

N° d'ordre : 2009

162861

50376
1997
503

THESE

Présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE
EN
SCIENCES DES MATERIAUX

par

El Mostafa OUMGHAR

Sujet de thèse



PHONONS DANS LES COUCHES
ADSORBEES ET LES SYSTEMES GREFFES

SOMMAIRE

CHAPITRE I : *Introduction générale*

Bibliographie du chapitre I

CHAPITRE II : *Rappel de la théorie de réponse d'interface des matériaux composites discrets*

II-1) Introduction

II-2) Théorie générale de réponse d'interface

II-2-1) Fonction réponse des systèmes composites discrets

II-2-2) Vecteurs propres d'un système composite discret

Bibliographie du chapitre II

CHAPITRE III : *Phonons localisés et résonants dans le système greffé*

III-1) Introduction

III-2) Equation du mouvement des atomes et Hamiltonien \tilde{h}_c associé au système étudié

III-3) Opérateur de clivage

III-4) Opérateur réponse d'interface

III-4-1) Fonction réponse associée au milieu (I)

III-4-2) Fonction réponse et états propres associés au milieu (II)

III-5) Détermination des modes localisés et des vecteurs propres correspondants

III-5-1) Détermination des états vibrationnels localisés

III-5-2) Calcul des vecteurs propres associés aux états vibrationnels localisés

III-6) Phonons résonants dans le système greffé

III-7) Calcul des coefficients de transmission et de réflexion

Bibliographie du chapitre III

CHAPITRE IV : *Modèles pour l'étude des propriétés vibrationnelles des polymères adsorbés*

IV-1) Introduction

IV-2) Modèles pour les polymères adsorbés sur une surface

IV-2-1) Premier modèle : Substrat à une seule dimension

IV.2.1.1) Fonction réponse de référence dans l'espace d'interface

IV.2.1.2) Opérateur de couplage

IV.2.1.3) Opérateur réponse d'interface

IV.2.1.4) Calcul de la variation de la densité totale d'états

IV.2.1.5) Mise en évidence des bandes interdites pour le modèle considéré à partir du calcul des coefficients de transmission

IV.2.1.6) Structure de bandes d'un film de polymères adsorbés sur le substrat unidimensionnel (chaîne infinie)

a- Fonction réponse structurale associée à une chaîne infinie d'atomes identiques.

b- Phonons localisés associés au système composé de la chaîne finie greffée sur un atome de la cellule unitaire.

IV-2-2) Deuxième modèle : substrat tridimensionnel

IV.2.2.1) Calcul de la variation de la densité totale d'états

IV.2.2.2) Structure de bandes du système constitué d'un film de polymères adsorbés sur tous les sites de la surface libre du substrat.

IV-3) Conclusion

Bibliographie du chapitre IV

CHAPITRE V : *Phonons résonants dans les couches adsorbées*

V-1) Introduction

V-2) Modèle des constantes de force pour le cristal cubique centré

V-3) Fonction de Green de volume d'un cristal infini de structure cubique centrée [20-21]

V-4) Fonction de Green de volume pour un cristal semi-infini de structure cubique centrée [21]

V-5) Fonction réponse du système composé de couches adsorbées sur un cristal semi-infini [21]

V-6) Application à la surface (001) du fer sur laquelle sont adsorbées des couches atomiques de Tungstène [22]

V-7) Conclusion

Bibliographie du chapitre V

Appendices

Appendice I

I-1) Définition de l'Hamiltonien \tilde{h}_C associé au système greffé

I-2) Définition de l'opérateur Hamiltonien \tilde{h}_D associé au système composé des milieux (I) et (II) découplés

I-3) Expression matricielle de l'opérateur \vec{h}_{0i} associé au milieu (II) tout seul et de l'opérateur de clivage \vec{V}_{0i}

I-4) Calcul des états propres associés au milieu (II) découplé du milieu (I)

I-5) Définition détaillée de la fonction réponse de référence \vec{G}_s associée au système greffé

I-6) Définition de la matrice $\vec{\Delta}(MM)$ et de son inverse $\vec{\Delta}^{-1}(MM)$

I-7) Calcul des fonctions réponses associées au système greffé

Appendice II

Fonction réponse structurale

Appendice III

III-1) Energie potentielle de N atomes identiques dans un cristal

III-2) Cas d'un cristal de structure cubique centrée

III-2-1) Calcul des constantes de forces $\phi_{\alpha\beta}(\ell\ell')$

III-2-2) Equation du mouvement de l'atome (0,0,0) et expression de la matrice $\vec{D}(k, \omega)$

III-2-3) Matrice d'énergie $\vec{H}_0(k_1, k_2, \ell_3, \ell'_3 \omega)$ associée au cristal infini

III-3) Cas d'un cristal semi- infini de structure cubique centrée

CHAPITRE I

Introduction générale

Les études concernant les surfaces des solides et les interfaces entre divers matériaux ont connu un développement important ces dernières années, en particulier l'étude des propriétés vibrationnelles et électroniques. Les conséquences scientifiques et les applications industrielles paraissent fort importantes.

Le début de la physique des vibrations des surfaces est dû à Lord Rayleigh (1882) qui étudia la propagation des ondes en surface des milieux continus [1]. Love (1911) traita un autre type d'onde de surface qui peut exister lorsque une couche d'un matériau isotrope est supportée par un substrat d'un autre matériau isotrope [2]. Stonley étudia l'onde qui peut se propager le long de l'interface entre deux matériaux [3].

L'étude des phonons de surface pour une structure cristalline semi-infinie est plus récente. En 1912, Born et Von Karman [4] fournirent la première théorie microscopique des phonons de volume dans un réseau cristallin à trois dimensions et donnèrent ainsi naissance à la théorie de la dynamique des réseaux cristallins. Cette théorie ainsi que ses nombreuses applications sont discutées dans des références standards : Born et Huang [5]; Liebfried [6]; Liebfried et Ludwig [7]; Maradudin, Montroll et Weiss [8].

La méthode des conditions aux limites périodiques présente un grand intérêt pratique grâce à sa formulation simple. Cependant, elle ne peut s'appliquer pour l'étude des états vibrationnels de surface, car la symétrie de translation dans la direction normale à la surface n'existe plus. Ainsi, l'étude des effets de surface en dynamique des réseaux cristallins ne s'est développée que dans la deuxième moitié du vingtième siècle.

En 1948, utilisant la technique des fonctions de Green, Lifshitz et Rosenzweig [9] étudièrent pour la première fois les modes de surface. La méthode des fonctions de Green utilisée par Lifshitz et Rosenzweig devint plus tard une technique de référence souvent utilisée dans ce domaine [10-11]; elle considère la surface propre du cristal comme une perturbation du réseau cristallin infini et de cette façon les vibrations de la surface sont obtenues à partir du spectre des vibrations de volume et des conditions aux limites en surface.

Des techniques similaires basées sur le formalisme des fonctions de Green ont été proposées [12-13] 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). Dans ce cadre, afin d'étudier des systèmes composites avec un grand nombre de surfaces et interfaces, une nouvelle théorie a été développée par Léonard Dobrzynski, intitulée "Théorie de réponse d'interfaces" [14-15].

La théorie de réponse d'interfaces s'est montrée efficace pour l'étude des propriétés vibrationnelles et électroniques des systèmes discrets et continus tels que le système "sandwich" (lame mince entre deux matériaux) [16] et les hétérostructures métalliques [17]. C'est cette méthode que nous utiliserons dans le présent travail. Plus précisément, nous l'appliquerons pour déterminer les modes localisés et résonants pour un système comportant des parties greffées sur un substrat, ainsi que pour l'étude des propriétés vibrationnelles des polymères adsorbés.

L'ensemble du travail que nous présentons est structuré de la façon suivante. Dans le deuxième chapitre, nous donnerons un bref rappel de la théorie de réponse d'interfaces. Le troisième chapitre sera consacré à l'étude du système greffé. Il s'agit d'établir les fonctions réponses correspondant à chaque partie du système, de déterminer les modes localisés et résonants [18] et de calculer les coefficients de réflexion et de transmission [19]. Cette étude montre en particulier que des phénomènes de transmission nulle existent dans le "système

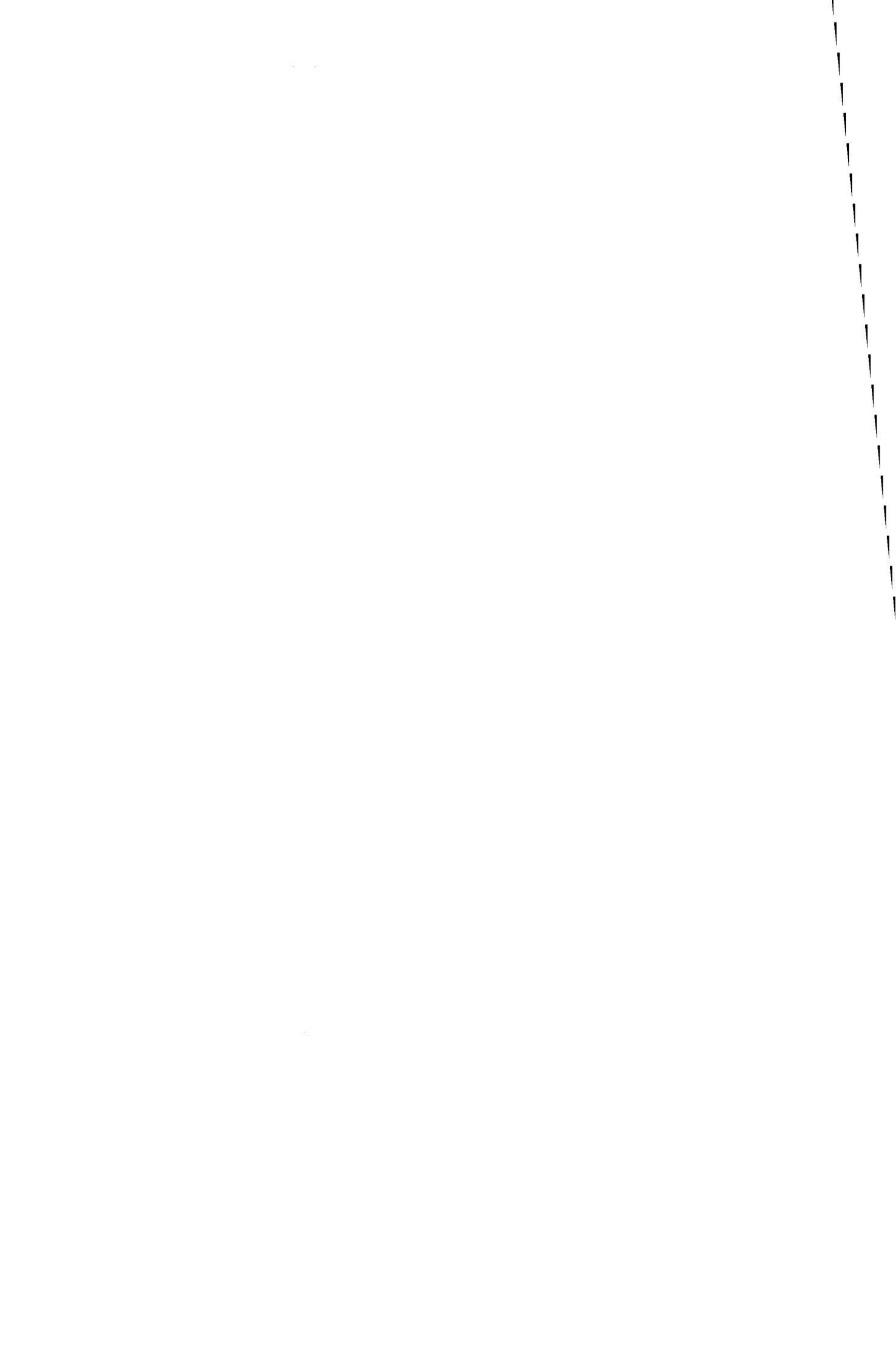
greffé". Le quatrième chapitre consiste en l'introduction de modèles simples permettant l'étude des propriétés vibrationnelles des polymères adsorbés sur une surface [20]. Il s'agit du calcul des fréquences de vibration des polymères adsorbés sur une chaîne infinie et sur la surface libre d'un cristal semi-infini de structure cubique simple et de la détermination de la structure d'un film de polymères adsorbés sur une chaîne infinie et sur la surface libre du cristal considéré. Dans le cinquième chapitre, nous nous sommes intéressés aux résonances dans un cristal semi-infini avec une surface propre et dans le système composé des couches adsorbées sur un cristal semi-infini. Dans ce chapitre nous avons donné une vue des propriétés dynamiques de la surface (001) du fer avec ou sans couches de tungstène adsorbées en introduisant une méthode permettant le calcul des densités d'états locales pour les systèmes signifiés, à partir duquel nous avons constaté que la densité locale des atomes appartenant aux couches près de la surface est différentes de celle des atomes qui appartiennent aux couches se trouvant dans le volume du cristal.

