b) 160 (1990) K113.

[24] **A. Yariv** and **P. Yeh** , in: "Optical Waves in Crystals", (Willey Pub, New York, 1984);
P. Yeh, in: "Optical Waves in Layered Media", (Willey Pub., NY, 1988)

[25] **E. Burstein**, in: "Phonons and Phonon Interactions", Ed. by T.A. Bak (Benjamin, New York, 1964).

[26] Voir par exemple, **Hung-Sik Cho** and **Paul R. Prucnal**, Phys. Rev. B36 (1987) 3237; **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 200 (1988) 435; **M. Steslicka, R. Kucharczyk** and **M.L. Glasser**, Phys. Rev. B42 (1990) 1458.

[27] Voir par exemple, **El H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani, E.M. Khourdifi** and **L. Dobrzynski**, Phys. Rev. B48 (1993) 10987.

[28] Voir par exemple , **A. Akjouj, M. L. Bah, El H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani** and **L. Dobrzynski**, Proceedings of the 17th International Seminar on Surface Physics, Kudowa (Poland), Vacuum, sous presse (1995);

[29] **A. Akjouj, M. L. Bah, El H. EL Boudouti, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski**, Rapports de la 4ème Journée Maghrébine de Sciences des Matériaux (Casablanca, Maroc, 23 - 24 Novembre 1994). Annales de Chimie, Sciences des Matériaux, sous presse (1995).

[30] **M. L. Bah, A. Akjouj, El H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani** and **L. Dobrzynski** , Suface and Interface Optical Waves in Superlattices: Transverse Electric Localized and Resonant Modes, soumis à: Journal of Optical Society of America..

[31] **J. Mendialdua , A. Rodriguez , M. More, A. Akjouj** and **L. Dobrzynski,** Phys. Rev. B 50 (1994) 14605.

Chapitre IV

CHAPITRE IV

MODES OPTIQUES LOCALISES ET RESONNANTS DANS LES SUPER-RESEAUX
(POLARISATION S)

IV - 1) Introduction

Dans ce chapitre, seront étudiés les modes optiques dans les super-réseaux. Nous utilisons ici l'appellation mode optique car, les fonctions diélectriques du solide sont constantes et donc indépendantes des phonons du milieu, à la différence des polaritons étudiés dans le chapitre précédent. La propagation de telles ondes dans ces systèmes composites a été l'objet d'un grand nombre d'études expérimentales et théoriques au cours de la dernière décade. Les résultats de ces travaux sont résumés dans plusieurs articles de revues récentes [1-4]. L'étude de la propagation des ondes optiques dans les super-réseaux présente un grand intérêt et permet d'analyser un certain nombre de phénomènes physiques [1] (réflexion de Bragg, diffraction des rayons X dans les cristaux constituent de bons exemples de propagation de ces ondes dans ces hétérostructures).

Tout comme les modes de surface de polarisation P (voir par exemple le chapitre précédent et les références [2–11]), l'existence des modes électromagnétiques de polarisation S localisés à la surface d'un super-réseau a été démontrée [12] et observée [13, 14] dans une structure périodique constituée de 12 paires de couches déposées sur un substrat de GaAs; chaque paire étant formée d'une couche de GaAs, d'épaisseur 0.5µm et d'une autre de $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$, de même épaisseur.

Dans le cas simple des modes de polarisation S, le champ électrique a une seule composante non nulle suivant l'axe x_2, lorsque x_3 est l'axe du super-réseau et le vecteur d'onde $\vec{k}_{//}$ (parallèle aux interfaces) est parallèle à x_1.

Dans le présent chapitre, nous nous intéressons à l'étude de ces ondes optiques de polarisation S dans les super-réseaux semi-infinis avec ou sans couche d'encapsulage [15]. La méthode de la théorie des réponses d'interface [16] utilisée ici nous permet d'étudier les modes optiques localisés et résonnants dans les super-réseaux diélectriques, à l'aide des résultats généraux du chapitre précédent.

La connaissance de la fonction réponse dans ces systèmes composites nous permet de calculer aussi bien la densité d'états locale que la densité d'états totale qui sont des fonctions de la fréquence ω et du vecteur d'onde $\vec{k}_{//}$ (parallèle aux interfaces). En plus de la dispersion des états de volume et localisés, nous pouvons aussi obtenir les densités d'états locales et totales et par conséquent, les modes résonnants qui apparaissent à l'intérieur des bandes de volume. Ces modes localisés et résonnants associés aux différentes inhomogénéités introduites dans le super-réseau (surface, interface, couche d'encapsulage), apparaissent comme des pics de densités d'états soit à l'intérieur des mini-gaps, soit à l'intérieur des bandes de volume du super-réseau.

Pour aboutir aux résultats escomptés, nous construisons, à partir des résultats présentés au chapitre III, les relations de dispersion des modes optiques ainsi que la fonction réponse associée au super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage (voir le schéma de la figure III-3c). Nous écrivons aussi les expressions analytiques des densités d'états (locales et totales). Avant de donner quelques applications numériques pour illustrer nos résultats analytiques, nous examinons le cas limite de l'interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat (autrement dit, le cas d'un super-réseau sans une couche d'encapsulage).

IV-2) Rappel de quelques équations de base pour les super-réseaux diélectriques isotropes

Rappelons que le super-réseau est formé d'une répétition infinie de deux couches diélectriques isotropes formant une cellule unité n. Chacune de ces couches, d'épaisseur d_i, est notée i=1 ou 2 à l'intérieur de la cellule n. Comme précédemment, toutes les interfaces sont prises parallèles au plan (x_1,x_2). Ainsi, x_3 représente l'axe du système physique et toute couche i du super-réseau appartenant à la cellule n est notée par (n, i, x_3), avec $-\frac{d_i}{2} \leq x_3 \leq \frac{d_i}{2}$. La grandeur D $= d_1 + d_2$ définit la période du super-réseau.

Il a été montré [17] que tous les éléments de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}(k_{//},\omega \mid x_3,x'_3)$ des systèmes composites diélectriques isotropes et en particulier d'un super-réseau peuvent être aisément déduits à partir de l'élément de base $g(k_{//},\omega \mid x_3,x'_3)$; $k_{//}$ étant le module du vecteur d'onde parallèle aux interfaces et ω la fréquence des ondes électromagnétiques. L'équation de volume de base pour un milieu infini homogène i peut être écrite:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x_3^2} - \alpha_i^2 \right) G_i(k_{//},\omega \mid x_3,x'_3) = \delta(x_3-x'_3), \quad -\infty < x_3, x'_3 < +\infty \; ; \qquad \text{(IV-2-1)}$$

avec

$$\alpha_i(k_{//},\omega) = \left(k_{//}^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\,\varepsilon_i \right)^{1/2} \qquad \text{(IV-2-2)}$$

où c est la vitesse de la lumière, ε_i la constante diélectrique, $G_i(k_{//}, \omega \mid x_3, x'_3)$ la fonction réponse de volume.

Comme ce chapitre est uniquement dédié aux modes de polarisation S, seule la composante 22 de la fonction réponse intervient. Pour des raisons de simplicité, nous omettrons dans tout ce qui suit cet indice.

L'expression explicite (éq. III-2-35) donnant les relations de dispersion de volume pour n'importe quel super-réseau infini est de la forme:

$$\cos(k_3 D) = C_1 C_2 + \frac{1}{2}\left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1}\right) S_1 S_2 \; ; \qquad \text{(IV-2-3)}$$

où

$$C_i = \mathrm{ch}(\alpha_i\, d_i), \qquad \text{(IV-2-4)}$$

$$S_i = \mathrm{sh}(\alpha_i\, d_i); \qquad \text{(IV-2-5)}$$

$$F_i = \alpha_i \; ; \qquad \text{(IV-2-6)}$$

et k_3 représente la composante perpendiculaire aux couches du vecteur d'onde $\vec{k} \equiv (\vec{k}_{//}, k_3)$ (voir par exemple, les références [18] et [19]).

IV-3) Densité d'états

La connaissance de la fonction réponse donnée dans l'appendice C, nous permet de calculer, pour une valeur donnée de $k_{//}$, les densités d'états locales et totales pour un super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage (fig.III-3c). Nous indiquerons comment on peut obtenir, à partir de ces quantités, des résultats similaires pour deux cas limites, à savoir, le cas d'un super-réseau semi-infini sans une couche d'encapsulage et celui d'un super-réseau semi-infini en contact avec un substrat homogène semi- infini.

IV-3-1) Densité d'états locale

La constante diélectrique ε_i étant indépendante de ω, la densité d'états locale sur le plan (n, i, x_3) est donnée par:

$$\mathrm{n}(\omega^2, k_{//}; n, i, x_3) = -\frac{\varepsilon_i}{\pi c^2} \operatorname{Im} d^+(\omega^2, k_{//}; n, i, x_3; n, i, x_3); \qquad \text{(IV-3-1)}$$

où

$$d^+(\omega^2) = \lim_{\Gamma \to 0} d(\omega^2 + i\Gamma), \qquad \text{(IV-3-2)}$$

et $d(\omega^2)$ est la fonction réponse dont les éléments sont donnés dans l'appendice C. Les densités d'états peuvent être aussi exprimées en fonction de ω, plutôt que ω^2, en utilisant la relation $\mathrm{n}(\omega) = 2\,\omega\,\mathrm{n}(\omega^2)$. A partir des éléments de la fonction réponse donnés dans l'appendice C, nous calculons les densités d'états à l'interface entre le vide et la couche d'encapsulage ($n = 0$, $i=0$) d'épaisseur d_0 (voir le schéma de la figure III-3c). Et nous obtenons:

$$n_s\left(\omega^2, k_{//}; 0, 0, \frac{d_0}{2}\right) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im}\left[\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} + \frac{S_0}{F_0 C_0}\left(C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t\right)\right] \frac{1}{\left(1 + \frac{F_v S_0}{F_0 C_0}\right)\Delta}; \qquad \text{(IV-3-3)}$$

$$\text{où} \qquad t = \begin{cases} \eta + (\eta^2 - 1)^{1/2} & n < -1 \\ \eta + i(1 - \eta^2)^{1/2} & -1 < \eta < 1, \\ \eta - (\eta^2 - 1)^{1/2} & \eta > 1 \end{cases} \qquad \text{(IV-3-4)}$$

$$\text{avec} \qquad \eta = C_1 C_2 + \frac{1}{2}\left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1}\right) S_1 S_2, \qquad \text{(IV-3-5)}$$

$$\Delta = C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1} S_1 S_2 - t^{-1} - R F_v \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1}\right) \qquad \text{(IV-3-6)}$$

et
$$R = \frac{1 + \dfrac{F_0 S_0}{F_v C_0}}{1 + \dfrac{F_v S_0}{F_0 C_0}}, \qquad \text{(IV-3-7)}$$

et F_0, F_v, C_0, S_0, ont les mêmes définitions que F_i, C_i, S_i (éqs. IV-2-4, IV-2- 5, IV-2-6).

De façon analogue, nous obtenons l'expression suivante de la densité d'états à l'interface entre la couche d'encapsulage et le super-réseau semi-infini:

$$n_i(\omega^2, k_{//}; 0, 0, \frac{-d_0}{2}) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) . \Delta^{-1}. \qquad \text{(IV-3-8)}$$

IV-3-2) <u>Densité d'états totale</u>

La densité d'états totale, pour une valeur donnée de $k_{//}$, se calcule en intégrant sur x_3 et en sommant sur n et i la densité d'états locale $n(\omega^2, k_{//}; n, i, x_3)$.