Bibliographie de l'introduction générale

- [1] Lord Rayleigh, Proc. Lond. Math. Soc. 17, 4 (1887).
- [2] A. E. H. Love, in *Some Problems of Geodynamics* (London, Cambridge University Press, 1911).
- [3] R. Stoneley, Proc. Roy. Soc. A., 106, 421 (1927).
- [4] M. Born and Th. Von Karman, Phys. Z, 13, 297 (1912).
- [5] M. Born and K. Huang, in *Dynamical Theory of Crystal Lattices* (Oxford University Press, New York, 1954).
- [6] G. Liebfried, in *Handbuch der Physik*, edited by S. Flügge (Springer-Verlag, Berlin, 1955), Vol. VII, Part I, p. 104.
- [7] G. Liebfried and W. Ludwig, in *Solid State Physics*, edited by F. Seitz and Turnbull (Academic Press Inc., New York, 1963), Vol. 12, p.275.
- [8] A. A. Maradudin, E. W. Montroll and G. H. Weiss, in *Solid State Physics*, edited by F. Seitz and Turnbull (Academic Press Inc., New York, 1963), Supl., Vol. 3.
- [9] I. M. Lifshitz, L. M. Rosenzweig, Zh. Eksp. Teor. Fiz. , 18, 1012 (1948); I. M. Lifshitz, Nuovo Cimento Suppl. 3, 732 (1956).
- [10] A. A. Maradudin, E.W Montroll, G. H. Weiss and Ipatova, in *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, (Academic Press, New York and London 1971).

- [11] **A. A. Maradudin and J. Melangallis**, Phys.Rev. A., 133 (1967) 1118.
- [12] **F. Garcia-Moliner and J. Rubio**, J. Phys. C 2, 1789 (1969); Proc. R. Soc. London. Ser. A 234, 257 (1971).
- [13] **M. G. Cottam and A. A. Maradudin**, in *Surface Excitations*, Modern Problems in Condensed Matter Sciences, edited by V. M. Agranovich and R. Loudon, (Amsterdam : North- Holland 1984) Vol 9, p.1.
- [14] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. Reports 6, 119-157 (1986).
- [15] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 180, 489 (1987)
- [16] **B. Sylla**, Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille I, France (1990).
- [17] **A. Akjouj**, Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille I, France (1989).
- [18] **L. Dobrzynski, A. Akjouj, B. Sylla and B. Djafari-Rouhani**, Acta Phys. Pol. A 81, 85 (1992).
- [19] **L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani, P. Zielinski, A. Akjouj, B. Sylla and E. M. Oumghar**, Acta Phys. Pol. A 89, 139 (1996).
- [20] **P. A. Deymier, E. Oumghar, J. O. Vasseur, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski**, Prog in Surf. Sci. (à paraître).

CHAPITRE II



Rappel de la théorie de réponse d'interface des matériaux composites discrets

II.1- Introduction

Afin d'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 basées sur le formalisme des fonctions de Green ont été élaborées [1,2]. Dans ce cadre la théorie de réponse d'interface [3] a été élaborée pour l'étude des systèmes composites comportant un certain nombre de surfaces et interfaces.

Un système composite est défini comme formé de plusieurs parties homogènes reliées par des interfaces. Il faut noter que tous les cas possibles peuvent être traduits par ce terme, en particulier, en physique de la matière condensée : défauts, surfaces et interfaces de forme quelconque [3,4]. Il est caractérisé par l'absence, en son sein, de la symétrie par translation; l'inexistence de cette symétrie est due à la destruction de la périodicité du réseau cristallin suivant certaines directions de l'espace.

Cette théorie permet d'obtenir les fonctions réponses (fonctions de Green) et par voie de conséquence, les relations de dispersion des modes localisés ainsi que les densités d'états (locales et totales) dans n'importe quel type de systèmes composites, à condition de connaître au départ les fonctions de Green de volume des constituants. Son principe est d'établir, dans un

premier temps, les fonctions réponses dans l'espace limité aux interfaces séparant les différents constituants avant d'étendre le calcul à l'espace complet.

Pour appliquer la théorie de réponse d'interface aux systèmes composites, nous sommes sensés suivre les étapes suivantes [4,5,6].

Dans un premier temps, on divise le système infini en des sous systèmes qu'on définit. Ces sous systèmes ont en général des propriétés physiques différentes.

Puis, on définit les interfaces (et les surfaces) séparant les régions des sous systèmes.

On définit enfin, la fonction réponse \tilde{G}_{0i} de chacun des sous systèmes supposés infinis ($i=1,2,3,\dots$) et la fonction \tilde{G}_s dont les éléments $G_s(n,n')$ sont égaux à $G_{0i}(n,n')$ si les indices n et n' correspondent à des sites atomiques situées dans le même sous système. Les éléments $G_s(n,n')$ correspondant à deux sites atomiques non situées dans le même sous système sont identiquement nuls par définition de cette fonction réponse. \tilde{G}_s est la fonction réponse de référence.

Ainsi en effectuant cette démarche, nous pouvons associer au système composite donné, une fonction réponse \tilde{g} liée à la fonction réponse de référence \tilde{G}_s par l'équation universelle de la théorie des réponses d'interface [3-7].

Il est bien connu que selon la nature des variables d'espace utilisées, les sciences utilisent soit un langage mathématiques discret, soit continu, soit mixte (discret et continu). Par exemple dans une équation matricielle les variables sont discrètes alors qu'elles sont continues dans une équation différentielle ou intégrale. Dans notre étude nous nous sommes intéressés aux phonons dans des systèmes composites discrets, raison pour laquelle nous nous sommes limités au langage mathématique discret.

II.2- Théorie générale de réponse d'interface

II.2.1- Fonction réponse des systèmes composites discrets [7]

Considérons un système composite contenu dans l'espace D et formé de N sous systèmes définis respectivement dans leurs espaces d'existence D_i ($1 \leq i \leq N$). Ces sous systèmes sont assemblés par des domaines d'interfaces $M_i \in D_i$. Chaque sous système i est en interaction avec J autres sous systèmes. L'espace d'interface M_i est aussi en général composé de J sous interfaces M_{ij} ($1 \leq j \leq J$). A un matériau homogène infini défini dans l'espace D_∞ , on associe un opérateur \tilde{H}_{0i} . La fonction réponse \tilde{G}_{0i} de ce matériau inverse de l'opérateur \tilde{H}_{0i} est définie par :

$$\tilde{H}_{0i} \cdot \tilde{G}_{0i} = \tilde{I}. \quad (\text{II-2-1})$$

\tilde{I} est la matrice unité.

Soit \tilde{V}_{0i} l'opérateur de clivage introduit pour découper dans le système homogène i infini, le sous système nécessaire pour la construction du système composite.

Définissons une nouvelle matrice \tilde{h}_{0i} tel que :

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{0i} &= \tilde{H}_{0i} + \tilde{V}_{0i}; & \text{dans } D_\infty; \\ \text{et son inverse } \tilde{g}_{0i} & & \\ \tilde{h}_{0i} \cdot \tilde{g}_{0i} &= \tilde{I}, & \text{dans } D_\infty. \end{aligned} \quad (\text{II-2-2})$$

Les trois équations écrites ci dessus permettent d'écrire la relation de Dyson;

$$\tilde{g}_{0i} \cdot (\tilde{I} + \tilde{A}_{0i}) = \tilde{G}_{0i}; \quad \text{dans } D_\infty. \quad (\text{II-2-3})$$

où

$$\tilde{A}_{0i} = \tilde{V}_{0i} \cdot \tilde{G}_{0i}; \quad \text{dans } D_\infty. \quad (\text{II-2-4})$$

L'opérateur réponse de surface \tilde{A}_{si} comprend par définition , les éléments matriciels dans D_i de l'opérateur \tilde{A}_{0i} .

Pour le système i limité par des surfaces parfaitement réfléchissantes, l'équation de Dyson tronquée devient :

$$\vec{g}_{si} \cdot (\vec{I} + \vec{A}_{si}) = \vec{G}_{si}. \quad (\text{II-2-5})$$

\vec{A}_{si} , \vec{g}_{si} , et \vec{G}_{si} représentent respectivement dans D_i , les éléments de matrice des opérateurs \vec{A}_{oi} , \vec{g}_{oi} et \vec{G}_{oi} . On définit ainsi l'opérateur réponse de surface \vec{A}_s pour le système composite par une matrice composée de blocs diagonaux des \vec{A}_{si} , ($1 \leq i \leq N$) des sous systèmes considérés. L'opérateur \vec{h}_s associé au système composite est défini par une matrice formée de blocs indépendants \vec{h}_{si} ($1 \leq i \leq N$) des sous systèmes considérés. La fonction \vec{g}_s associée à \vec{h}_s dans l'espace D du système composite est défini par :

$$\vec{h}_s \cdot \vec{g}_s = \vec{I}; \quad \text{dans } D. \quad (\text{II-2-6})$$

On montre ainsi que :

$$\vec{g}_s \cdot (\vec{I} + \vec{A}_s) = \vec{G}_s; \quad \text{dans } D. \quad (\text{II-2-7})$$

\vec{G}_s est la fonction réponse de référence formée par des parties tronquées des fonctions réponses des systèmes homogènes infinis. Le système composite est obtenu en assemblant les N sous systèmes indépendants par un opérateur de couplage \vec{V}_I , qu'on ajoute à \vec{h}_s pour obtenir l'hamiltonien \vec{h} associé au système composite :

$$\vec{h} = \vec{h}_s + \vec{V}_I; \quad \text{dans } D. \quad (\text{II-2-8})$$

La fonction réponse associée au système composite est définie par la relation :

$$\vec{h} \cdot \vec{g} = \vec{I}; \quad \text{dans } D. \quad (\text{II-2-9})$$

Compte tenu des équations ci dessus, on obtient facilement

$$\vec{g} \cdot (\vec{I} + \vec{V}_I \cdot \vec{G}_s) = \vec{g}_s. \quad (\text{II-2-10})$$

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

$$\vec{g} \cdot (\vec{I} + \vec{A}) = \vec{G} \quad (\text{II-2-11})$$

où

$$\vec{A} = \vec{A}_s + \vec{V}_I \cdot \vec{G}_s. \quad (\text{II-2-12a})$$

Il faut noter que

$$\vec{G}_s \equiv \vec{G}. \quad (\text{II-2-12b})$$

L'opérateur réponse d'interface \vec{A} a des éléments non nuls seulement entre les points de l'espace d'interface M et les points de l'espace D. En introduisant une matrice rectangulaire $\vec{A}(MD)$, l'équation (II-2-11) peut être réécrite comme suit :

$$\vec{g}(DD) + \vec{g}(DM) \cdot \vec{A}(MD) = \vec{G}(DD), \quad \text{dans D.} \quad (\text{II-2-113})$$

En particulier

$$\vec{g}(DM) \cdot \vec{A}(MM) = \vec{G}(DM); \quad \text{dans D;} \quad (\text{II-2-14})$$

avec

$$\vec{A}(MM) = \vec{I}(MM) + \vec{A}(MM). \quad (\text{II-2-15})$$

Ainsi, on obtient les éléments matriciels de la fonction réponse associée au système composite par l'équation :

$$\vec{g}(DD) = \vec{G}(DD) - \vec{G}(DM) \cdot \vec{A}^{-1}(MM) \cdot \vec{A}(MD). \quad (\text{II-2-16})$$

L'équation ci-dessus est l'équation universelle de la théorie de réponse d'interface [5,7], elle permet de calculer tout élément de la fonction réponse du système composite discret.

II.2.2- Vecteurs propres d'un système composite discret [8]

La théorie de réponse d'interfaces peut être aussi appliquée pour calculer les vecteurs propres pour des systèmes composites, associés aux valeurs propres correspondantes.

Soit $\tilde{\mathbf{h}}$ un opérateur matriciel défini dans l'espace D pour un système composite par :

$$\tilde{\mathbf{h}} = \mathbf{E}\tilde{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{h}}; \quad \text{dans D}; \quad (\text{II-2-17})$$

$\hat{\mathbf{h}}$ est l'hamiltonien associé au système composite et E ses valeurs propres. Soit $\langle \mathbf{u} |$ le vecteur représentant la déformation du système lorsqu'il est soumis à une action $\langle \mathbf{F} |$ telle que

$$\langle \mathbf{u} | \cdot \tilde{\mathbf{h}} = \langle \mathbf{F} |; \quad \text{dans D}. \quad (\text{II-2-18})$$

Lorsque l'action sur le système composite est nulle, la diagonalisation de l'équation (II-2-18) permet d'obtenir les valeurs propres E et les vecteurs propres correspondants. $\tilde{\mathbf{h}}$ est en général une matrice énorme pour un système composite et le calcul direct devient complexe et fastidieux. Dans ce cas les valeurs propres et les vecteurs propres qui lui correspondent sont obtenus en utilisant la théorie de réponse d'interface.

En effet, connaissant la fonction réponse $\tilde{\mathbf{g}}$ du système composite donnée par l'équation (II-2-16), nous pouvons calculer les déformations $\langle \mathbf{u} |$ grâce aux équations (II-2-9) et (II-2-18); soit :

$$\langle \mathbf{u}(D) | = \langle \mathbf{F}(D) | \cdot \tilde{\mathbf{g}}(DD); \quad \text{dans D}. \quad (\text{II-2-20})$$

En multipliant les deux membres de l'équation (II-2-16) par l'action $\langle \mathbf{F}(D) |$, on obtient :

$$\langle \mathbf{u}(D) | = \langle \mathbf{U}(D) | - \langle \mathbf{U}(M) | \cdot \tilde{\mathbf{A}}^{-1}(MM) \cdot \tilde{\mathbf{A}}(MD); \quad \text{dans D}; \quad (\text{II-2-21})$$

où

$$\langle \mathbf{U}(D) | = \langle \mathbf{F}(D) | \cdot \tilde{\mathbf{G}}(DD) \quad (\text{II-2-22a})$$

et

$$\langle U(M) | = \langle F(D) | \cdot \tilde{G}(DM). \quad (\text{II-2-22b})$$

L'équation (II-2-21) est utilisée pour la discussion des phénomènes de réflexion et de transmission à l'interface [9-10], elle permet aussi le calcul non seulement de la déformation du système composite, mais aussi des vecteurs propres associés aux valeurs propres de \tilde{h} . Il faut noter que pour un système composite fini, les valeurs propres sont solutions de l'équation [7]

$$\det(\tilde{\Delta}(MM)) = 0. \quad (\text{II-2-23})$$

Dans ce cas on doit d'abord multiplier l'équation (II-2-21) par $\det(\tilde{\Delta}(MM))$ pour obtenir les vecteurs propres non normalisés à partir de l'équation ci dessous [8]

$$\langle u(D) | \propto \langle U(M) | \cdot \det(\tilde{\Delta}(MM)) \tilde{\Delta}^{-1}(MM) \cdot \tilde{A}(MD); \text{ dans } D. \quad (\text{II-2-24})$$

Pour un système composite qui possède des sous systèmes semi-infinis, l'équation ci dessus peut être utilisée lorsque les valeurs propres sont données par l'équation (II-2-23). Alors que l'équation (II-2-21) doit être utilisée lorsque les valeurs propres de ces sous systèmes ne sont pas données par l'équation (II-2-23).

Bibliographie du chapitre II

- [1] **F. Garcia-Moliner and J. Rubio**, J. Phys. C 2, 1789 (1969); Proc. R. Soc. London. Ser. A 234, 257 (1971).
- [2] **M. G. Cottam and A. A. Maradudin**, in *Surface Excitations*, Modern Problems in Condensed Matter Sciences, edited by V. M. Agranovich and R. Loudon (Amsterdam : North-Holland, 1984).
- [3] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. Rep., 6, 119-157 (1986).
- [4] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 180, 489 (1987).
- [5] **L. Dobrzynski, V. R. Velasco and F. Garcia Moliner**, Phys. Rev B. 35, 5872-5875 (1987).
- [6] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 200, 435 (1987).
- [7] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 175, 1 (1987).
- [8] **L. Dobrzynski and H. Puzkarski**, J. of Phys. : Condens. Matter 1, 1239 (1989).
- [9] **L. Dobrzynski, J. Mendialdua, A. Rodriguez, S. Bolibo and M. More**, J. Phys. (Paris) 50, 2563 (1989).
- [10] **J. O. Vasseur, P. A. Deymier, L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani and A. Akjouj**, Phys. Rev. B 55, 15 Avril (1997).

CHAPITRE III

Phonons localisés et résonants dans le système greffé

III.1- Introduction

Les modes de surface ou d'interface plane correspondent à des phonons localisés se propageant le long de la surface ou de l'interface d'un milieu condensé, pour une valeur donnée du vecteur d'onde parallèle à la surface. Les fréquences qui correspondent aux modes localisés apparaissent comme des pics delta dans la variation de la densité totale d'états et se situent à l'extérieur des bandes de volume du matériau considéré. Les vecteurs déplacements associés à ces modes décroissent exponentiellement à l'intérieur du volume du substrat. Depuis la prédiction, faite par Lord Rayleigh en 1885, de l'existence des ondes de surface, de nombreux travaux théoriques [1-11], et expérimentaux tels que les méthodes utilisant la diffusion inélastique des électrons [12] et des atomes d'hélium [13-19] ont été consacrés à l'étude de ces phonons localisés.

La mise en évidence des ondes de surface a été suivie par d'importantes investigations dont les résultats sont résumés par plusieurs articles de revues [1,10,20-22]. Les études récentes concernant la dynamique de surfaces et interfaces se sont orientées dernièrement vers l'étude des modes résonants dans certains composites tels que les systèmes composés de couches minces adsorbées sur un substrat [11,21,23-27]. Ces études ont montrés que les modes résonants apparaissent comme une continuité à l'intérieur de la bande du volume du substrat des modes propres des couches adsorbées. Ces continuités apparaissent à l'intérieur de la zone de Brillouin bidimensionnelle correspondante; dans une partie de cette zone se trouvent les branches des phonons localisés qui continuent comme des résonances à l'intérieur de l'autre

partie de la zone. Les modes résonants sont caractérisés par des pics dans la variation de la densité totale d'états et peuvent être détectés expérimentalement lorsqu'ils sont suffisamment aigus.

Dans ce chapitre, notre étude a pour but la mise en évidence d'un nouveau phénomène physique qui peut être utile pour les dispositifs à deux dimensions ainsi qu'à ceux à une seule dimension. Dans les systèmes habituels de barrières tunnel résonantes utilisés dans les guides d'ondes quantiques, la transmission nulle n'apparaît pas. Cependant, il a été montré récemment [28] que des zéros de transmission peuvent exister dans des guides d'ondes quantiques avec des cavités couplées. Des phénomènes de transmissions nulles apparaissent aussi dans des modèles simples [29] de guides d'ondes quantiques; c'est le cas de notre système étudié nommé "système greffé".

Description du système étudié

Le système qui fera l'objet de notre étude se compose :

D'un milieu (I) constitué d'un plan infini d'atomes identiques de masse m_1 . Les interactions entre atomes premiers voisins sont respectivement β_1^x , et β_1^y pour les déplacements des atomes situés respectivement le long des axes (\vec{X}) et (\vec{Y}) .

D'un autre milieu (II) constitué d'un autre plan d'atomes identiques infini dans la direction (\vec{Y}) mais limité à L atomes suivant la direction (\vec{X}) . La masse de ces atomes est m_2 , β_2^x et β_2^y sont respectivement les interactions entre atomes premiers voisins le long des axes (\vec{X}) et (\vec{Y}) .

β_I et β_{II} sont les couplages entre les milieu (I) et (II). En effet, β_I est l'interaction entre les atomes $(0,n)$ du milieu (I) et les atomes $(1',n)$ du milieu (II), tandis que β_{II} est l'interaction entre les atomes (L,n) et (L',n) des milieux (I) et (II)

La configuration du système est représentée sur la figure (III-1) pour une coupe perpendiculaire à l'axe (\vec{Y}) :

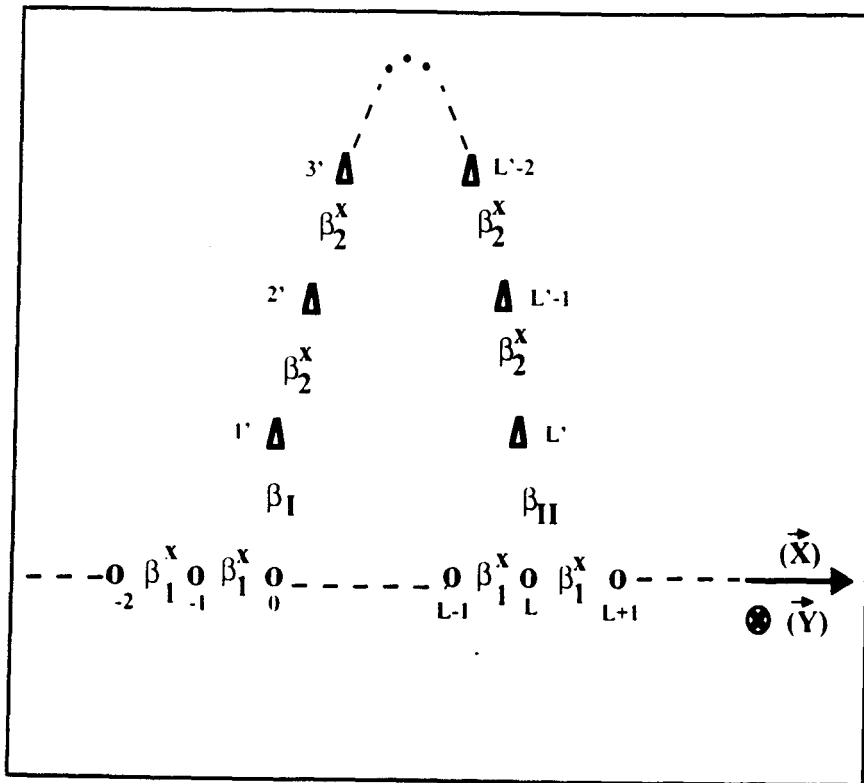


Figure III-1.

O atome d'une chaîne finie appartenant au milieu (I).

Δ atome d'une chaîne finie le long de l'axe (\vec{X}) appartenant au milieu (II).