Nous nous intéressons ici plus particulièrement à la variation de la densité d'états totale qui est égale à la différence entre la densité d'états du super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage (n=0, i=0), en contact avec le vide (voir fig. III-3c) et celle du super-réseau infini ayant le même nombre de couches que le super-réseau semi-infini et du vide infini ayant le même volume que le vide en contact avec le super-réseau. Comme nous l'avons déjà indiqué dans le chapitre précédent, cette variation $\Delta n(\omega^2)$ s'écrit comme la somme des variations $\Delta_1 n(\omega^2)$ et $\Delta_2 n(\omega^2)$ dues aux couches 1 et 2, de la densité d'états $n_0(\omega^2)$ à l'intérieur de la couche d'encapsulage i = 0 et de la variation de la densité d'états $\Delta_v n(\omega^2)$ dans le vide:

$$\Delta n(\omega^2) = \Delta_1 n(\omega^2) + \Delta_2 n(\omega^2) + \Delta_v n(\omega^2) + n_0(\omega^2); \qquad \text{(IV-3-9)}$$

où

$$\Delta_1 n(\omega^2) = -\frac{\varepsilon_1}{\pi c^2} \sum_{n=-\infty}^{0} \operatorname{Im} \int_{-d_1/2}^{d_1/2} [d(n, 1, x_3; n, 1, x_3) - g(n, 1, x_3; n, 1, x_3)]\, dx_3, \qquad \text{(IV-3-10)}$$

$$\Delta_2 n(\omega^2) = -\frac{\varepsilon_2}{\pi c^2} \sum_{n=-\infty}^{-1} \mathrm{Im} \int_{-d_2/2}^{d_2/2} [d(n, 2, x_3; n, 2, x_3) - g(n, 2, x_3; n, 2, x_3)]\, dx_3, \tag{IV-3-11}$$

$$n_0(\omega^2) = -\frac{\varepsilon_c}{\pi c^2} \mathrm{Im} \int_{-d_0/2}^{d_0/2} d(0,0, x_3; 0, 0, x_3)\, dx_3, \tag{IV-3-12}$$

$$\Delta_v n(\omega^2) = -\frac{\varepsilon_v}{\pi c^2} \mathrm{Im} \int_0^{+\infty} [d(x_3, x_3) - G_v(x_3,x_3)]\, dx_3. \tag{IV-3-13}$$

Dans ces expressions, d et g sont respectivement, des éléments de la fonction réponse $\overleftrightarrow{d}$ associée au système super-réseau/couche d'encapsulage/vide et de la fonction réponse $\overleftrightarrow{g}$ du super-réseau infini. Tandis que $G_v(x_3,x_3)$ représente l'élément de la fonction réponse de volume $\overleftrightarrow{G}_v$ du vide (milieu homogène infini). Au moyen des expressions explicites de ces éléments données dans l'appendice B, nous obtenons:

$$\Delta_1 n(\omega^2) = \frac{-\varepsilon_1}{\pi c^2} \mathrm{Im} \frac{t}{(t^2-1)^2} \left\{ \frac{S_1}{\alpha_1 F_1} \left[C_2 S_1 + \frac{1}{2} C_1 S_2 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{d_1 S_2}{2F_2} \left(1 - \frac{F_2^2}{F_2^1} \right) \right\} \frac{Y}{\Delta}, \tag{IV-3-14}$$

$$\Delta_2 n(\omega^2) = \frac{-\varepsilon_2}{\pi c^2} \mathrm{Im} \frac{t^2}{(t^2-1)^2} \left\{ \frac{S_2}{\alpha_2 F_2} \left[C_1 S_2 + \frac{1}{2} C_2 S_1 \left(\frac{F_1}{F_2} + \frac{F_2}{F_1} \right) \right] + \frac{d_2 S_1}{2F_1} \left(1 - \frac{F_1^2}{F_2^2} \right) \right\} \frac{Y}{\Delta}, \tag{IV-3-15}$$

$$n_0(\omega^2) = \frac{-\varepsilon_c}{2\pi c^2} \mathrm{Im} \left\{ \frac{S_0}{\alpha_0 C_0} \frac{1}{\left(1 + \frac{F_v S_0}{F_0 C_0}\right)} \left[\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} - \frac{F_v}{F_0^2} \left(C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t \right) \right] \right.$$
$$\left. + d_0 \left[\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} + R \frac{F_v}{F_0^2} \left(C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t \right) \right] \right\} \frac{1}{\Delta}, \tag{IV-3-16}$$

et

$$\Delta_v n(\omega^2) = \frac{-\varepsilon_v}{\pi c^2} \operatorname{Im} \frac{1}{2\alpha_v} \left[\frac{1}{2F_v} + \frac{\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} + \frac{S_0}{F_0 C_0}(C_1 C_2 + \frac{F_1}{F_2} S_1 S_2 - t)}{(1 + \frac{F_v S_0}{F_0 C_0})\ \Delta} \right];$$

(IV-3-17)

où

$$Y = C_2 - C_1 t - R F_v (\frac{S_1}{F_1} t + \frac{S_2}{F_2}) . \qquad \text{(IV-3-18)}$$

Notons qu'aux limites des bandes de volume du super-réseau nous avons $t(\omega_0) = \pm 1$. Un développement limité du premier ordre au voisinage de ω_0 de η (ω) (éq. IV-3-5) et un changement de ω en (ω + iΓ) fournissent [20]:

$$\frac{t}{(t^2-1)^2} = \frac{1}{8} \left[\left(\frac{d\eta}{d\omega}\right)_{\omega_0} \right]^{-1} \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega - \omega_0}\right) - i\pi\ \delta(\omega - \omega_0) \right]; \qquad \text{(IV-3-19)}$$

où $\mathcal{P}$ définit la partie principale et δ la distribution de Dirac.

On peut démontrer alors que:

$$\Delta_1 n\ (\omega) + \Delta_2 n\ (\omega) = -\frac{1}{4} \delta\ (\omega - \omega_0). \qquad \text{(IV-3-20)}$$

Ainsi, la création d'un super-réseau semi-infini à partir d'un autre 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.

IV-3-3) <u>Etats localisés</u>

Lorsque le dénominateur de $\Delta n(\omega^2)$ s'annule pour des fréquences situées dans les gaps du super-réseau infini, nous obtenons des états localisés à l'intérieur de la couche d'encapsulage qui décroissent exponentiellement dans les bandes de volume du super-réseau et le vide. Ces états localisés sont donnés alors par les expressions analytiques suivantes (éqs. III-6-3):

$$C_1 S_2 \left(\frac{F_2}{RF_v} - \frac{RF_v}{F_2} \right) + S_1 S_2 \left(\frac{F_2}{F_1} - \frac{F_1}{F_2} \right) + C_2 S_1 \left(\frac{F_1}{RF_v} - \frac{RF_v}{F_1} \right) = 0; \qquad \text{(IV-3-21)}$$

avec la condition,

$$\left| \, C_1 C_2 + \frac{F_2}{F_1} S_1 S_2 - R F_v \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1} \right) \right| > 1 \qquad \text{(IV-3-22)}$$

qui assure que ces modes décroissent en pénétrant à l'intérieur du super-réseau et dans le vide.

IV-3-4) <u>Cas limite d'un super-réseau semi-infini sans une couche d'encapsulage</u>

Ce système est obtenu simplement en faisant tendre l'épaisseur d_0 de la couche d'encapsulage vers zéro (voir figure III-3c). Ce qui entraîne $S_0 \rightarrow 0$ dans les expressions (IV-3-3), (IV-3-14) - (IV-3-18), (IV-3-21) - (IV-3-22). Dans ces conditions, celles-ci décrivent un super-réseau semi-infini terminé par une couche complète i = 1 en contact avec le vide. Remarquons que pour d_0 tendant vers zéro, la densité d'états $n_0(\omega^2)$ due à la couche i = 0 s'annule.

Lorsque la couche d'encapsulage 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 du type i = 2. On peut alors calculer la variation de densité d'états entre un tel super-réseau semi-infini et le même volume du super-réseau infini en utilisant la relation (IV-3-9) où $\Delta_2 n(\omega^2)$ est obtenu en intégrant jusqu'à $\frac{d_s}{2}$, et prenant $n_0(\omega^2) = 0$.

Un autre cas non moins intéressant, est celui de deux super-réseaux semi-infinis complémentaires construits par clivage d'un super-réseau infini. En effet, en coupant le super-réseau infini le long de la position d'espace $x_3 = d_s$, on obtient un super-réseau avec une couche de surface incomplète d'épaisseur d_s et son complémentaire avec une couche de surface d'épaisseur $d_2 - d_s$. On peut montrer analytiquement [20-22] que la somme des variations de densités d'états de ces deux super-réseaux complémentaires, en contact avec le vide, est nulle pour des fréquences appartenant aux bandes de volume des deux super-réseaux et situées au-dessus de la ligne de la lumière dans le vide.

IV-3-5) Cas d'une interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat homogène

Ce système est obtenu en remplaçant le vide par un substrat homogène. Ainsi, toutes les expressions (IV-3-3)-(IV3-22) et la limite (IV-3-4) restent valables en remplaçant l'indice"v" par "s" comme substrat.

IV-4) Applications et discussions des résultats

Dans ce qui suit, nous donnons les résultats obtenus, aussi bien pour des super-réseaux à deux couches (i=1,2) avec ou sans une couche d'encapsulage (notée i=0) que pour de tels super-réseaux en contact avec un substrat. Ces systèmes sont constitués de matériaux diélectriques caractérisés par leurs constantes diélectriques ε_1, $\varepsilon_2$et ε_0. Les épaisseurs des couches seront notées par d_1, d_2 et d_0 et la période du super-réseau par $D = d_1 + d_2$. Nous effectuons nos calculs pour ε_1=3, ε_2=10 et ε_0=2, et $d_1 = 2\, d_2 = \frac{2}{3}D$.

Ainsi, nous considérerons dans les paragraphes suivants, les différents systèmes composites introduits dans les paragraphes précédents.

IV-4-1) Super-réseaux semi-infinis

La figure IV-1 donne la dispersion des bandes de volume et des modes de surface en fonction de $k_{//}D$. La couche de surface du super-réseau est i=1 ou i=2 avec la même épaisseur que dans le volume. Les aires hachurées définissent les bandes de volume où les ondes électromagnétiques se propagent à travers le super-réseau. Ces bandes sont séparées par des gaps où les modes électromagnétiques de surface sont représentés lorsque l'un (traits pleins) ou l'autre (traits discontinus) des matériaux 1 et 2 se trouvent en surface. On peut observer que ces modes de surface sont très dépendants du type du matériau qui se trouve à la surface.

Remarquons qu'à la différence des figures du chapitre précédent, sur cette figure les effets de retard (vitesse de la lumière finie) n'ont pas été négligés.

En supposant que le super-réseau semi-infini est terminé par la couche i=1 et choisissant $k_{//}D$ = 6, nous présentons sur la figure IV-2 la variation de la densité d'états entre le super-réseau semi-infini en contact avec le vide et celle du

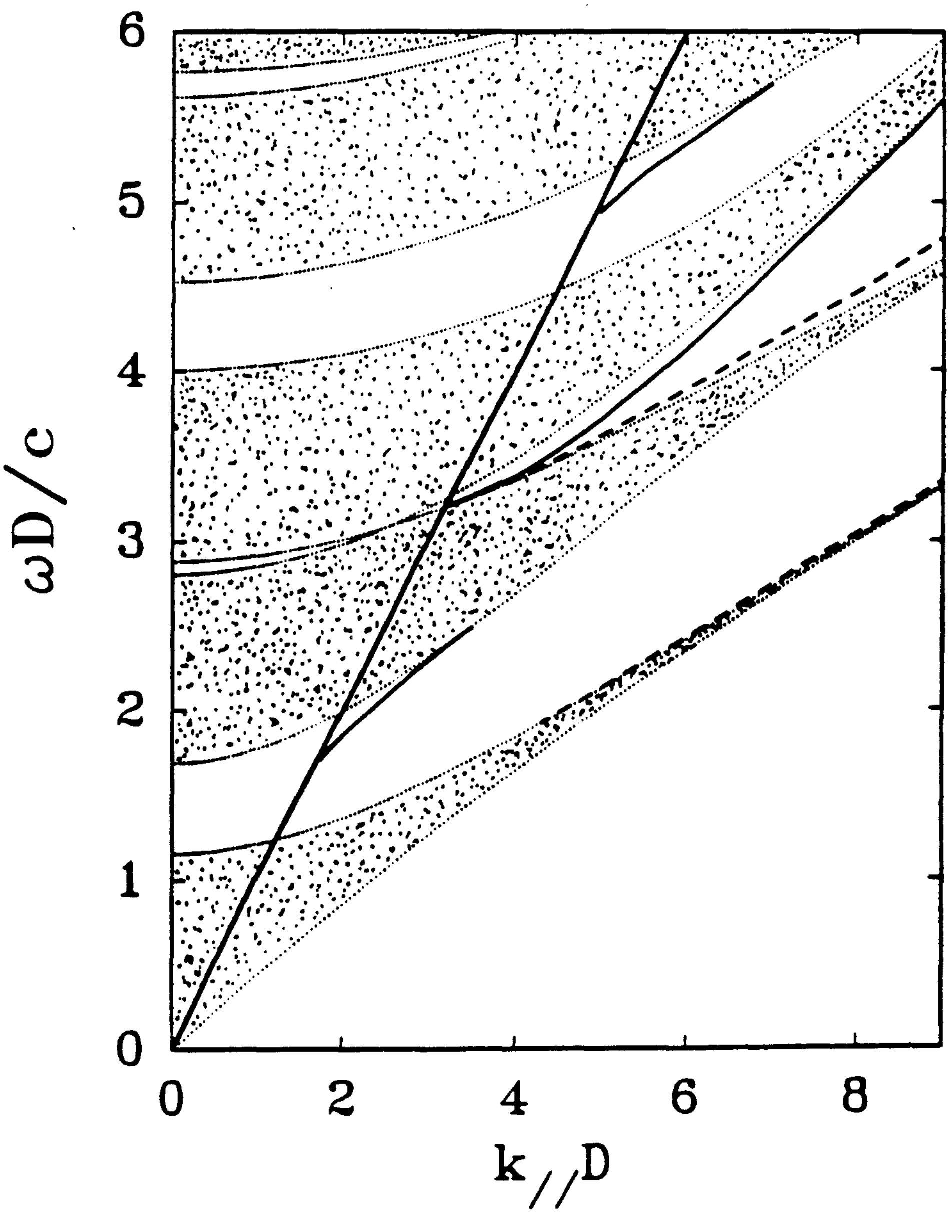


figure IV-1: *Modes de volume et de surface (cas de la polarisation S) pour un super-réseau à deux couches diélectriques. Les courbes donnent ωD/c en fonction de $k_{//}D$, où ω est la fréquence, c la vitesse de la lumière dans le vide, $k_{//}$ le module du vecteur de propagation parallèle aux interfaces et $D = d_1 + d_2$ la période du super-réseau. Les zones sombres représentent les bandes de volume. Les traits pleins indiquent les modes de surface pour le super-réseau semi-infini terminé par la couche i=1 ($\varepsilon_1 = 3$). Les traits discontinus représentent les modes de surface pour le super-réseau complé-mentaire terminé par la couche i=2 ($\varepsilon_2 = 10$); alors que le trait foncé matérialise la ligne de la lumière du vide.*