III.2- Equation du mouvement des atomes et Hamiltonien \tilde{h}_c associé au système étudié

Pour des raisons de simplicité, nous supposons que les déplacements des atomes suivant les trois directions de l'espace sont équivalentes. En se limitant aux interactions entre atomes premiers voisins, pour un atome appartenant au milieu (I) non situé aux interfaces, l'équation du mouvement trois fois dégénérée est

$$m_1 \ddot{u}_{\ell,n} = \beta_1^y (u_{\ell,n+1} + u_{\ell,n-1} - 2u_{\ell,n}) + \beta_1^x (u_{\ell+1,n} + u_{\ell-1,n} - 2u_{\ell,n}). \quad (\text{III-2-1})$$

Alors que l'équation du mouvement de l'atome (ℓ, n) appartenant au milieu (II) non situé aux interfaces s'écrit :

$$m_2 \ddot{u}_{\ell,n} = \beta_2^y (u_{\ell,n+1} + u_{\ell,n-1} - 2u_{\ell,n}) + \beta_2^x (u_{\ell+1,n} + u_{\ell-1,n} - 2u_{\ell,n}). \quad (\text{III-2-2})$$

Les équations du mouvement des atomes $(0,n)$, (ℓ',n) , (L,n) et (L,n) situés aux interfaces s'écrivent respectivement par :

$$m_1 \ddot{u}_{0,n} = \beta_1^y (u_{0,n+1} + u_{0,n-1} - 2u_{0,n}) + \beta_1^x (u_{1,n} + u_{-1,n} - 2u_{0,n}) + \beta_I (u_{1,n} - u_{0,n}), \quad (\text{III-2-3})$$

$$m_2 \ddot{u}_{1',n} = \beta_2^y (u_{1',n+1} + u_{1',n-1} - 2u_{1',n}) + \beta_2^x (u_{2',n} - u_{1',n}) + \beta_I (u_{0,n} - u_{1',n}), \quad (\text{III-2-4})$$

$$m_2 \ddot{u}_{L',n} = \beta_2^y (u_{L',n+1} + u_{L',n-1} - 2u_{L',n}) + \beta_2^x (u_{L'-1,n} - u_{L',n}) + \beta_{II} (u_{L,n} - u_{L',n}), \quad (\text{III-2-5})$$

$$m_1 \ddot{u}_{L,n} = \beta_1^y (u_{L,n+1} + u_{L,n-1} - 2u_{L,n}) + \beta_1^x (u_{L+1,n} + u_{L-1,n} - 2u_{L,n}) + \beta_{II} (u_{L',n} - u_{L,n}). \quad (\text{III-2-6})$$

Compte tenu de la symétrie de translation du système suivant la direction (\vec{Y}) , les déplacements $u_{\ell,n}$ des atomes appartenant au substrat et $u_{\ell',n}$ des atomes appartenant au milieu greffé s'écrivent respectivement :

$$u_{\ell,n} = u_{\ell}(k_y) e^{i(nk_y a - \omega t)} \quad \text{et} \quad u_{\ell',n} = u_{\ell'}(k_y) e^{i(nk_y a - \omega t)}. \quad (\text{III-2-7})$$

où a est le paramètre du réseau et ω est la fréquence de vibration des atomes.

Par suite, les équations (III-2-1) à (III-2-7) deviennent respectivement :

$$\frac{1}{m_1} [\beta_1^x u_{l-1,m} - \gamma u_{l,m} + \beta_1^x u_{l+1,m}] = 0, \quad (\text{III-2-1}')$$

$$\frac{1}{m_2} [\beta_2^x u_{l-1,m} - \gamma' u_{l,m} + \beta_2^x u_{l+1,m}] = 0, \quad (\text{III-2-2}')$$

$$\frac{1}{m_1} [\beta_1^x u_{-1,m} - \gamma_0 u_{0,m} + \beta_1^x u_{1,m} + \beta_I u_{1',m}] = 0, \quad (\text{III-2-3}')$$

$$\frac{1}{m_2} [\beta_I u_{0,m} - \gamma' u_{1',m} + \beta_2^x u_{2',m}] = 0, \quad (\text{III-2-4}')$$

$$\frac{1}{m_2} \left[\beta_2^x u_{L-1,m} - \gamma'_{L'} u_{L',m} + \beta_{II} u_{L,m} \right] = 0, \quad (\text{III-2-5}')$$

$$\frac{1}{m_2} \left[\beta_{II} u_{L'}(k_y) + \beta_1^x u_{L-1}(k_y) - \gamma_{L'} u_L(k_y) + \beta_1^x u_{L+1}(k_y) \right] = 0. \quad (\text{III-2-6}')$$

Notons que :

$$\gamma = 2\beta_1^x - 2\beta_1^y [\cos(k_y a) - 1] - m_1 \omega^2,$$

$$\gamma' = 2\beta_2^x - 2\beta_2^y [\cos(k_y a) - 1] - m_2 \omega^2,$$

et

$$\gamma_0 = \gamma + \beta_I,$$

$$\gamma'_{I'} = \gamma' - \beta_2^x + \beta_I,$$

$$\gamma'_{L'} = \gamma' - \beta_2^x + \beta_{II},$$

$$\gamma_L = \gamma + \beta_{II}.$$

En écrivant l'équation du mouvement de chaque atome, nous obtenons les relations d'équilibre sous la forme matricielle suivante

$$\vec{h}_C \cdot \vec{U} = \vec{0}. \quad (\text{III-2-8})$$

\vec{U} est un vecteur dont les composantes sont les déplacements $u_{\ell,n}$ des atomes autour de leur position d'équilibre et \vec{h}_C est la matrice dynamique associée au système composite considéré. L'expression matricielle de \vec{h}_C est donnée en appendice I.

III.3- Opérateur de couplage

Pour le calcul de l'opérateur de couplage, nous partons du système considéré (système greffé) puis nous procédons à un clivage entre les atomes (0,n) et (ℓ' ,n), et entre les atomes (L',n) et (L,n) situés aux interfaces; il en résulte deux milieux :

* le milieu infini (I)

* le milieu fini (II) découplé.

Les équations du mouvement des atomes (0,n), (ℓ' ,n), (L',n) et (L,n) deviennent respectivement

$$\frac{1}{m_1} \left[\beta_1^x u_{-1}(k_y) - \gamma u_0(k_y) + \beta_1^x u_1(k_y) \right] = 0, \quad (\text{III-3-1})$$

$$\frac{1}{m_2} \left[-\gamma' u_1(k_y) + \beta_2^x u_2(k_y) \right] = 0, \quad (\text{III-3-2})$$

$$\frac{1}{m_2} \left[\beta_2^x u_{L'-1}(k_y) - \gamma' u_{L'}(k_y) \right] = 0, \quad (\text{III-3-3})$$

$$\frac{1}{m_1} \left[\beta_1^x u_{L-1}(k_y) - \gamma u_L(k_y) + \beta_1^x u_{L+1}(k_y) \right] = 0. \quad (\text{III-3-4})$$

où

$$\gamma'' = \gamma' - \beta_2^x. \quad (\text{III-3-5})$$

Compte tenu des équations ci dessus, les relations d'équilibre s'écrivent sous la forme matricielle $\vec{h}_D \cdot \vec{U} = \vec{0}$; \vec{h}_D est l'Hamiltonien associé au système découplé, dont l'expression matricielle est donnée en appendice I.

Selon la théorie des réponses d'interface, l'opérateur de couplage \vec{V}_I est défini par l'équation

$$\vec{V}_I = \vec{h}_C - \vec{h}_D. \quad (\text{III-3-6})$$

Conformément aux expressions des matrices \vec{h}_C et \vec{h}_D , l'opérateur de couplage \vec{V}_I s'écrit sous la forme matricielle ci dessous :

$$\vec{V}_I = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\beta_I}{m_1} & 0 & 0 \\ \frac{\beta_I}{m_1} & \frac{\beta_I}{m_1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\beta_{II}}{m_2} & \frac{\beta_{II}}{m_2} \\ 0 & 0 & \frac{\beta_{II}}{m_1} & -\frac{\beta_{II}}{m_1} \end{bmatrix} \begin{matrix} 0 \\ I' \\ L' \\ L \end{matrix}$$

III.4- Opérateur réponse d'interface

Pour le calcul de l'opérateur réponse d'interface associé à ce système, il est nécessaire de connaître les fonctions réponses associées aux milieux (I) et (II) découplés.

III.4.1- Fonction réponse associée au milieu (I)

L'équation du mouvement d'un atome (ℓ, n) appartenant au milieu (I) découplé du milieu (II) est,

$$\beta_1^x u_{\ell-1}(k_y) - \gamma u_{\ell}(k_y) + \beta_1^x u_{\ell+1}(k_y) = 0.$$

En écrivant l'équation ci dessus pour chaque atome, nous obtenons les relations d'équilibre sous la forme matricielle suivante :

$$\frac{1}{m_1} \begin{bmatrix} \beta_1^x & -\gamma & \beta_1^x & & \\ & \beta_1^x & -\gamma & \beta_1^x & \\ & & \beta_1^x & -\gamma & \beta_1^x \end{bmatrix} = \vec{0}. \quad (\text{III-4-1})$$

L'équation (III-4-1) peut s'écrire sous la forme $\vec{H}_{0i} \cdot \vec{U} = \vec{0}$, où \vec{H}_{0i} est l'opérateur Hamiltonien associé au milieu infini (I) et \vec{U} est un vecteur dont les composantes sont les déplacements $u_{\ell}(k_y)$ des atomes autour de leurs positions d'équilibre. \vec{H}_{0i} est une matrice tridiagonale dont l'inverse est la fonction réponse \vec{G}_{0i} du milieu infini (I).

$$\vec{H}_{0i} \cdot \vec{G}_{0i} = \vec{I}$$

ou encore

(III-4-2)

$$\sum_{\ell''} H_{0i}(\ell, \ell'') G_{0i}(\ell'', \ell) = \delta_{\ell\ell'}$$

$\delta_{\ell\ell'}$ est le symbole de Kronecker. Comme les interactions se limitent aux premiers voisins, ℓ'' ne peut prendre que les valeurs $\ell-1, \ell, \ell+1$. Par suite l'équation (III-4-2) devient ;

$$\frac{1}{m_1} \left\{ \beta_1^x G_{0i}(\ell-1, \ell) - \gamma G_{0i}(\ell, \ell) + \beta_1^x G_{0i}(\ell+1, \ell) \right\} = \delta_{\ell\ell'}. \quad (\text{III-4-3})$$

La résolution d'une telle équation donne [4]

$$G_{0i}(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell-\ell'+1|}}{\beta_1^x t_1^2 - 1}. \quad (\text{III-4-4})$$

En prenant $\ell = \ell'$ et en introduisant l'équation (III-4-4) dans l'équation (III-4-3), nous obtenons

$$t_1^2 - 2\xi_1(k_y, \omega)t_1 + 1 = 0, \quad (\text{III-4-5})$$

avec

$$\xi_1 = 1 + \frac{\beta_1^y}{\beta_1^x} [1 - \cos(k_y a)] - \frac{m_1 \omega^2}{2\beta_1^x}.$$

La résolution de cette équation du second degré donne,

$$t_1 = \begin{cases} \xi_1 - (\xi_1^2 - 1)^{\frac{1}{2}} & \text{pour } \xi_1 > 1, \\ \xi_1 + (\xi_1^2 - 1)^{\frac{1}{2}} & \text{pour } \xi_1 < 1, \\ \xi_1 + j(1 - \xi_1^2)^{\frac{1}{2}} & \text{pour } -1 < \xi_1 < 1. \end{cases} \quad (\text{III-4-6})$$

L'analyse de la nature de l'onde t_1 dans les domaines $\xi_1 > 1$, $\xi_1 < -1$, et $-1 < \xi_1 < 1$ nous permet de constater :

* L'existence d'une onde décroissante dans le domaine $\xi_1 > 1$, car

$$\text{pour } \xi_1 > 1 \quad ; \quad \xi_1 = ch(q_1) \\ t_1 = e^{-q_1}$$

* L'existence d'une onde décroissante dans le domaine $\xi_1 < -1$. En effet,

$$\text{pour } \xi_1 < -1 \quad ; \quad \xi_1 = -ch(q_1) \\ t_1 = -e^{-q_1}$$

* Et l'existence d'une onde progressive dans le domaine $-1 < \xi_1 < 1$, car

pour $-1 < \xi_1 < 1$, $\xi_1 = \cos(k_x)$
 $t_1 = e^{jk_x}$

En conclusion, il apparaît que t_1 est une onde progressive à l'intérieur de la bande de volume et décroissante à l'extérieur.