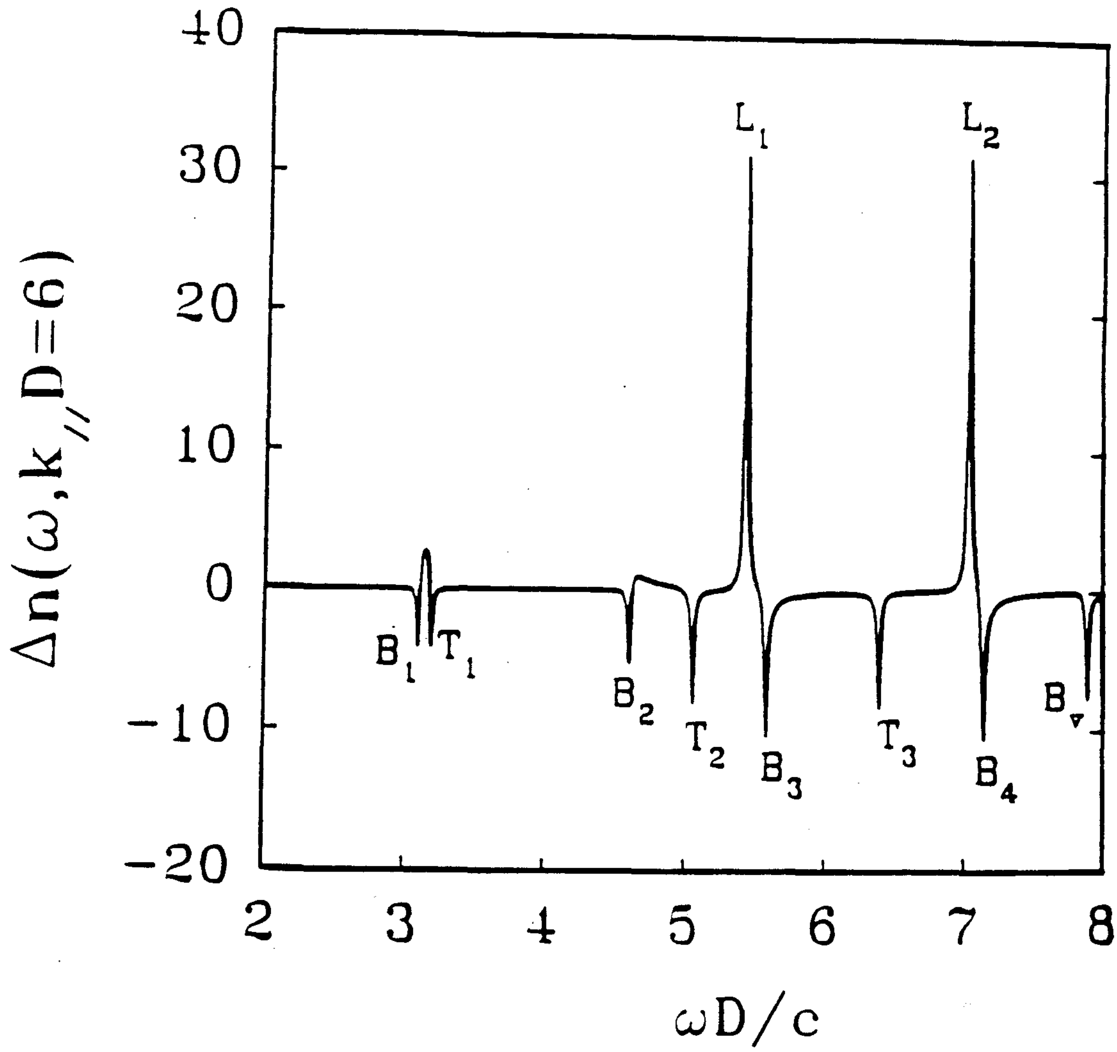


figure IV-2: *Densité d'états (en unités de D/c) pour le super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage de type 1 ($\varepsilon_1 = 3$) à la surface, pour $k_{//} D = 6$. Les contributions du super-réseau infini et du vide ont été soustraites. B_i et T_i réfèrent aux pics δ de poids (-1/4) aux limites des bandes de volume, L_i indique les modes localisés à la surface et B_v réfère aux pics d de poids (-1/4) situés sur la ligne de la lumière du vide.*

super-réseau infini ayant le même nombre de couches que le super-réseau semi-infini et le vide infini ayant le même volume que le vide en contact avec le super-réseau. Les fonctions δ apparaissant dans cette figure sont élargies en ajoutant à la fréquence ω des ondes électromagnétiques, une petite quantité imaginaire. Les pics δ de poids 1, associés aux modes de surface sont indiqués par L_i. En outre, nous avons montré que des pics δ de poids $(-\frac{1}{4})$ apparaissent dans la variation de la densité d'états totale $\Delta n(\omega, k_{//})$ en bas et en haut des bandes de volume du super-réseau; ces pics sont répérés par B_i et T_i, respectivement. Des résultats semblables ont été aussi construits par El Boudouti et coll. [21] pour la propagation des ondes acoustiques transverses dans les super-réseaux. Les pics B_i et T_i n'ont pas exactement les mêmes formes à cause des divergences dans les termes $(\omega - \omega_{B_i})^{-1/2}$ ou $(\omega - \omega_{T_i})^{-1/2}$ (ω_{B_i} et ω_{T_i} sont les fréquences en bas et en haut de chaque bande de volume du super-réseau) existant près des bandes dans les densités d'états à une dimension. A l'exception des pics δ discutés ci-dessus et du comportement particulier près des bandes , la variation $\Delta n(\omega, k_{//})$ de la densité d'états ne montre pas d'effet significatif à l'intérieur des bandes de volume du super-réseau.

Maintenant, supposons que la couche d'encapsulage soit de même nature qu'une couche de volume mais, d'épaisseur différente. La figure IV-3 représente la variation des fréquences des modes électromagnétiques de surface, pour $k_{//}D = 6$, en fonction de d_0/D où d_0 est l'épaisseur de la couche de surface constituée du matériau 1 (courbes en pointillés) ou du matériau 2 (courbes en traits pleins). Ces fréquences sont très sensibles à la variation de l'épaisseur d_0: lorsque d_0 croît, les fréquences des modes localisés décroissent jusqu'à ce que les branches correspondantes pénètrent dans les bandes de volume (zones hachurées) pour devenir des états résonnants et simultanément, de nouvelles branches localisées sont extraites des bandes de volume. Toutefois, les modes résonnants restent bien définis tant que leurs fréquences sont près des limites des bandes; en pénétrant dans la bande de volume du super-réseau, ils s'élargissent très rapidement. L'observation des courbes de la figure IV-3 montre qu'il y a une répétition périodique des modes en fonction de l'épaisseur d_0. Notons finalement que les modes de surface tendent vers la limite de la bande de volume de la couche mince de surface lorsque d_0 augmente.

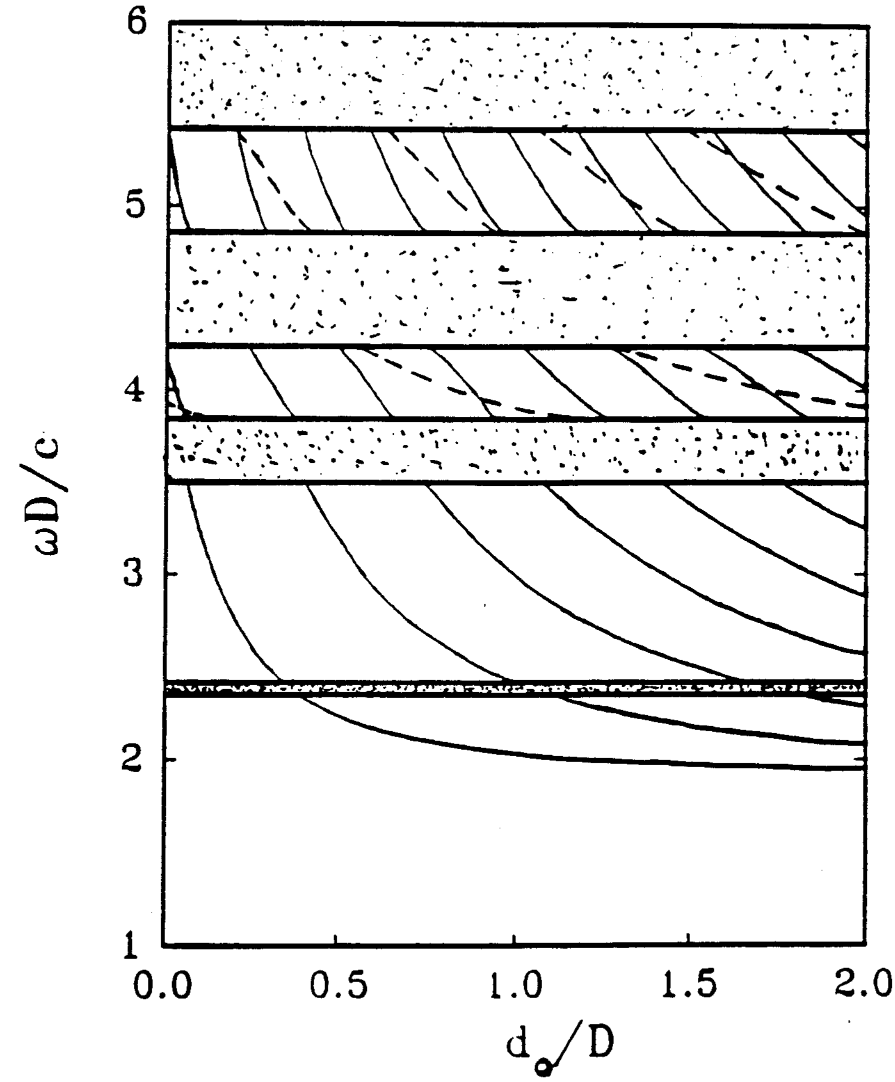


figure IV-3: *Variation des fréquences ωD/c (sans dimension) des modes de surface pour un super-réseau semi-infini, pour $k_{//} D = 6$, en fonction de d_0/D, où d_0 est l'épaisseur de la couche de surface construite avec le matériau 1 (tirets) ou le matériau 2 (traits pleins). les zones sombres représentent les bandes de volume du super-réseau.*

IV-4-2) Super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage

Supposons maintenant qu'une couche d'encapsulage d'un matériau diélectrque caractérisé par la constante diélectrique ε_0=2 est déposé sur le super-réseau terminé par une couche complète du matériau i = 1. Dans ce cas, la figure IV-4 donne la dispersion des modes électromagnétiques localisés et résonnants induits par la couche d'encapsulage d'épaisseur relative $d_0/D = 3$. Ces modes sont illustrés comme des pics bien définis dans la variation de la densité d'états entre les systèmes couplés (super-réseau/couche homogène/vide) et non couplés (super-réseau/vide seul). Un exemple de variation de densité d'états totale $\Delta n(\omega)$ est représenté dans la figure IV-5, pour $k_{//}D = 6$. Ces modes localisés et résonnants sont très sensibles à l'épaisseur et à la nature de la couche d'encapsulage [22]. Certains d'entre eux doivent être compris comme des modes confinés modifiés (élargis) de la couche d'encapsulage et sont, par conséquent, différents des modes de surface d'un super-réseau sans une couche d'encapsulage. On peut noter par ailleurs, l'existence des modes d'interface localisés à l'interface super-réseau/couche d'encapsulage. Parmi les résonances qui apparaissent dans les figures IV-4, IV-5, la plus intense (R_2) est celle qui se situe tout juste au-dessus de la ligne de la lumière de la couche d'encapsulage. Les suivantes sont moins intenses, surtout aux hautes fréquences où la séparation des branches augmente.