III.4.2- Fonction réponse et états propres associés au milieu (II)

Maintenant, nous considérons que le milieu (II) est découplé du milieu (I). Le milieu (II) est supposé constitué d'un nombre (L') limité de chaînes infinies d'atomes de masse m_2 , dont les interactions entre atomes premiers voisins suivant les axes (\vec{X}) et (\vec{Y}) sont respectivement β_2^x et β_2^y .

Pour $L'=5$, la configuration du système est la suivante :

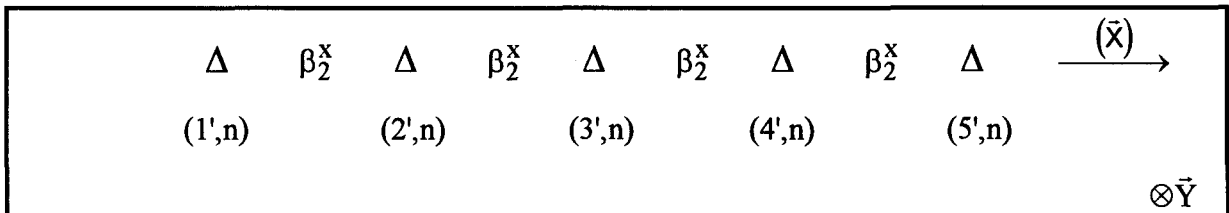


Figure III-2.

Il faut noter que chaque point de la figure ci-dessus représente une chaîne infinie le long de l'axe (\vec{Y}) . Le milieu (II) est obtenu par un clivage entre les atomes $(0',n)$ et (ℓ',n) et les atomes (L',n) $(L'+1,n)$. Compte tenu que les déplacements $u_{\ell',n}$ s'écrivent sous la forme $u_{\ell',n} = u_{\ell'} e^{i(nk_y a - \omega t)}$. Les équations des atomes $(1',n)$, (ℓ',n) avec $(1' < \ell' < L')$ et (L',n) s'écrivent respectivement :

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_2} \left[-\delta u_1(k_y) + \beta_2^x u_2(k_y) \right] &= 0, \\ \frac{1}{m_2} \left[\beta_2^x u_{\ell-1}(k_y) - (\delta + \beta_2^x) u_\ell(k_y) + \beta_2^x u_{\ell+1}(k_y) \right] &= 0, \\ \frac{1}{m_2} \left[\beta_2^x u_{L-1}(k_y) - \delta u_L(k_y) \right] &= 0, \end{aligned}$$

où

$$\delta = \beta_2^x + 2\beta_2^y \left[1 - \cos(k_y a) \right] - m_2 \omega^2.$$

L'expression de la matrice dynamique \tilde{h}_{0i} ainsi que celle de l'opérateur de clivage \tilde{V}_{0i} sont données en appendice I. Du fait que seuls les éléments matriciels $V_{0i}(\ell, \ell')$ correspondants aux atomes situés sur les sites $(\ell', n) = (0', n)$, (ℓ', n) , (L', n) , et $(L'+1, n)$ sont non nuls, l'opérateur réponse de surface associé au milieu (II) découplé est :

$$A_s(\ell, \ell') = -\frac{1}{t_2 - 1} \left(\delta_{\ell' 1} t_2^\ell + \delta_{\ell, L'} t_2^{L-\ell+1} \right). \quad (\text{III-4-7})$$

t_2 est définie de la même manière que t_1 :

$$t_2 = \begin{cases} \xi_2 - (\xi_2^2 - 1)^{\frac{1}{2}} & \text{pour } \xi_2 \gg 1, \\ \xi_2 + (\xi_2^2 - 1)^{\frac{1}{2}} & \text{pour } \xi_2 \ll 1, \\ \xi_1 + j \left(1 - \xi_{21}^2 \right)^{\frac{1}{2}} & \text{pour } -1 \ll \xi_2 \ll 1. \end{cases}$$

avec

$$\xi_2 = 1 + \frac{\beta_2^y}{\beta_2^x} \left[1 - \cos(k_y a) \right] - \frac{m_2 \omega^2}{2\beta_2^x}.$$

La fonction réponse associée au milieu (II) découplé est déterminée à partir de l'équation générale de la théorie des réponse d'interface

$$g_{s2}(\ell, \ell') = G_{02}(\ell, \ell') - \sum_{\ell''=0,1',L',L'+1} g_{s2}(\ell, \ell'') A_s(\ell'', \ell') \quad (\text{III-4-8})$$

Sachant que $\ell''=0, 1', L', L'+1$; l'équation ci dessus devient

$$g_{s2}(\ell, \ell) = G_{02}(\ell, \ell) - g_{s2}(\ell, 0)A_s(0, \ell) - g_{s2}(\ell, 1')A_s(1', \ell) - g_{s2}(\ell, L)A_s(L, \ell) - g_{s2}(\ell, L+1)A_s(L+1, \ell). \quad (\text{III-4-8'})$$

Vue l'expression matricielle donnée en appendice I, l'Hamiltonien \vec{h}_{0i} associé au milieu (II) découpé est formée de trois blocs matriciels diagonaux indépendants. La fonction réponse \vec{g}_{0i} sera également formée de trois blocs diagonaux indépendants.

$$\vec{g}_{0i} = \begin{bmatrix} \vec{g}_{s1} & \vec{0} & \vec{0} \\ \vec{0} & \vec{g}_{s2} & \vec{0} \\ \vec{0} & \vec{0} & \vec{g}_{s3} \end{bmatrix}. \quad (\text{III-4-9})$$

Par construction de la fonction réponse \vec{g}_{0i} , les éléments matriciels $g_{s2}(\ell, 0)$ et $g_{s2}(\ell, L+1)$ sont nuls pour $1' < \ell$ et $\ell' < L'$, par suite l'équation (III-4-8') se réduit à

$$g_{s2}(\ell, \ell) = G_{02}(\ell, \ell) - g_{s2}(\ell, 1')A_s(1', \ell) - g_{s2}(\ell, L)A_s(L, \ell). \quad (\text{III-4-10})$$

Ainsi, la détermination de la fonction réponse $g_{s2}(\ell, \ell)$ nécessite la connaissance de $g_{s2}(\ell, 1')$ et de $g_{s2}(\ell, L)$, raison pour laquelle nous donnons à ℓ' (équation III-4-10) successivement les valeurs ℓ' et L' .

Pour $\ell'=1'$ puis $\ell'=L'$ nous obtenons le système d'équation suivant :

$$\begin{bmatrix} 1 + A_s(1', 1') & A_s(1', L') \\ A_s(L', 1') & 1 + A_s(L', L') \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} g_{s2}(\ell, 1') \\ g_{s2}(\ell, L') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{s2}(\ell, 1') \\ G_{s2}(\ell, L') \end{bmatrix}. \quad (\text{III-4-11})$$

Les éléments $g_{s2}(\ell, 1')$ et $g_{s2}(\ell, L')$ sont obtenus par la résolution du système d'équations ci-dessus. En rapportant ces valeurs dans l'équation (III-4-10), nous obtenons finalement :

$$g_{s2}(\ell, \ell) = \frac{m_2}{\beta_2^x (t_2^2 - 1)} \left\{ t_2^{|\ell - \ell'| + 1} + t_2^{\ell + \ell'} + \frac{t_2^{2L'+1}}{(1 - t_2^{2L'})} \left[t_2^{\ell - \ell'} + t_2^{\ell' - \ell} + t_2^{1 - (\ell + \ell')} + t_2^{(\ell + \ell') - 1} \right] \right\}. \quad (\text{IV-4-12})$$

Se référant à une chaîne finie suivant l'axe (\vec{X}) , les états propres du milieu (II) découplé sont déterminés en résolvant l'équation suivante [30]

$$\det(\tilde{\Delta}(m, m)) = 0. \quad (\text{III-4-13})$$

Compte tenu de l'expression de la matrice $\tilde{\Delta}(m, m)$ donnée en appendice I et de l'expression $\xi_2(k_y, \omega)$, les états propres associées au milieu (II) découplés sont définis selon l'équation ci-dessous :

$$\omega^2 = \frac{2}{m_2} \left\{ \beta_2^x \left[1 - \cos\left(\frac{n\pi}{L'}\right) \right] + \beta_2^y \left[1 - \cos(k_y a) \right] \right\}, \quad (\text{III-4-14})$$

avec $n = 0, 1, \dots, L' - 1$.

Les détails de calcul des états propres du milieu (II) découplé sont donnés en appendice, alors que sur la figure (III-3) sont représentés ces états propres pour $m_2=1$, $L'=5$ et $\beta_2^x = \beta_2^y = 1$. La figure donne la dispersion (fréquence en fonction du vecteur d'onde réduit $k_y a$) de cinq branches associées aux états propres du milieu (II) dans la zone de Brillouin à une seule dimension. Les courbes tracées en traits continus représentent les extrémités inférieure et supérieure de la bande de volume du milieu (II) lorsqu'il est infini. L'extrémité inférieure dont l'équation est

$\omega^2 = \frac{2\beta_2^y}{m_2} \left[1 - \cos(k_y a) \right]$ est confondue avec la branche de plus basse fréquence, ce qui explique le fait que cette branche démarre à $k_y a = 0$ avec une fréquence nulle, l'extrémité supérieure de la bande de volume est régie par l'équation $\omega^2 = \frac{2}{m_2} \left\{ 2\beta_2^x + \beta_2^y \left[1 - \cos(k_y a) \right] \right\}$.

Les quatre autres modes se propagent à l'intérieur de la bande de volume caractérisée par les valeurs numériques ci-dessus.

Nous choisissons comme fonction de Green de référence la fonction \tilde{G}_s associée aux milieux (I) et (II) découplés et définie par :

$$\tilde{G}_s = \begin{bmatrix} \tilde{G}_{0i} & \vec{0} \\ \vec{0} & \tilde{g}_{s2} \end{bmatrix}. \quad (\text{III-4-15})$$

Une définition détaillée de la fonction de Green de référence \vec{G}_s est donnée appendice I. Compte tenu de la définition de \vec{G}_s , l'opérateur réponse d'interface est défini par :

$$\vec{A} = \vec{V}_I \cdot \vec{G}_s \quad (\text{III-4-16})$$

ou encore

$$A(\ell, \ell') = \sum_{\ell'' \in M} V_I(\ell, \ell'') G_s(\ell'', \ell').$$

Comme l'espace d'interface est formé par les sites $\ell''=0, 1', L'$ et L l'équation ci dessus se réduit à :

$$A(\ell, \ell') = V_I(\ell, 0) G_s(0, \ell') + V_I(\ell, 1') G_s(1', \ell') + V_I(\ell, L') G_s(L', \ell') + V_I(\ell, L) G_s(L, \ell'). \quad (\text{III-4-17})$$

Seuls les éléments $A(0, \ell')$, $A(1', \ell')$, $A(L', \ell')$ et $A(L, \ell')$ de l'opérateur réponse d'interface sont non nuls.

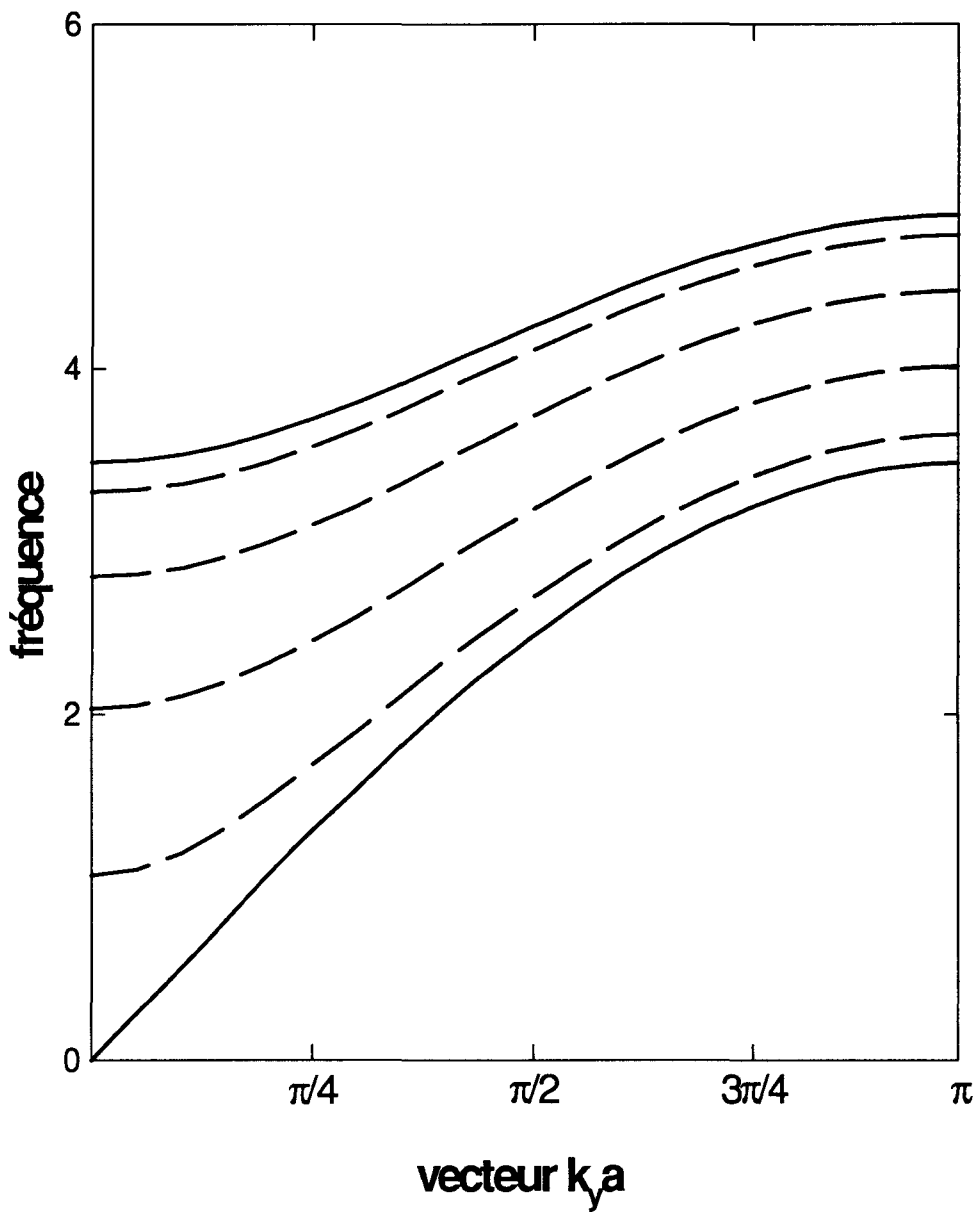


Figure III-3 : Etats propres du milieu (II) à cinq chaînes infinies découplé du milieu (I).

Nous constatons l'existence de cinq branches de phonons associées aux états propres du milieu (II) dans la zone de brillouin à une dimension.

$$L' = 5, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } m_2 = 1.$$

III.5- Détermination des modes localisés et des vecteurs propres correspondants

III.5.1- Détermination des états vibrationnels localisés

La connaissance des fonctions réponses du système décrit (voir appendice I) antérieurement permet d'analyser toutes ses propriétés vibrationnelles qui peuvent être étudiées à l'aide du modèle de Montroll-Potts [31]. Les fonctions réponses montrent l'apparition de nouveaux états vibrationnels dans le système greffé appelés " états localisés ". Ces nouveaux états sont les valeurs de la fréquence ω pour lesquelles le déterminant $W(k_y, \omega)$ de la matrice $\tilde{\Delta}(m, m')$ est nul en dehors de la bande de volume du milieu (I) (la matrice $\tilde{\Delta}(m, m')$ et son déterminant $W(k_y, \omega)$ sont définis dans la paragraphe I-6 de l'appendice I).

Nous devons exclure les extrémités de la bande de volume du milieu (II) pour lesquelles $t_2 \neq \mp 1$, car pour ces valeurs de t_2 , le numérateur de la fonction réponse s'annule aussi. Ainsi, les états vibrationnels localisés du système greffé sont définis par :

$$W(k_y, \omega) = 0 \text{ avec } t_2 \neq \pm 1, \quad (\text{III-5-1})$$

c'est à dire

$$\left\{ 1 - \beta_I \left[\frac{1}{\beta_1^x} \frac{t_1}{t_1^2 - 1} + \frac{1}{\beta_2^x} \frac{t_2 + t_2^{2L'}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \right] \right\} \left\{ 1 - \beta_{II} \left[\frac{1}{\beta_1^x} \frac{t_1}{t_1^2 - 1} + \frac{1}{\beta_2^x} \frac{t_2 + t_2^{2L'}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \right] \right\} - \beta_I \beta_{II} \left[\frac{1}{\beta_1^x} \frac{t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1} + \frac{1}{\beta_2^x} \frac{t_2^{2L'} + t_2^{2L'+1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \right]^2 = 0,$$

avec

$$t_2 \neq \mp 1.$$

En définissant une variable q_2 telle que $t_2 = e^{q_2}$, l'équation ci dessus devient

$$\left\{ 1 - \beta_I \left[\frac{1}{\beta_I^x} \frac{t_1}{t_1^2 - 1} + \frac{1}{\beta_2^x} \left\{ \coth(q_2 L') \coth\left(\frac{q_2}{2}\right) - 1 \right\} \right] \right\} \left\{ 1 - \beta_{II} \left[\frac{1}{\beta_I^x} \frac{t_1}{t_1^2 - 1} + \frac{1}{\beta_2^x} \left\{ \coth(q_2 L') \coth\left(\frac{q_2}{2}\right) - 1 \right\} \right] \right\} - \beta_I \beta_{II} \left[\frac{1}{\beta_I^x} \frac{t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1} - \frac{1}{\beta_2^x} \frac{\coth\left(\frac{q_2}{2}\right)}{\text{sh}(q_2 L')} \right]^2 = 0,$$

avec $q_2 \neq 0$ et $q_2 = j\pi$. En prenant $\beta_I = \beta_{II} = \beta$ et $\beta_1^x = \beta_2^x = \beta^x$, l'équation ci dessus devient:

$$(A - B)(A + B) = 0$$

où

$$A = 1 - \frac{\beta}{\beta^x} \left[\frac{t_1}{t_1^2 - 1} - \coth(q_2 L') \coth\left(\frac{q_2}{2}\right) + 1 \right]$$

et

$$B = \frac{\beta}{\beta^x} \left[\frac{t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1} - \frac{\coth\left(\frac{q_2}{2}\right)}{\text{sh}(q_2 L')} \right].$$

Ce qui nous permet d'écrire :

$$1 - \frac{\beta}{\beta^x} \left[\frac{t_1 - t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1} \right] = \frac{\beta}{\beta^x} \left[\frac{\coth\left(\frac{q_2}{2}\right)}{\text{sh}(q_2 L')} - \coth(q_2 L') \coth\left(\frac{q_2}{2}\right) \right]$$

et

$$1 - \frac{\beta}{\beta^x} \left[\frac{t_1 - t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1} \right] = -\frac{\beta}{\beta^x} \left[\frac{\coth\left(\frac{q_2}{2}\right)}{\text{sh}(q_2 L')} - \coth(q_2 L') \coth\left(\frac{q_2}{2}\right) \right].$$

A l'aide de calcul numérique nous avons étudié l'existence des états vibrationnels localisés pour le système considéré. Compte tenu de l'équation (III-5-1), le résultat est représenté par des courbes (figure III-4) donnant les relations de dispersion des phonons pour le système greffé.

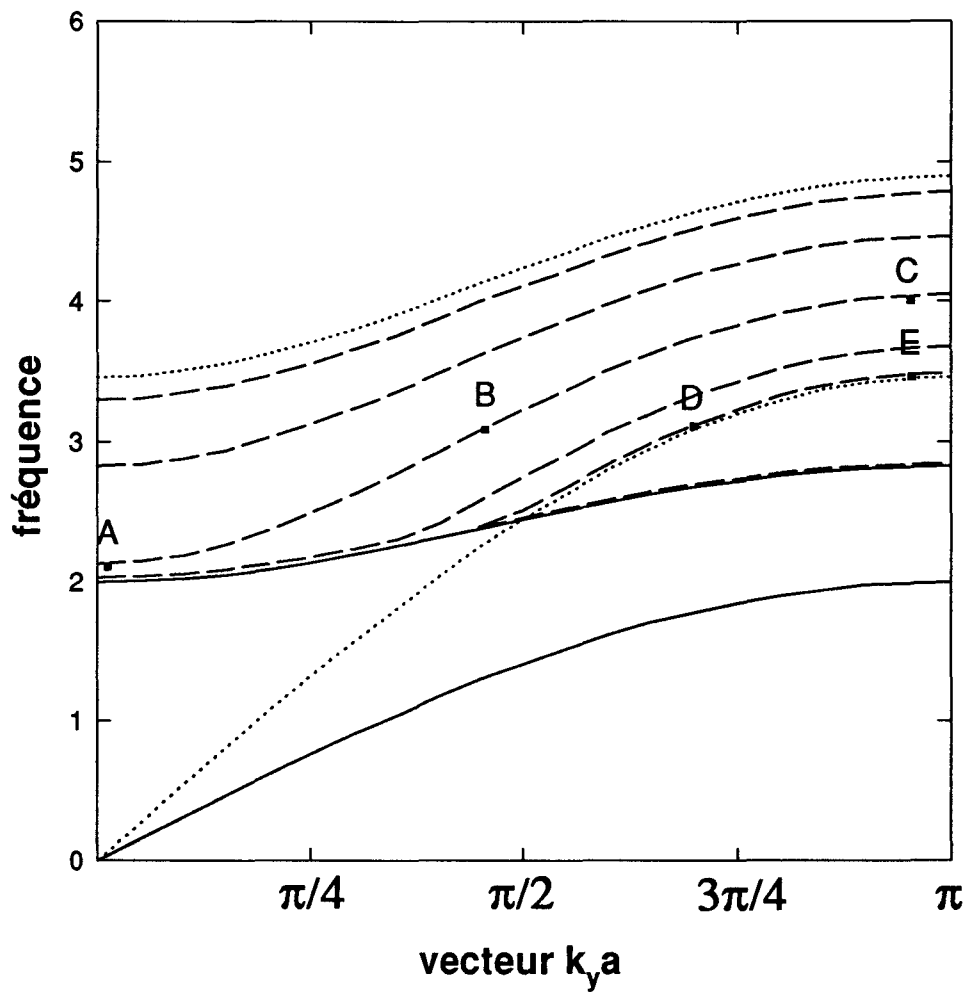


Figure III-4 : Courbes de dispersion des phonons localisés dans la zone de Brillouin à une dimensions pour le système greffé.

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1., \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

Les courbes en traits continus représentent les extrémités supérieure et inférieure de la bande de volume du milieu (I) considéré comme substrat. Les courbes en pointillé représentent les bornes supérieure et inférieure de la bande de volume du milieu (II) lorsqu'il est découplé et infini. Les courbes en traits discontinus représentent les états vibrationnels localisés dans le système greffé. Nous constatons l'existence de six branches localisées dont cinq sont confinées dans le système adsorbé et situées juste au dessus de la bande de volume du substrat alors que la sixième est situé juste au dessus de la limite supérieure de la bande de volume du substrat. Nous remarquons aussi que les deux branches les plus basses de phonons localisés n'apparaissent qu'à partir de $k_y a = 1.26$. En comparant la figure (III-3) représentant les états propres du milieu (II) découplé (milieu à cinq chaînes infinie, $L=5$) et la figure (III-4) représentant les modes localisés pour le système étudié, nous constatons que le couplage entre le milieu (II) et le substrat a conduit à l'apparition d'un état vibrationnel localisé juste au dessus de l'extrémité supérieure de la bande de volume du substrat et ne commençant qu'à partir de $k_y a = 1.26$. Cet état apparaît à l'extérieur des bandes de volume des deux matériaux qui forment le système composite, c'est un mode qui ne peut se propager qu'à l'interface entre les deux matériaux, son apparition est due à l'interaction entre les deux systèmes. La fréquence de ce mode dépend essentiellement des paramètres β_i^x , β_i^y , m_i , β_I et β_{II} . Nous remarquons aussi un déplacement des cinq états propres par rapport à leurs valeurs pour le milieu (II) découplé. Il faut également noter que le mode de plus basse fréquence à l'intérieur de la bande de volume du milieu (II) commence à partir de $k_y a = 1.26$.