A l'aide des équations (IV-3-3) et (IV-3-8), nous avons aussi étudié les densités d'états locales. Nous montrons qu'elles changent, de façon importante, avec la position x_3 où elles sont calculées. En particulier, nous montrons que la densité d'états locale à la surface de la couche d'encapsulage présente les mêmes résonances que celles données par la densité d'états totale et illustrées par la figure IV-5. Au contraire, dans la densité d'états locale à l'interface entre le super-réseau et la couche adsorbée, les résonances sont changées par rapport à celles indiquées dans la figure IV-5. Ces comportements peuvent être dus à l'importance des différentes conditions aux limites existant sur ces deux plans.

Dépendant de leurs fréquences, les modes induits par la couche d'encapsulage peuvent présenter différents comportements dans la direction perpendiculaire aux interfaces: ils peuvent se propager dans le super-réseau et la couche d'encapsulage à la fois, ou se propager dans l'un et s'évanouir dans l'autre,ou finalement, s'évanouir des deux côtés de l'interface super-réseau/couche adsorbée. Ce dernier, noté par i dans les figures IV-4 et IV-5,

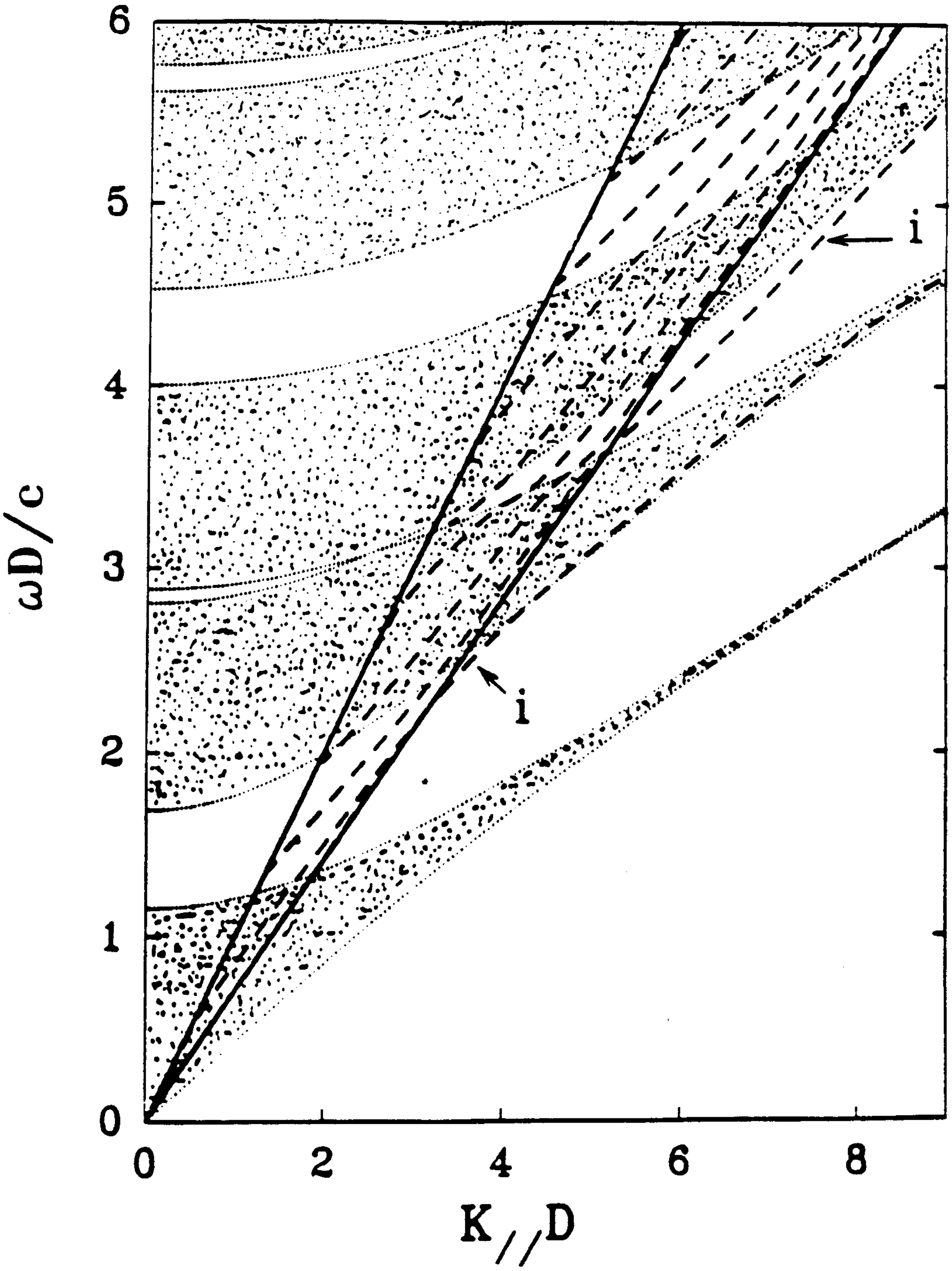


figure IV-4: *Dispersion des modes localisés et résonnants (tirets) induits par une couche d'encapsulage i=0, d'épaisseur d_0 = 3D et de constante diélectrique ε_0 = 2, déposée au-dessus du super-réseau, formé à partir des matériaux 1 et 2 et terminé par le matériau 1. Les zones sombres sont les bandes de volume du super-réseau. Les traits foncées représentent les lignes de la lumière dans le vide et dans le matériau i = 0. Les branches (i) désignent les modes localisés à l'interface entre le super-réseau semi-infini et la couche ajoutée.*

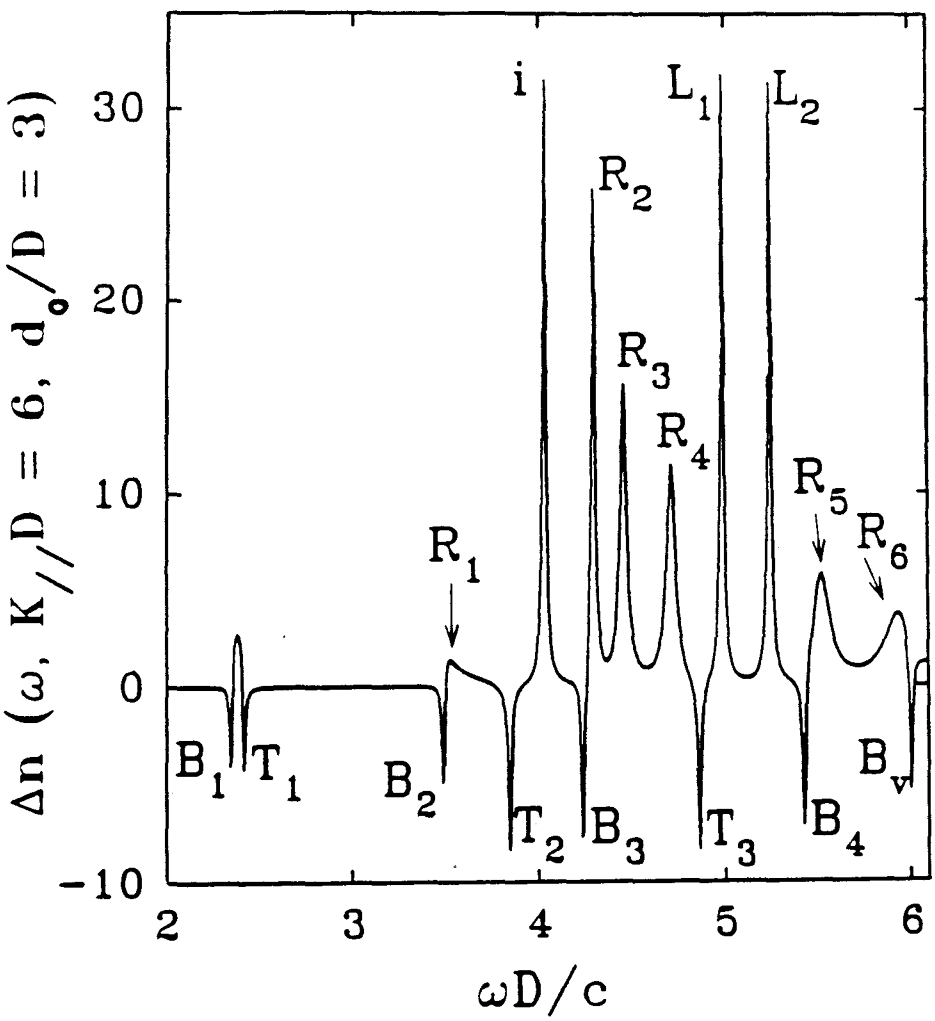
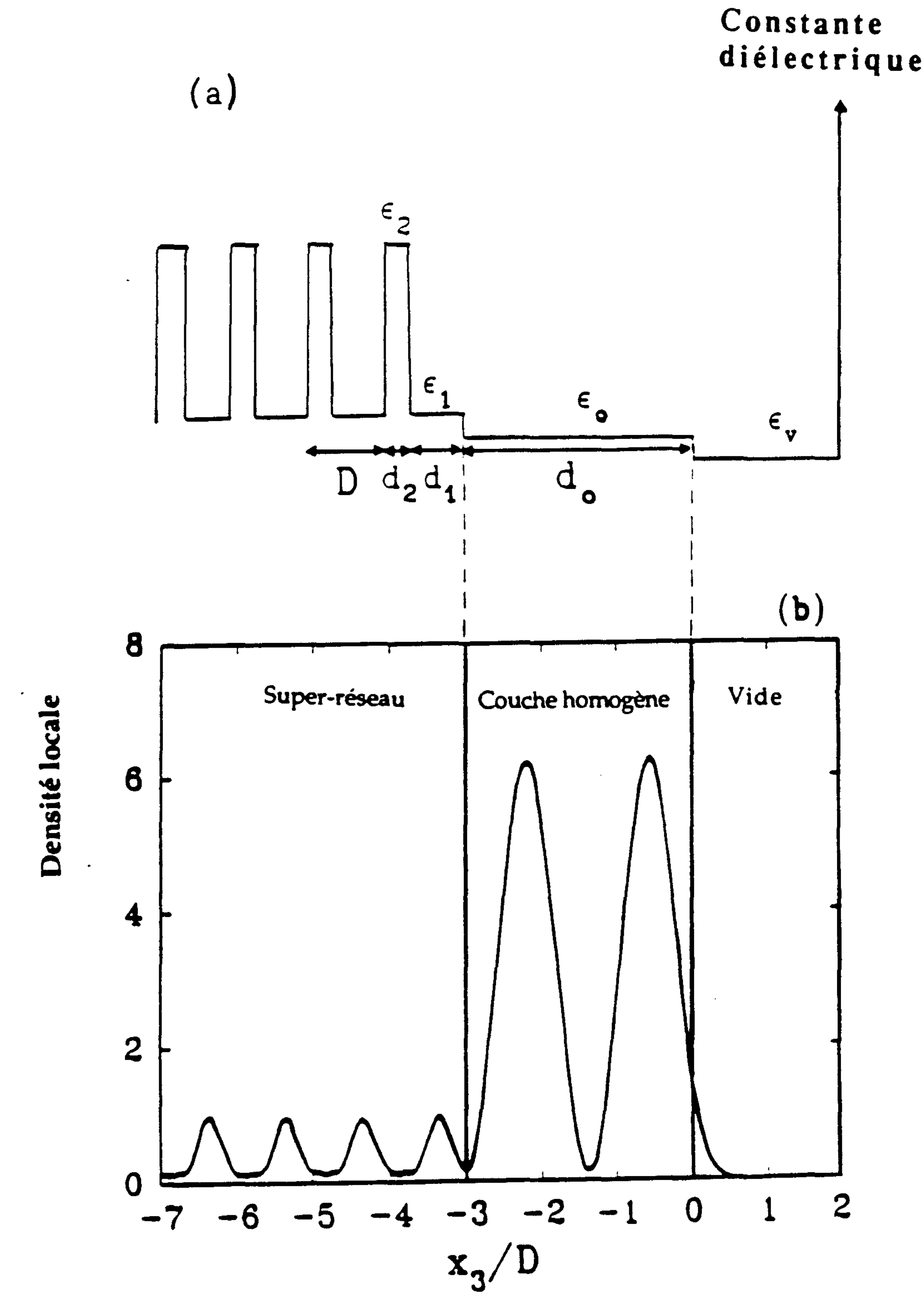


figure IV-5: *Variation de la densité d'états (en unités de D/c) correspondant au cas décrit sur la figure IV-4, pour* $k_{//}D = 6$ *et* $d_0 = 3D$ *.* B_i, T_i *et* L_i *ont les mêmes significations que sur la figure IV-2;* R_i *et (i) se réfèrent respectivement, aux modes résonnants et localisés à l'interface super-réseau/couche homogène finie.*

correspond à un mode localisé d'interface. Pour illustrer ces trois types de comportements, nous avons représenté dans les figures IV-6b, IV-6c et IV-6d, la densité d'états locale en fonction de la position d'espace x_3 pour $k_{//}D = 6$ et pour différentes fréquences réduites: $\omega D/c = 4.458$, 4.981 et 4.027 correspondant respectivement au mode résonnant R_3, au mode localisé L_1 et au mode d'interface i dans la figure IV-5. Cette densité d'états locale reflète le comportement spatial du carré du module du champ électrique.

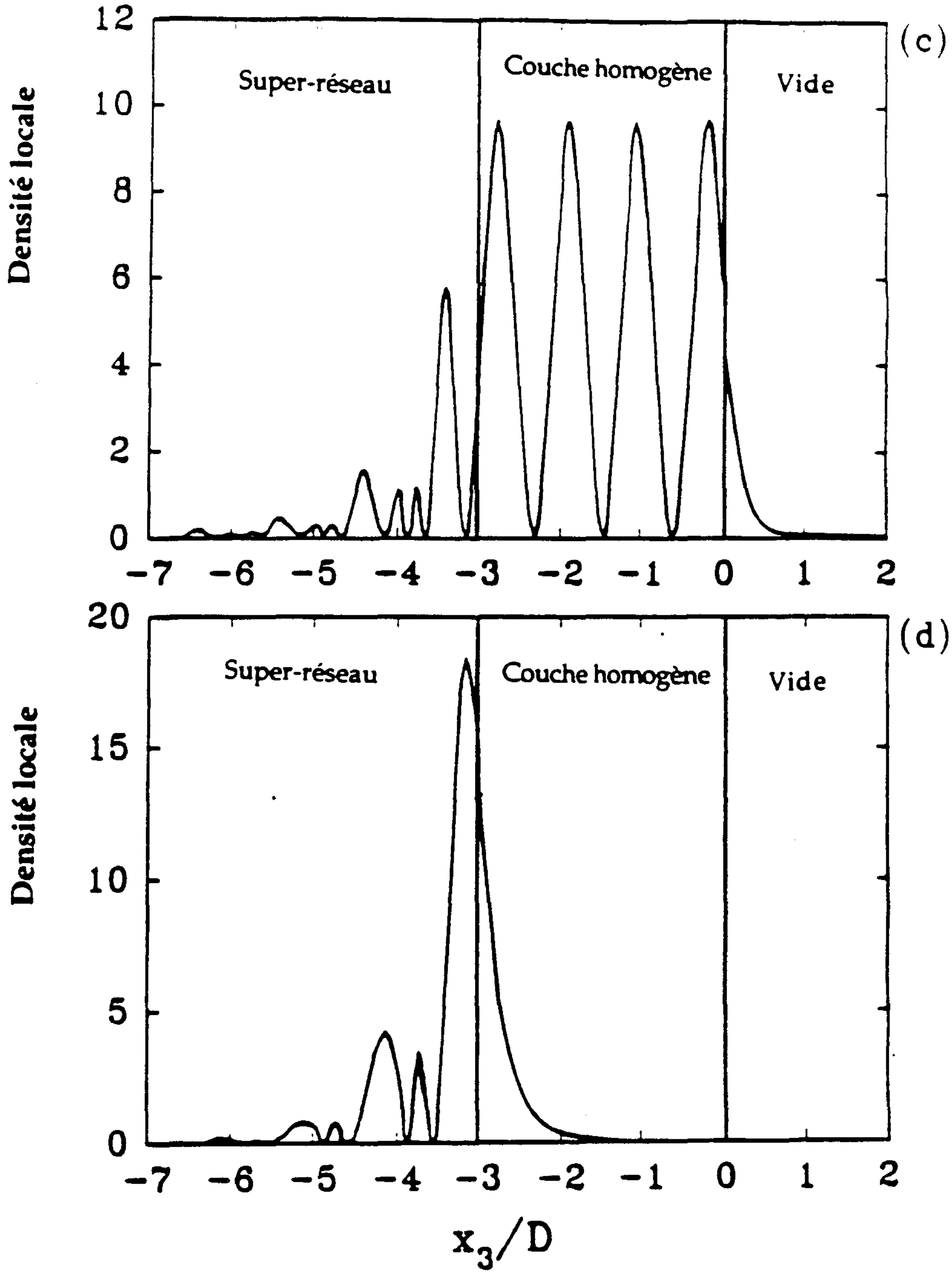
Dans le premier cas (fig. IV-6b), la fréquence réduite ($\omega D/c = 4.458$) tombe à l'intérieur de la bande de volume du super-réseau. Par conséquent, la densité d'états locale correspondant à ce mode résonnant montre un comportement oscillatoire aussi bien dans l'espace du super-réseau que dans celui de la couche d'encapsulage et un évanouissement très rapide dans le vide. Toutefois, la densité d'états locale est en moyenne plus importante à l'intérieur de la couche d'encapsulage que dans le super-réseau. On peut aussi observer que, dans l'espace occupé par le super-réseau, cet état est plus prononcé dans la couche constituée du matériau i=1. Un comportement similaire a été déjà observé pour les états électroniques dans les puits quantiques où certains états résonnants sont plus concentrés dans les barrières plutôt que dans les puits [23]. Dans le second cas (fig. IV-6c), la fréquence réduite ($\omega D/c = 4.981$) tombe à l'intérieur d'un mini-gap du super-réseau. Dans ce cas, la densité d'états locale correspondante montre un comportement oscillatoire dans l'espace occupé par la couche d'encapsulage et un comportement évanescent dans le super-réseau et dans le vide. Dans le troisième cas (fig. IV-6d) correspondant à la fréquence réduite d'un état localisé ($\omega D/c = 4.027$) à l'interface super-réseau/couche adsorbée, la densité d'états locale s'évanouit de part et d'autre de cette interface.

Les fréquences des modes électromagnétiques localisés et résonnants varient avec l'épaisseur d_0 de la couche d'encapsulage. La figure IV-7 présente cette variation, pour $k_{//}D = 6$. La branche la plus basse (traits discontinus avec des points) correspond au mode localisé à l'interface super-réseau/couche adsorbée. Les branches suivantes (traits discontinus) se rapprochent les unes des autres lorsque d_0 augmente, et par conséquent, les intensités des résonances correspondantes s'accroissent. Cependant, l'intensité des états résonnants décroît, ou peut même s'annuler en particulier, lorsque l'épaisseur d_0 est petite ou la fréquence est haute. En outre, on peut observer dans la figure IV-7 que la branche correspondant aux modes d'interface reste presque constante (indépendante de d_0) même pour des valeurs faibles de d_0. Notons que lorsque d_0 augmente, les



<u>figure IV-6</u>: (a) *Représentation schématique des constantes diélectriques correspondant aux différents constituants du système couplé (super-réseau/couche homogène/vide).*

(b) *Représentation spatiale de la densité locale (en unité de D) à $\omega D/c = 4.458$ et $k_{//}D = 6$.*



(c) *Même figure que* (b) *mais pour* $\omega D/c = 4.981$ *et* $k_{//}D = 6$.

(d) *Même figure que* (b)*mais à* $\omega D/c = 4.027$ *et* $k_{//}D = 6$.

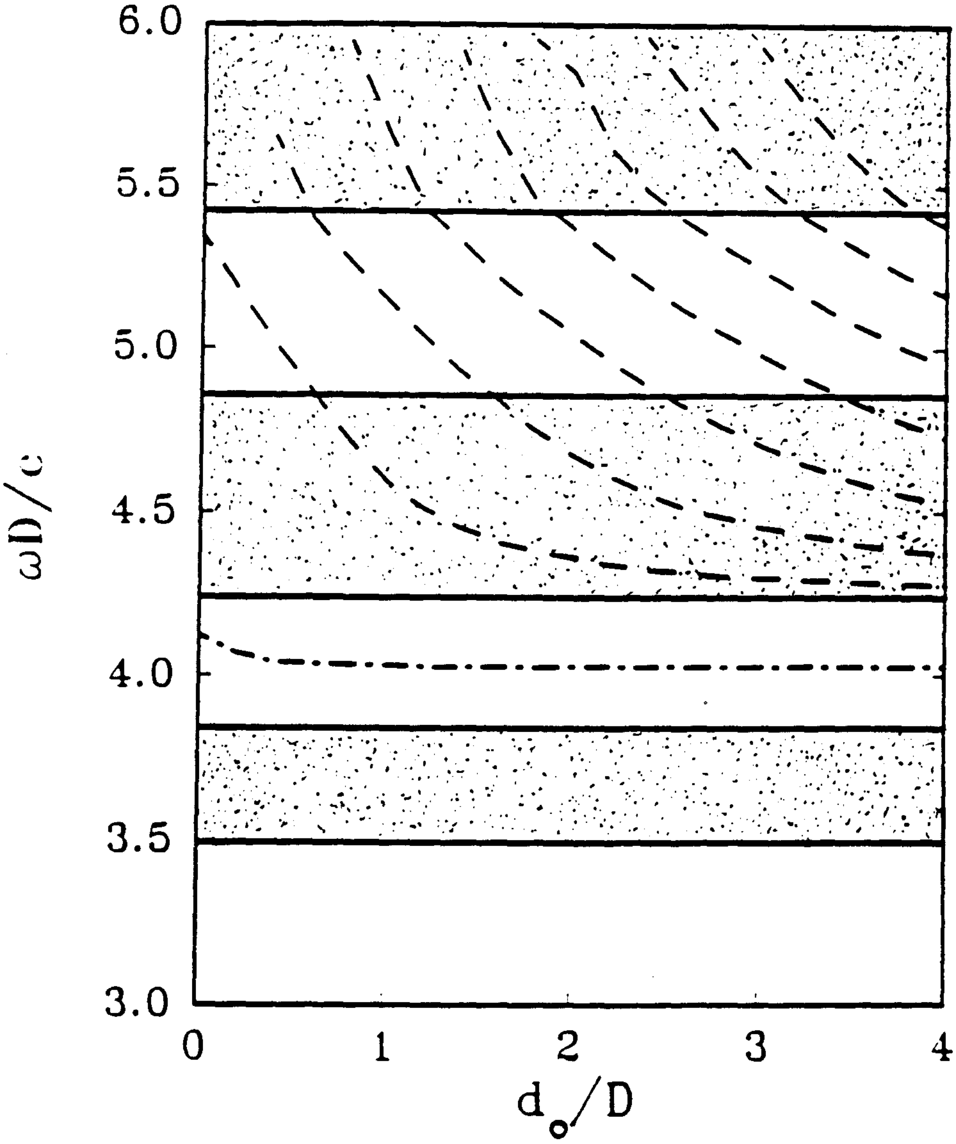


figure IV-7: *Variation des fréquences (sans dimension) des modes localisés et résonnants induits par une couche d'épaisseur d_0 déposée sur la surface du super-réseau semi-infini décrit précédemment (voir fig. IV-4), pour $k_{//}D$ =6. La branche la plus basse (en tirets) correspond aux états localisés à l'interface super-réseau/couche homogène adsorbée.*

modes induits par la couche d'encapsulage tendent vers la limite inférieure de la bande de volume du matériau correspondant. Mentionnons aussi ici que, pour n'importe quelle fréquence donnée dans la figure IV-7, il y a une répétition périodique des modes en fonction de d_0.

Finalement, lorsque la couche d'encapsulage est déposée sur un super-réseau terminé par une couche complète de matériau i = 2 au lieu de celui i = 1, les modes localisés et résonnants deviennent complètement différents de ceux discutés dans les figures (IV-4)-(IV-7).