III.5.2- Calcul des vecteurs propres associés aux états vibrationnels localisés

Pour le calcul des vecteurs propres associés aux modes localisés, nous avons procédé ainsi :

Soit \vec{H} la matrice dynamique associée au système composite étudié; si $\langle u |$ est un vecteur propre gauche de \vec{H} , il vérifie l'équation [32]

$$\langle u | \cdot \vec{H} = \vec{0} \quad (III-5-1)$$

Sachant que l'opérateur \vec{H} est la somme de la matrice dynamique \vec{H}_0 associé aux milieux (I) et (II) découplés et de l'opérateur de couplage \vec{V}_I , l'équation (III-5-1) devient :

$$\langle u | \cdot (\vec{H}_0 + \vec{V}_I) = \vec{0}. \quad (\text{III-5-2})$$

En multipliant l'équation ci dessus par la fonction réponse \vec{G}_s (fonction non singulière), nous obtenons :

$$\langle u | \cdot (\vec{H}_0 + \vec{V}_I) \cdot \vec{G}_s = \vec{0}. \quad (\text{III-5-3})$$

Compte tenu que $\vec{H}_0 \cdot \vec{G}_s = \vec{I}$, $\vec{A} = \vec{V}_I \cdot \vec{G}_s$ et que $\vec{\Delta}(M, M) = \vec{I} + \vec{A}(M, M)$, l'équation (III-5-3) devient :

$$\langle u(D) | = -\langle u(M) | \cdot \vec{A}(MD). \quad (\text{III-5-4})$$

Ainsi la détermination du vecteur $\langle u(D) |$ nécessite la connaissance du vecteur d'interface $\langle u(M) |$, raison pour laquelle nous prenons dans l'équation (III-5-4), $D \equiv M$.

En effet, en prenant $D \equiv M$ nous aurons :

$$\langle u(M) | \cdot \vec{\Delta}(MM) = \vec{0}. \quad (\text{III-5-5})$$

Ceci veut dire que $\langle u(M) |$ est un vecteur propre gauche de la matrice $\vec{\Delta}(MM)$ associé à la valeur propre annulant $\vec{\Delta}(MM)$. Par suite, la détermination du vecteur $\langle u(M) |$ exige la diagonalisation de la matrice $\vec{\Delta}(MM)$ et la recherche du vecteur propre associé à cette valeur propre. Connaissant le vecteur propre $\langle u(M) |$ et en tenant compte de l'expression de l'opérateur d'interface donnée en appendice I et de l'équation (III-5-4), la ℓ ième composante du vecteur associé à un mode localisé s'écrit :

$$a_\ell = -[a_0 A(0, \ell) + a_1 A(1', \ell) + a_{L'} A(L', \ell) + a_L A(L, \ell)] \quad (\text{III-5-6})$$

où

$$\langle u(M) | = (a_0, a_1, a_{L'}, a_L).$$

Les points A, B, C qui apparaissent sur la figure (III-4) représentent trois modes localisés de fréquences distinctes appartenant à une même branche. Nous constatons que lorsque le mode est symétrique pour A (voir figure III-5-A), il en est de même pour les modes B et C et que pour cette branche le mode est localisé dans le milieu (II) greffé (voir figures III-5-B et III-5-C). Les points D et E représentent aussi deux modes localisés pour deux fréquences différentes à proximité de la bande de volume du substrat, nous constatons aussi qu'une fois le mode est symétrique pour D, il en est de même pour E (voir figures III-6-D et III-6-E).

III.6- Phonons résonants dans le système greffé

** Conservation du nombre d'états*

Avant de parler des modes résonants prolongement des modes localisés, nous allons vérifier la conservation du nombre d'états, en partant d'un système dont le nombre de degrés de liberté est le même que celui du système greffé. Pour vérifier cette propriété, nous allons étudier la variation de l'argument du déterminant de la matrice $\tilde{\Delta}(MM)$ en fonction de la fréquence respectivement pour trois valeurs du vecteur d'onde réduit $k_y a = 0$, $k_y a = 0.94$ et $k_y a = \pi$.

En regardant les courbes (III-7, III-8, et III-9) nous constatons l'existence sur ces courbes de chutes verticales de 0 à $-\pi$ de la valeur de l'argument de la matrice $\tilde{\Delta}(MM)$ et de montées verticales de $-\pi$ à 0. La chute correspond à la perte d'un état propre du système découplé, alors que la montée montre le gain d'un nouveau état, qui est un état localisé pour le système greffé. Notons que pour les trois valeurs de $k_y a$, nous avons obtenu une conservation du nombre d'états

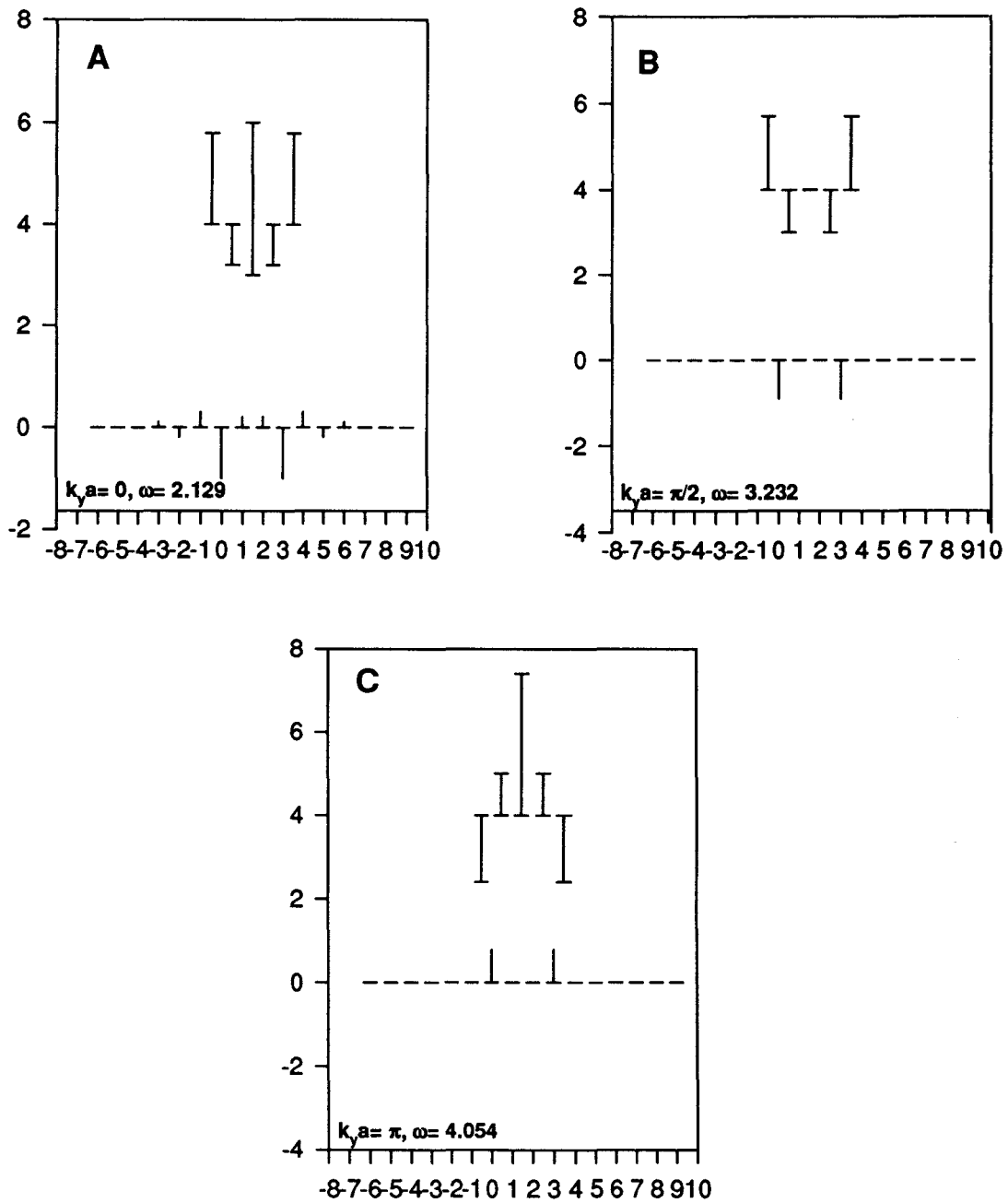


Figure III-5 : Représentation des vecteurs propres pour trois fréquences associées à une branche de phonons localisés en fonction de quelques valeurs de l indice des atomes du milieu (I) et de celle de l' indice des atomes du milieu (II).

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3, \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

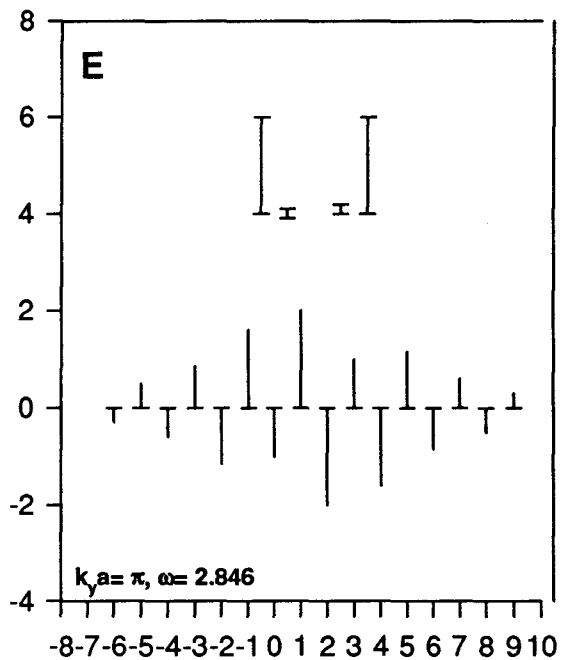
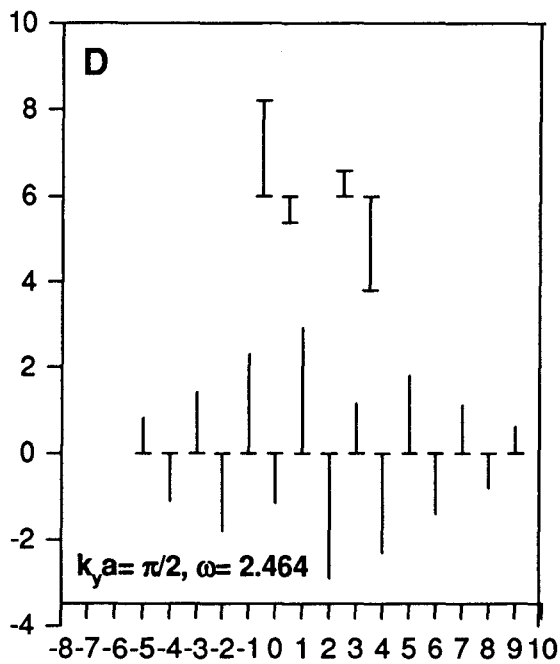


Figure III-6 : Représentation des vecteurs propres pour deux fréquences associées à une branche de phonons localisés en fonction de quelques valeurs de ℓ indice des atomes du milieu (I) et de celle de ℓ' indice des atomes du milieu (II).