IV-4-3) Super-réseau semi-infini en contact avec un substrat semi-infini

Pour montrer les modes localisés et résonnants associés au dépôt d'un super-réseau semi-infini sur un substrat semi-infini, nous avons choisi le même super-réseau que précédemment déposé sur un substrat de constante diélectrique $\varepsilon_s = 2$. La figure IV-8 donne les modes d'interface localisés et résonnants pour deux super-réseaux complémentaires dans lesquels le substrat est en contact soit avec une couche complète de matériau 2 soit avec une couche complète de matériau 1. Dans ce cas, les deux lignes pleines présentées dans les mini-gaps du super-réseau sont les modes d'interface localisés dont les prolongements (traits discontinus) dans la bande de volume du substrat, représentent des résonances. Toutefois, la résonance apparaissant dans le premier mini-gap est plutôt large et n'est pas bien caractérisée. Maintenant si le substrat est en contact avec le matériau 2, on obtient les branches (en pointillés) près et au dessus des bandes de volume du super-réseau. Une comparaison avec la figure de dispersion donnée pour l'interface super-réseau/vide, nous permet de déduire que la présence d'un substrat avec une constante diélectrique plus élevée pousse les modes localisés vers des fréquences plus faibles . Nous reviendrons sur ce point dans la discussion de la figure IV-10.

Lorsqu'on crée les deux super-réseaux complémentaires (utilisés dans la figure IV-8) à partir du super-réseau infini et du substrat infini, on montre [20] que la variation de la densité d'états correspondante $\Delta n_{I_c}(\omega)$ est égale à zéro pour des fréquences ω appartenant à la fois aux bandes de volume du substrat et du super-réseau. La perte des états due aux pics δ de poids (-1/2) aux limites de chaque bande de volume et la nécessaire conservation du nombre total d'états, montrent qu'il devrait exister des modes résonnants s'étendant à la fois dans les gaps du super-réseau tout en étant dans la bande de volume du substrat.

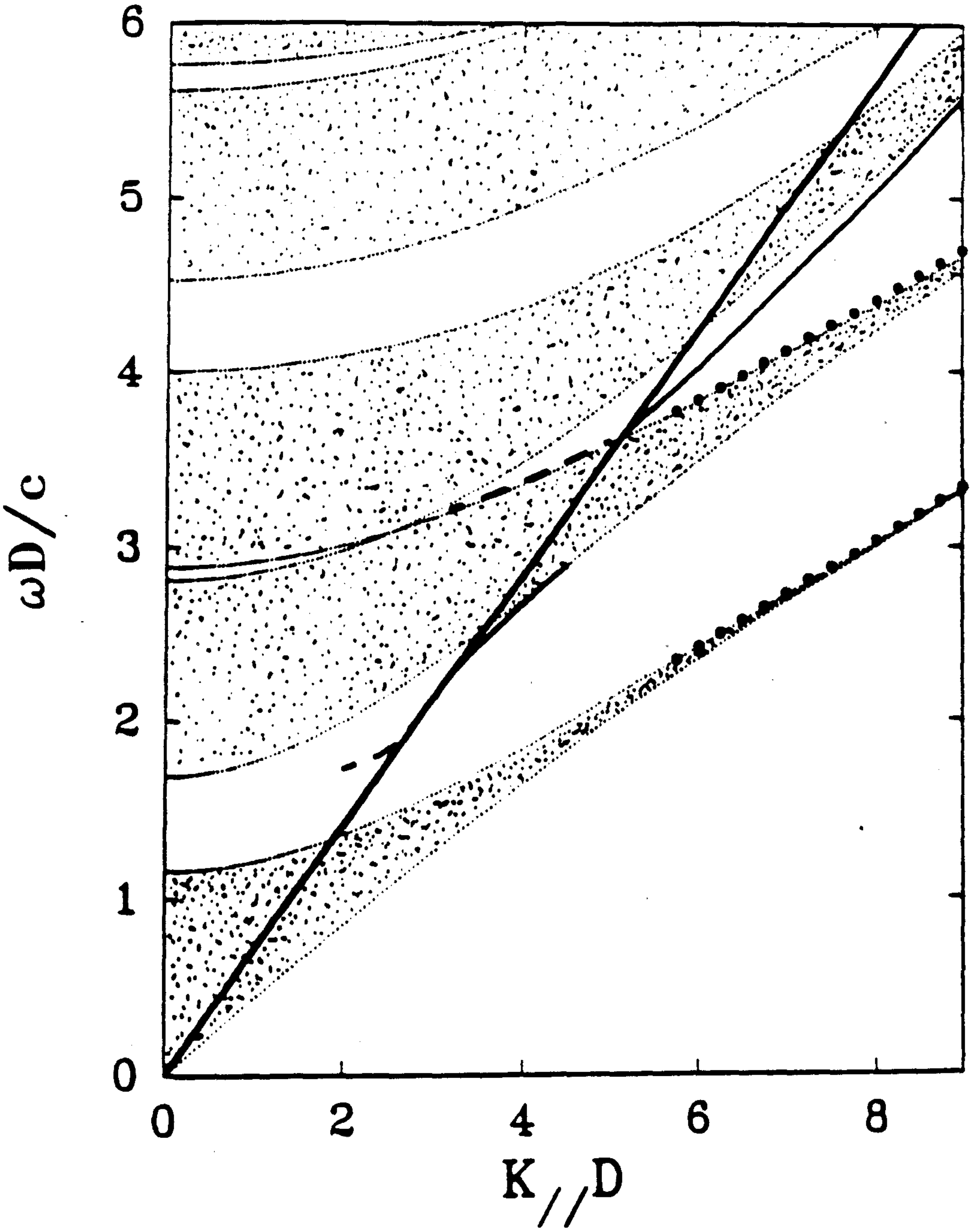


figure IV-8: *Modes localisés (d'interface) et résonnants associés à deux super-réseaux complémentaires sur chacun desquels est déposé un substrat. Celui-ci est en contact avec une couche complète, soit du matériau 1 ou du matériau 2. Les zones sombres sont les bandes de volume du super-réseau. Le trait foncé indique le bas de la bande de volume du substrat. La constante du substrat est $\varepsilon_s = 2$. Lorsque le super-réseau se termine par une couche i = 1, les modes localisés (respectivement résonnants) sont représentés par des traits continus (respectivement, discontinus). Les branches en pointillés indiquent les modes d'interface lorsque le super-réseau est terminé par un matériau de type i=2.*

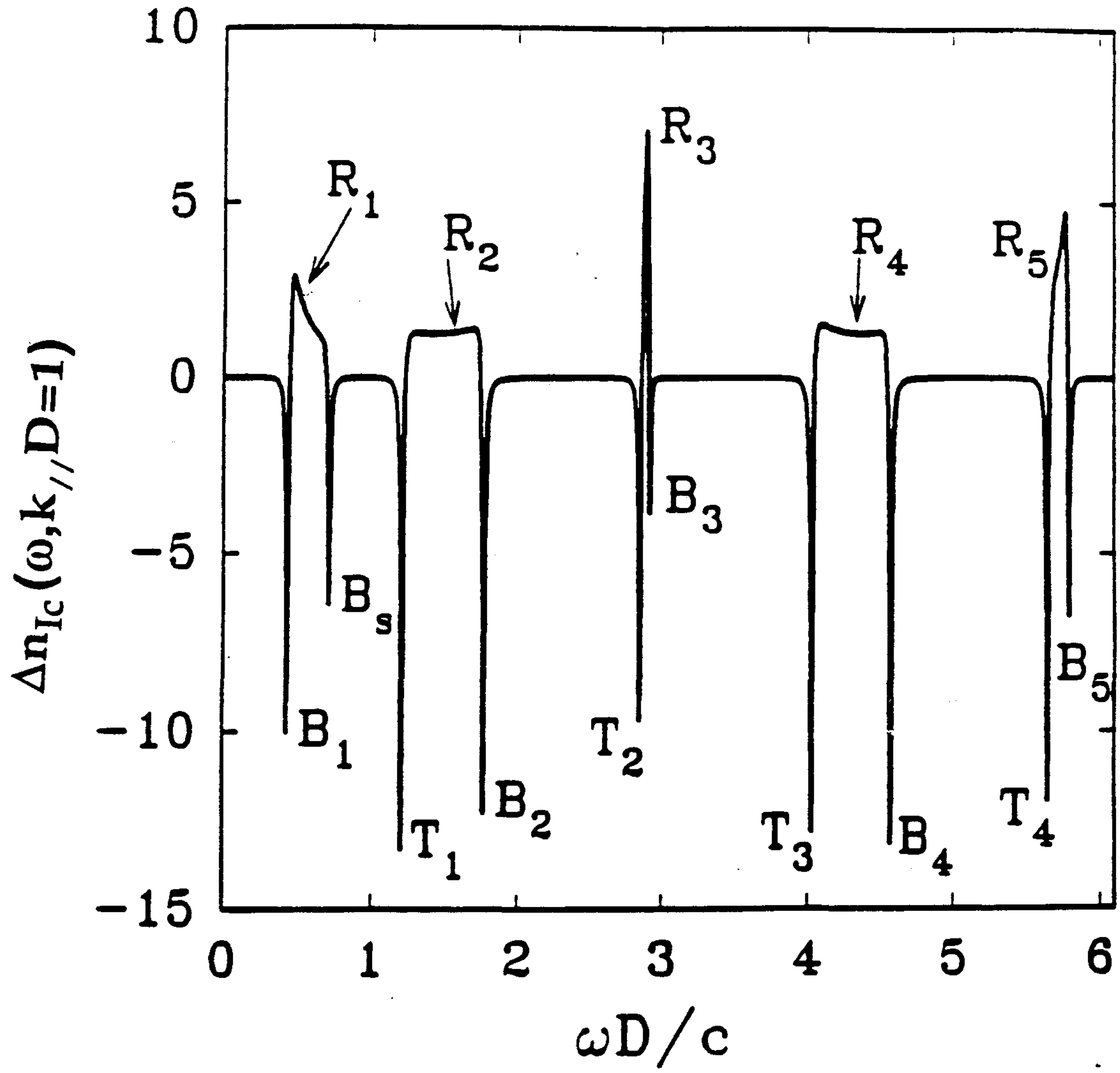
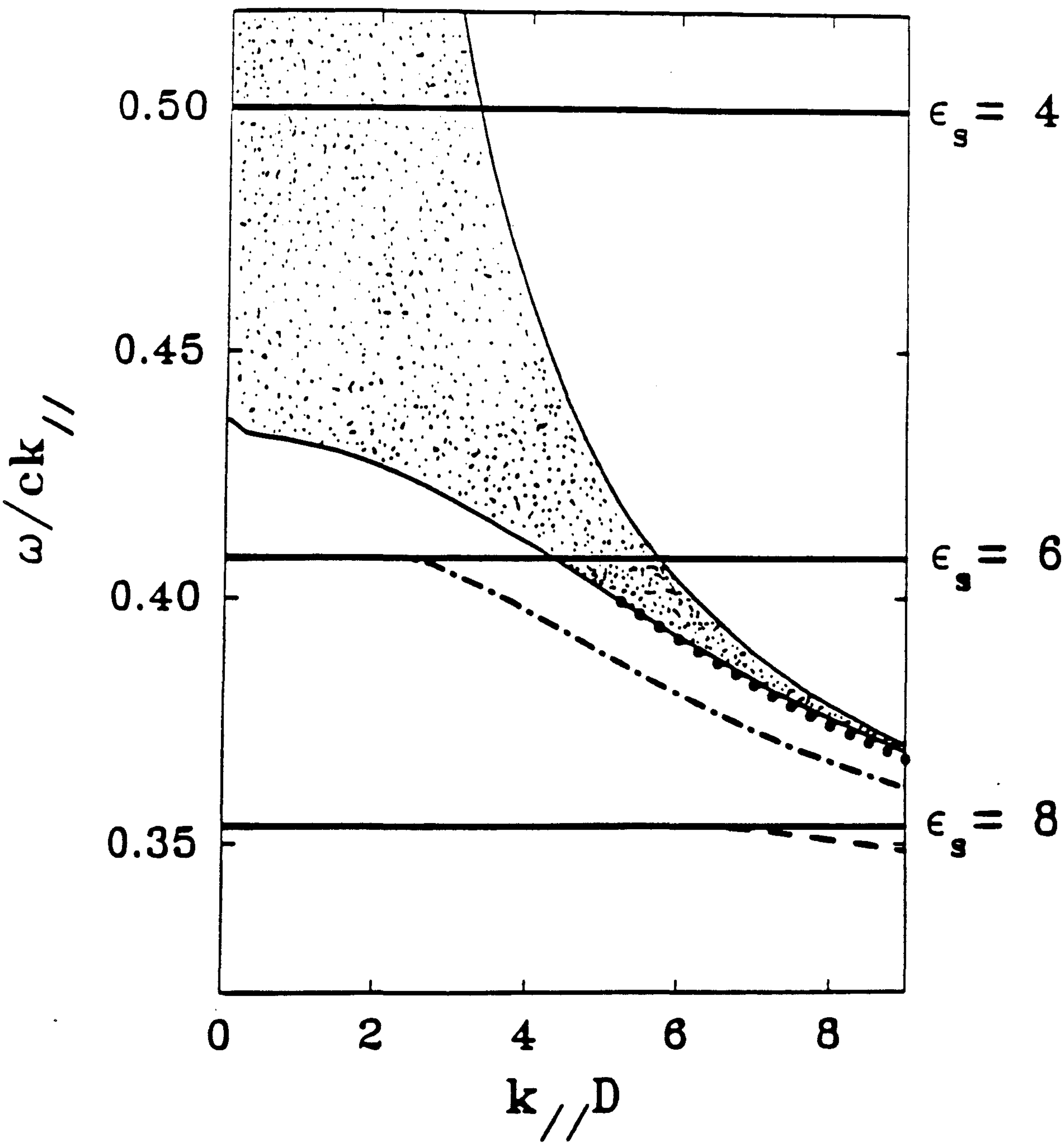


figure IV-9: *Variation de la densité d'états (en unités de D/c)„ à $k_{//}D = 1$, pour les deux super-réseaux complémentaires de la figure IV-8 créés à partir d'un super-réseau et d'un substrat infinis. B_i et T_i sont les pics δ de poids (-1/2) apparaissant aux limites des bandes de volume du super-réseau, B_s se réfère au pic δ de poids (-1/2) situé au-dessous de la bande volume du substrat. La perte d'états dues aux pics δ de poids (-1/2) près des bandes de volume est compensée par les pics de densités d'états R_i.*



<u>figure IV-10</u>: Dispersion de la bande de volume la plus basse et des modes d'interface pour $\varepsilon_s = 4$ (branche en pointillés), $\varepsilon_s = 6$ (branche en points tirets) et $\varepsilon_s = 8$ (branche en tirets). Les lignes foncées indiquent le bas des bandes de volume du substrat caractérisées par leurs constantes diélectriques données ci-dessus. Dans le but d'avoir une bonne séparation des modes d'interface, nous avons représenté la vitesse réduite $\omega/ck_{//}$ en fonction de la fréquence réduite $\omega D/c$.

Nous avons présenté dans la figure IV-9 un exemple de cette variation de la densité d'états, pour $k_{//}D = 1$: la perte des états due aux pics deltas de poids (-1/2) aux limites des bandes de volume est en grande partie compensée par l'apparition des pics associés aux états résonnants R_1, R_2, R_3, R_4, R_5. Ces résonances de poids presque égal à 1, se répartissent différemment sur chacun des deux super-réseaux complémentaires.

On peut remarquer aussi que la position des modes d'interface représentés sur les figures IV-4 et IV-8 est presque la même, même si dans le cas précédent, le substrat est remplacé par une couche d'encapsulage d'épaisseur finie $d_0/D = 3$; en outre, la localisation des modes d'interface est similaire dans les deux cas. Les positions des modes d'interface sont très sensibles à la nature du substrat en contact avec le super-réseau. Nous avons présenté sur la figure IV-10, la dispersion des modes d'interface pour différentes valeurs du paramètre ε_s, où $\varepsilon_1 \leq \varepsilon_s \leq \varepsilon_2$. En effet, lorsque ε_s augmente les fréquences des modes d'interface chutent. En particulier, la branche qui apparaît au-dessus de la première bande de volume du super-réseau pour $\varepsilon_v = 1$ (fig.IV-1) et $\varepsilon_s = 2$ (fig. IV-8), pénètre dans cette bande pour $\varepsilon_s = 3$; pour $\varepsilon_s > 3$, une branche d'interface apparaît au-dessous de la première mini-bande de volume comme illustrée sur la figure IV-10 pour $\varepsilon_s = 4$, 6 et 8 (précisons que pour une raison de clarté, nous avons présenté dans cette figure les vitesses réduites $\omega/ck_{//}$ au lieu des fréquences réduites $\omega D/c$).

IV-5) Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un calcul des fonctions de Green et des densités d'états locales et totales pour les ondes électriques transverses dans un super-réseau semi-infini, avec ou sans une couche d'encapsulage ou en contact avec un substrat. Ces expressions analytiques nous ont permis d'étudier la dispersion des états localisés et résonnants dans ces hétérostructures. Nous avons examiné la distribution spatiale de ces états.

L'étude du super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage différente de celles de volume, met en évidence des pics deltas, soit à l'intérieur des mini-gaps (modes localisés), soit à l'intérieur des bandes de volume (modes résonnants). Elle montre une forte dépendance des fréquences correspondantes, aussi bien avec l'épaisseur de la couche adsorbée qu'avec la nature de la couche du super-réseau sur laquelle elle a été adsorbée.

L'existence des modes localisés et résonnants associés à l'interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat semi-infini a été aussi examinée dans ce chapitre. Les résultats obtenus font remarquer que la perte des états due aux pics deltas de poids (-1/2) aux limites des bandes de volume de deux super-réseaux complémentaires est entièrement compensée par l'apparition des pics (de poids environ égal à 1) associés aux états résonnants qui se répartissent différemment sur chacun des deux super-réseaux complémentaires. Les intensités de ces résonances dépendent fortement des paramètres relatifs du substrat , ainsi que de la nature de la couche du super-réseau en contact avec ce dernier. Notons aussi que lorsque le substrat est de même nature que l'un des matériaux du super-réseau, les modes d'interface disparaissent.

En somme, une attention particulière a été consacrée aux résonances apparaissant dans les hétérostructures indiquées ci-dessus et à leurs relations avec les modes localisés. En particulier, différents types de modes localisés et résonnants induits par une couche d'encapsulage déposée au-dessus d'un super-réseau semi-infini ont été discutés. Ces courbes de dispersion peuvent être un moyen utile pour la caractérisation du matériau à la surface du super-réseau.

Finalement, soulignons que l'étude d'autres excitations dans les super-réseaux telles que les ondes élastiques transverses [21] ou les états électroniques [23], [24] dans le modèle de Kronig-Penny implique le même outillage mathématique et des fonctions réponses analogues à celles donnés dans le présent chapitre. Ces transpositions sont possibles car, les équations de base ainsi que les conditions aux limites sont décrites par des équations mathématiques similaires dans tous ces problèmes.

Notons aussi que les résultats analytiques exposés dans ce chapitre peuvent être exploités pour l'étude des phonon-polaritons et des plasmon-polaritons en polarisation S.

Appendice B

Nous répertorions les expressions analytiques des fonctions réponses de référence ayant permis le calcul des densités d'états étudiées plus haut, dans ce chapitre. Nous omettons les détails de leurs calculs car, la majorité d'entre eux est déjà donnée dans le chapitre précédent. Ainsi, nous donnons les expressions des fonctions réponses d'interface ainsi que la fonction réponse complète associée au super-réseau infini et au super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage.

B-1) Super-réseau infini

a) Les éléments g(m,m'), où $m \equiv (n, i, \pm \frac{d_i}{2})$ de la fonction réponse g entre les différents plans d'interface, comme fonctions de C_i, S_i, F_i, t et η [éqs.(IV-2-2) - (IV-2-3), (IV-2-5) - (IV-2-6) et (IV-3-4) - (IV-3-5)], sont

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

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

$$g\left(n, 1, \frac{+d_1}{2}; n', 1\ \frac{-d_1}{2}\right) = \frac{S_2}{F_2} \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2 - 1} + \frac{S_1}{F_1} \frac{t^{|n-n'+1|+1}}{t^2 - 1}, \tag{B-3}$$

$$g\left(n, 1, \frac{+d_1}{2}; n', 1\ \frac{+d_1}{2}\right) = \left(\frac{C_1 S_2}{F_2} + \frac{C_2 S_1}{F_1}\right) \frac{t^{|n-n'|+1}}{t^2 - 1}. \tag{B-4}$$

b) Les éléments de la fonction réponse complète entre deux points quelconques du super-réseau infini s'expriment par

$$g(n, i, x_3; n', i', x'_3) = \delta_{nn'}\ \delta_{ii'}\ U_i(x_3, x'_3)$$

$$+\frac{1}{S_i S_{i'}} \left[\mathrm{sh}\left[\alpha_i\left(\frac{d_i}{2} - x_3\right)\right]; \mathrm{sh}\left[\alpha_i\left(\frac{d_i}{2} + x_3\right)\right]\right] \overleftrightarrow{g}(M_m, M_{m'}) \begin{bmatrix} \mathrm{sh}\left[\alpha_i\left(\frac{d_{i'}}{2} - x'_3\right)\right] \\ \\ \mathrm{sh}\left[\alpha_i\left(\frac{d_{i'}}{2} + x'_3\right)\right] \end{bmatrix} \tag{B-5}$$

où

$$U_i(x_{3'}, x'_3) = \frac{-1}{2F_i} e^{-\alpha_i |x_3 - x'_3|} + \frac{1}{2F_iS_i}$$

$$\times \left[\mathrm{sh}\,[\alpha_i(\frac{d_i}{2} - x'_3)]\, e^{-\alpha_i(\frac{d_i}{2} + x_3)} + \mathrm{sh}\,[\alpha_i(\frac{d_i}{2} + x'_3)]\, e^{-\alpha_i(\frac{d_i}{2} - x_3)} \right] \qquad \text{(B-6)}$$

Dans l'équation (B-5), le deuxième de la somme est le produit d'une matrice (1x2) par la matrice (2x2) $\overleftrightarrow{g}$ $(M_m, M_{m'})$ et par la matrice (2x1). La matrice carrée $\overleftrightarrow{g}$ $(M_m, M_{m'})$ est la matrice dont les éléments sont donnés par les équations (B-1)-(B-4), pour $m = (n, 1, \pm \frac{d_1}{2})$ et $m' = (n', 1, \pm \frac{d_1}{2})$.

B-2) <u>Super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage</u>

Le super-réseau semi-infini avec une couche d'encapsulage considéré ici, est terminé par la cellule unité n=0 formée d'une couche de surface i = 0, d'épaisseur d_0. Cette couche est déposée sur la couche i=1 du super-réseau semi-infini. La cellule de dessous n=-1, est constituée des couches i=2 et i=1 du super-réseau (voir fig. III-3c).

a) Ceci étant, nous trouvons les expressions suivantes des éléments de la fonction réponse d'interface pour ce système:

$$d(0,0,-\frac{d_0}{2}\,;0,0,\frac{d_0}{2}) = d(0,0,\frac{d_0}{2}\,;0,0,-\frac{d_0}{2}) = \frac{\frac{C_1S_2}{F_2} + \frac{C_2S_1}{F_1}}{(1 + \frac{F_v\,S_0}{F_0\,C_0})\,C_0\,\Delta}, \qquad \text{(B-7)}$$

$$d(0,0,\frac{d_0}{2}\,;0,0,-\frac{d_0}{2}) = \frac{\frac{C_1S_2}{F_2} + \frac{C_2S_1}{F_1} + \frac{S_0}{F_0C_0}(C_1\,C_2 + \frac{F_1}{F_2}\,S_1\,S_2 - t)}{(1 + \frac{F_v\,S_0}{F_0\,C_0})\,\Delta}, \qquad \text{(B-8)}$$

$$d(0,0,-\frac{d_0}{2}\,;0,0,-\frac{d_0}{2}) = \frac{1}{\Delta}\left(\frac{C_1\,S_2}{F_2} + \frac{C_2\,S_1}{F_1}\right), \qquad \text{(C-9)}$$

et, pour n et n' ≤ 0 et i $\neq 0$,

$$d\left(n,1,-\frac{d_1}{2};n',1\,\frac{-d_1}{2}\right)=\frac{t}{t^2-1}\left\{\left(\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}\right)t^{|n-n'|}-t^{-n-n'}\left(\frac{S_1t}{F_1}+\frac{S_2}{F_2}\right)\frac{Y}{\Delta}\right\},\tag{B-10}$$

$$d\left(n,1,-\frac{d_1}{2};n',1\,\frac{-d_1}{2}\right)=\frac{t}{t^2-1}\left\{\frac{S_2t^{|n-n'|}}{F_2}+\frac{S_1t^{|n-n'-1|}}{F_1}-t^{-n-n'}\left(\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}\right)\frac{Y}{\Delta}\right\}\tag{B-11}$$

$$d\left(n,1,\frac{d_1}{2};n',1,+\frac{d_1}{2}\right)=\frac{t}{t^2-1}\left\{\frac{S_2t^{|n-n'|}}{F_2}+\frac{S_1t^{|n-n'+1|}}{F_1}-t^{-n-n'}\left(\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}\right)\frac{Y}{\Delta}\right\},\tag{B-12}$$

$$d\left(n,1,\frac{d_1}{2};n',1,+\frac{d_1}{2}\right)=\frac{t}{t^2-1}\left\{\left(\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}\right)t^{|n-n'|}-t^{-n-n'}\left(\frac{S_1}{F_1}+\frac{S_2}{F_2}\,t\right)\frac{Y}{\Delta}\right\};\tag{B-13}$$

où Δ et Y sont donnés par les équations (IV-3-6) et (IV-3-18).

b) Les éléments de la fonction réponse complète $\overleftrightarrow{d}$, entre deux points quelconques de cette hétérostructure, peuvent être obtenus de la même manière que précédemment. Comme dans la présente étude nous avons besoin seulement de la trace de cette fonction réponse, nous donnons ces expressions uniquement pour deux points qui appartiennent à la fois soit au super-réseau, soit à la couche d'encapsulage ou au vide.

i) ***Cas où les deux points x_3 et x'_3 se situent dans le super-réseau semi-infini*** :

Lorsque x_3 et x'_3 se trouvent dans le super-réseau, l'élément de fonction réponse $d(n, i, x_3 ; n', i', x'_3)$ associé au système composite, est donné par l'équation (B-5) dans laquelle on a remplacé $\overleftrightarrow{g}$ $(M_m, M_{m'})$ par $\overleftrightarrow{d}$ $(M_m, M_{m'})$ fourni par les équations (B-10) - (B-13).

ii) ***Cas où les dux points appartiennent à la couche d'encapsulage*** :

A partir de l'éqution (B-5), l'élément de la fonction réponse s'écrit comme suit:

$$d(0,0,x_3\,;0,0,x'_3) = U_0(x_3,x'_3)$$

$$+\frac{1}{S_0^2}\left[\mathrm{sh}\,[\alpha_0(\frac{d_0}{2}-x_3)\,]\,;\,\mathrm{sh}\,[\alpha_0(\frac{d_0}{2}+x_3)\,]\right]\overleftrightarrow{d}(M_0,M_0)\begin{bmatrix}\mathrm{sh}\,[\alpha_0(\frac{d_0}{2}-x'_3)\,]\\ \\ \mathrm{sh}\,[\alpha_0(\frac{d_0}{2}+x'_3)\,]\end{bmatrix}$$

(C-14)

où

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

$$\times\left[\mathrm{sh}[\alpha_0(\frac{d_0}{2}+x'_3)\,]\exp\,[-\alpha_0(\frac{d_0}{2}+x_3)\,] + \mathrm{sh}\,[\alpha_0(\frac{d_0}{2}+x'_3)]\exp\,[-\alpha_0(\frac{d_0}{2}-x_3)]\right],$$

(B-15)

et $\overleftrightarrow{d}(M_0, M_0)$ est la matrice (2x2) formée des éléments donnés par les équations (B-7)-(B-9), pour $M_0 = (0, 0, \pm\frac{d_0}{2})$.

iii) <u>*Cas où les deux points se situent dans le vide*</u> :

L'élément de la fonction réponse associée est de la forme

$$d(x_3,x'_3) = \frac{-1}{2F_v} + \left[\frac{1}{2F_v} + \frac{\frac{C_1S_2}{F_2}+\frac{C_2S_1}{F_1}+\frac{S_0}{F_0C_0}(C_1\,C_2+\frac{F_1}{F_2}\,S_1\,S_2-t)}{(1+\frac{F_v\,S_0}{F_0\,C_0})\,\Delta}\right]e^{-\alpha_v(x_3+x'_3)}.$$

(B-16)

Bibliographie du chapitre IV

[1] **A. Yariv and P. Yeh**, in: "Optical Waves in Crystals", John Wiley and Sons (1984) 155; **P. Yeh**, in: "Optical Waves in Layered Media", John Wiley and Sons (1988).

[2]. **J.J. Quinn, G. Eliasson and P. Hawrylak**, in: "Spatial Dispersion in Solids and Plasmons", edited by P.Halevi, Vol.1, North-Holland (1992) 243 .

[3]. **T. Dumelow, T. J. Parker, S. R. P. Smith and D. R. Tilley**, Surf. Sci. Rep., 17, (1993) 151.

[4]. **M. L. Bah, A. Akjouj and L. Dobrzynski**, Surf. Sci. Rep., 16, (1992) 95.

[5] **R. Szenics, R. F. Wallis, G. F. Giuliani and J. J. Quinn**, Surf. Sci., 166, (1986) 45.

[6] **N. C. Constantinou and M. G. Cottam**, J. Phys. C : Solid States Phys., 19, (1986) 739.

[7]. **P . Lambin, J. P. Vigneron and A. A. Lucas**, Phys. Rev.B 32, (1985) 8203.

[8]. **A. Dereux, J. P. Vigneron, P. Lambin and A. A. Lucas**, Physica Scripta, 35, (1987) 338; Physica Scripta, 38, (1988) 462; Phys. Rev.B 38, (1988) 5438.

[9]. **P. Lambin, J. P. Vigneron, A. A. Lucas and A. Dereux**, Physica Scripta, 35, (1987) 343.

[10]. **W. Liu, G. Eliasson and J. J. Quinn**, Solid State Comm., 55, (1985) 533.

[11]. **N. Raj and D. R. Tilley**, Solid State Comm., 55, (1985) 373.

[12]. **P. Yeh, A. Yariv and C. S. Hong**, J. Opt. Soc. Am. 67, (1977) 423.

[13] **P. Yeh, A. Yariv and A. Y. Cho**, Appl. Phys. Lett. 32, (1978) 104.

[14]. **W. Ng, P. Yeh, P. C. Chen and A. Yariv**, Appl. Phys. Lett. 32, (1978) 370.

[15] **M. L. Bah, A. Akjouj, , E. H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani** and **L. Dobrzynski**, Surface and Interface Optical Waves: Transverse Electric Localized and Resonant Modes; soumis à: Journal of Optical Society of America.

[16]. **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. Rep., 11, (1990) 139.

[17]. **L. Dobrzynski**, Phys. Rev. B 37, 8027 (1988) and Phys. Rev. B 43, (1991) 1830.

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

[19]. **R. E. Camley** and **D. L. Mills**, Phys. Rev. B 29, (1984) 1695.

[20]. **E. H. El Boudouti**,Thèse de Doctorat de l'Université de Lille I, France (1994).

[21]. **E. H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani, E. M. Khourdifi** and **L. Dobrzynski**, Phys. Rev. B 48, (1993) 10487 ; **B. Djafari-Rouhani, E. H. El Boudouti** and **E. M. Khourdifi**, Vacuum 45, (1994) 341.

[22] **A. Akjouj, M. L. Bah, E. H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani** and **L. Dobrzynski**, Proceedings of the 17th International Seminar on Surface Physics, Kudowa (Poland), Vacuum, in press (1995).

[23] **M. Sleslicka, R. Kucharczyk, E. H. El Boudouti, B. Djafari-Rouhani, M. L. Bah, A. Akjouj** and **L. Dobrzynski**, Vacuum, in press (1995).

[24]. **E. H. El Boudouti, R. Kucharczyk** and **M. Sleslicka**, Czech. J. Phys., 43, (1993) 899.

Conclusion Générale

CONCLUSION GENERALE

L'essentiel de ce mémoire porte sur l'étude des modes des polaritons dans des structures composites diélectriques simples (matériau semi-infini, interface entre deux matériaux semi-infinis différents, lame mince et système "sandwich") et dans d'autres plus complexes, telles que les super-réseaux infini et semi-infini sur lequel est déposé un substrat ou limité par le vide et le super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage (elle-même limitée par le vide). Pour mener cette étude, la théorie des réponses d'interface a été utilisée. Celle-ci a permis de calculer les fonctions réponse associées à ces structures multi-couches et super-réseaux, et par conséquent, mettre en évidence l'existence des modes localisés (modes d'interface et de surface) et résonnants. Sur le plan pratique, cette étude permet alors de caractériser les propriétés optiques des matériaux lamellaires relatives aux expériences de diffusion des ondes électromagnétiques.

Dans le cas des systèmes composites diélectriques simples, la connaissance des fonctions réponse associées permet non seulement de calculer les vecteurs propres, mais aussi de déduire les relations de dispersion des polaritons. Les applications de ces résultats analytiques à des cas concrets de tels composites ont donné la dispersion des modes de phonon-polaritons de polarisation P. Une partie des courbes obtenues est en parfait accord avec celles déjà données auparavant par une autre méthode. Pour le cas spécifique du système sandwich, les résultats mettent en relief une dépendance du nombre de modes des phonon-polaritons confinés avec le choix de l'épaisseur et la nature de la lame mince insérée. Ce qui pourrait jouer un rôle important dans les expériences en relation avec les polaritons guidés.

Nous avons aussi appliqué la théorie de réponse d'interface à l'étude des polaritons dans quelques types de matériaux composites diélectriques composés, pour l'essentiel, de super-réseaux à deux couches. Nous avons ainsi pu bâtir les expressions analytiques des fonctions réponses (ou fonctions de Green) correspondantes et en déduire les relations de dispersion des polaritons (données par les pôles de ces fonctions réponses). La connaissance des composantes de la fonction réponse associées au système "super-réseau/couche homogène/vide" nous a permis de construire les expressions analytiques des variations de densités d'états liée aux polaritons de polarisation P. Une application numérique a permis d'apprécier de façon qualitative l'existence des modes de polaritons de surface et d'interface (modes P) dans les cas concrets de super-réseaux constitués de matériaux de GaAs, InAs, InP et/ou GaP. Les résultats obtenus ont révélé une variation des états localisés en fonction de la nature de la couche de surface du super-réseau et du rapport des épaisseurs des couches de volume et, pour un super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage (limitée par le vide), une dépendance des modes de polaritons localisés avec l'épaisseur de la couche ajoutée.

Dans la dernière partie de ce mémoire, les résultats généraux précédents ont été appliqués à l'étude des ondes optiques (cas des modes de polarisation S).. La dispersion des états localisés et résonnants pour ces hétérostructures a été examinée, ainsi que la distribution spatiale de ces états. L'étude du super-réseau semi-infini recouvert d'une couche d'encapsulage différente de celle de volume, a mis en relief des pics deltas qui correspondent soit aux modes localisés, soit aux modes résonnants. Elle montre une forte dépendance des fréquences correspondantes, aussi bien avec l'épaisseur de la couche adsorbée qu'avec la nature de la couche du super-réseau en contact avec cette dernière. Quant à l'interface entre un super-réseau semi-infini et un substrat semi-infini, les résultats obtenus montrent que la perte des états due aux pics deltas de poids (-1/2) aux limites des bandes de volume est entièrement compensée par l'apparition des pics (de poids environ égal à 1) associés aux états résonnants qui se répartissent différemment sur chacun des deux super-réseaux complémentaires. Les intensités de ces résonances dépendent fortement des paramètres relatifs du substrat, ainsi que de la nature de la couche du super-réseau en contact avec ce dernier. En résumé, les courbes de dispersion obtenues peuvent être un moyen utile pour la caractérisation du matériau à la surface du super-réseau.

Soulignons que la possibilité de transposition de ces résultats à l'étude d'autres excitations (électrons, ondes élastiques) dans les super-réseaux est due au fait que, dans tous ces problèmes, les équations de mouvement ainsi que les conditions aux limites sont décrites par des équations mathématiques similaires.

Le travail présenté dans ce mémoire sera poursuivi par une analyse numérique des densités d'états des phonon-polaritons (cas de la polarisation P) localisés et résonnants. Ce qui permettrait de suivre l'évolution de ces modes aussi bien dans les gaps qu'à l'intérieur des bandes de volume.

Les calculs effectués pour l'étude des polaritons dans un super-réseau recouvert d'une couche d'encapsulage peuvent aussi être faits pour les mêmes excitations dans des hétérostructures plus complexes, par exemple, le super-réseau fini pris en sandwich entre deux substrats , les super-réseaux à trois couches.

L'ensemble des résultats donnés dans ce mémoire peuvent aussi être transposés au cas des plasmon-polaritons.