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3, \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

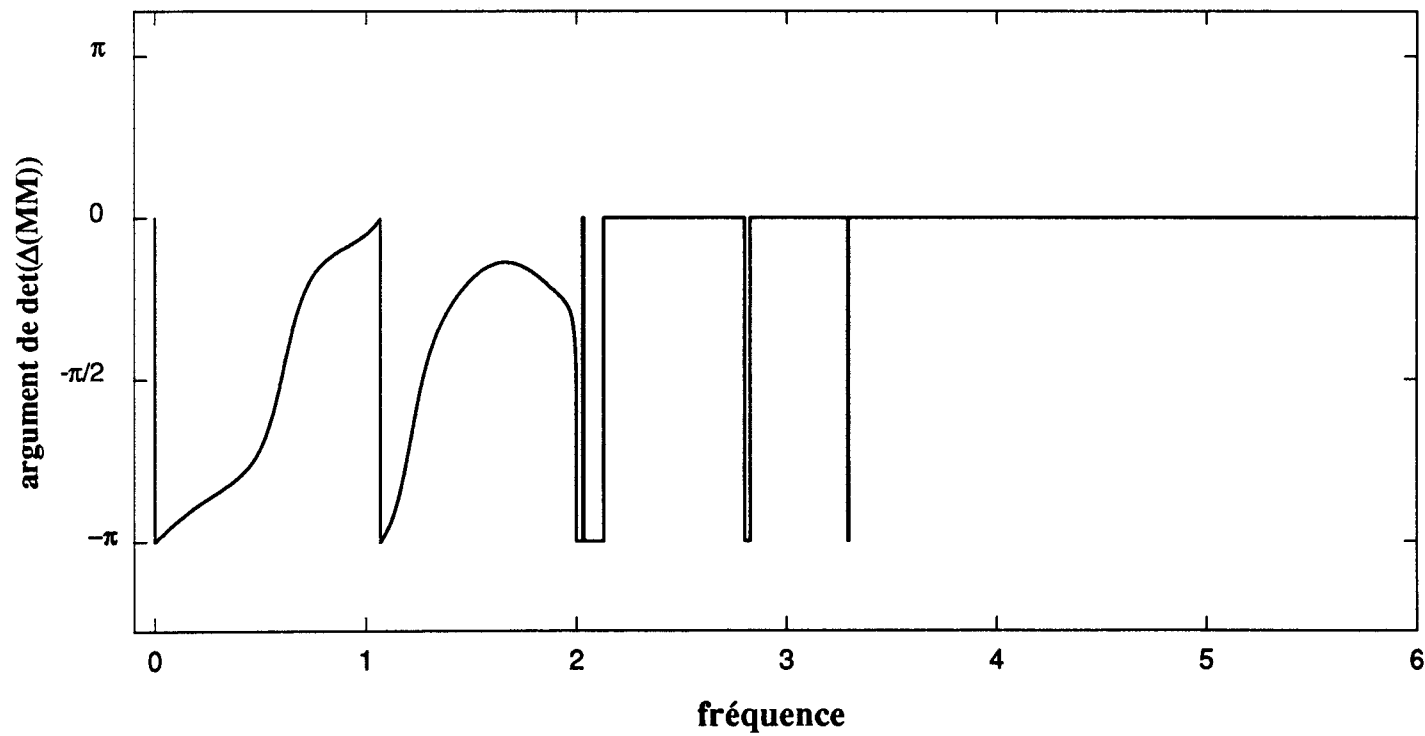


Figure III-7 : Variation de l'argument du déterminant de la matrice $\Delta(mm)$ en fonction de la fréquence de vibration à l'intérieur de la bande de volume du substrat pour $k_y a = 0$.

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

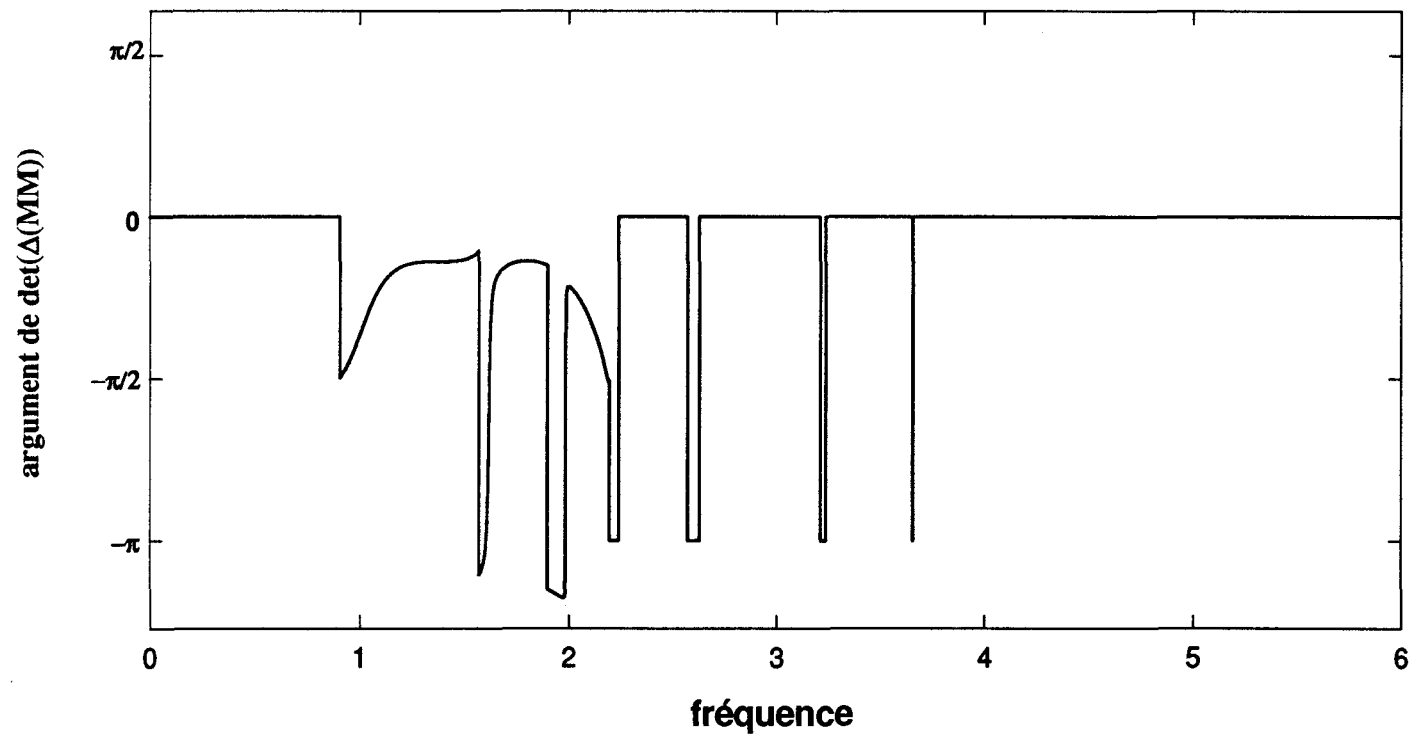


Figure III-8 : Variation de l'argument du déterminant de la matrice $\Delta(mm)$ en fonction de la fréquence de vibration à l'intérieur de la bande de volume du substrat pour $k_y a = 0.96$.

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

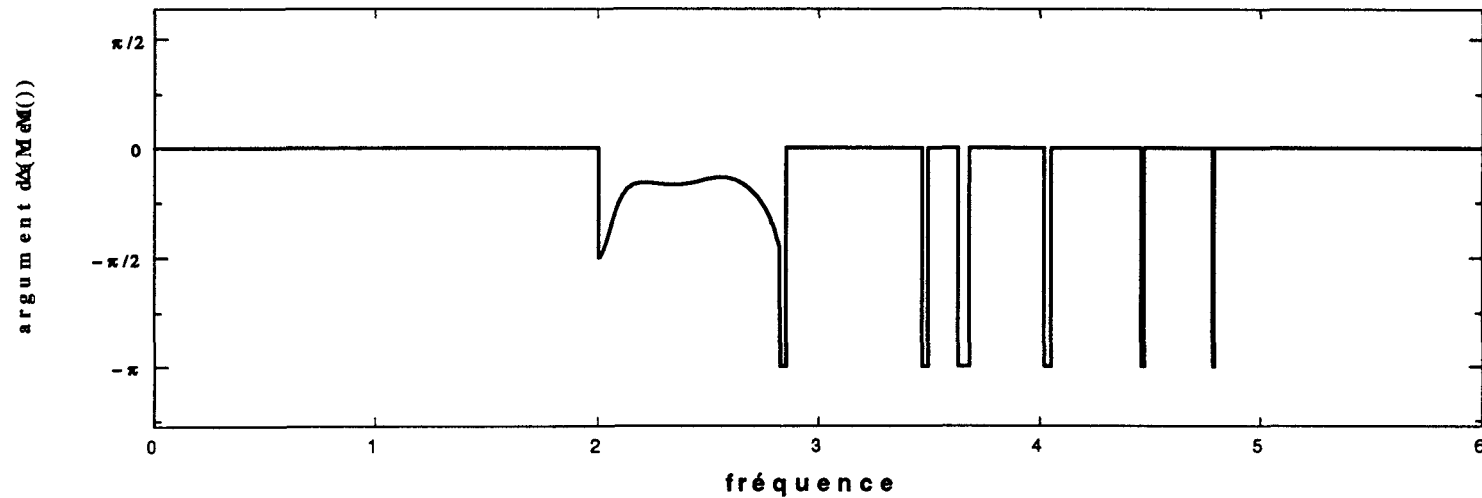


Figure III-9 : Variation du déterminant de la matrice $\Delta(mm)$ en fonction de la fréquence de vibration à l'intérieur de la bande de volume du substrat pour $k_y a = \pi$.

$$l = 3, L' = 5, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

* Phonons résonants :

Nous avons vu que le couplage entre les milieux (I) et (II) a conduit à l'apparition d'un état localisé tout près de l'extrémité supérieure de la bande de volume du substrat et que cet état ainsi que le plus poche de la bande de volume de l'adsorbant n'apparaissent qu'à partir de $k_y a = 1.26$. Les quatre autres branches correspondant à des modes localisés dans l'adsorbant s'étalent sur toute la longueur de la zone de Brillouin. A l'extérieur de la bande de volume du substrat et pour $k_y a \geq 1.26$, les deux derniers modes de plus basses fréquences représentent des états localisés, mais lorsqu'il y pénètrent $k_y a \leq 1.26$, ils deviennent des modes résonants.

Ainsi, selon la figure (III-10) les deux branches qui apparaissent à l'intérieur des bandes de volume des deux milieux représentent deux modes résonants qui sont des prolongements des modes localisés existant à l'intérieur de la bande de volume milieu II. cette figure présente une autre branche résonante assez proche de la limite inférieure de la bande de volume du substrat. Dans le but d'étudier si ces résonances présentent des caractéristiques bien définies, nous avons calculé la variation de la densité d'états correspondante définie par [24,30] :

$$\Delta n(k_y, \omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \text{Im Ln}\{W(k_y, \omega)\}.$$

Pour les calculs numériques appliquées à notre système nous avons pris $\beta_1^x = \beta_1^y = 1$, $\beta_2^x = \beta_2^y = 3$, $\beta_I = \beta_{II} = 0.5$, et $m_1 = m_2 = 1$. Les figures (III-11) et (III-12) représentent respectivement la variation de la densité d'états en fonction de la fréquence pour $k_y a = 0.79$ et $k_y a = 1.10$. Pour les deux figures la variation de la densité d'états entre le système greffé et le système pris comme référence présente trois pics qui correspondent à des modes résonants. La première résonance présente un pic d'intensité assez faible et de largeur à mi hauteur assez importante, alors que les deux autres possèdent des pics d'intensité très importante et sont très aigus. Notons aussi que la largeur de ces pics ainsi que leurs intensités dépendent essentiellement du couplage entre les deux sous-systèmes, qui forment le système

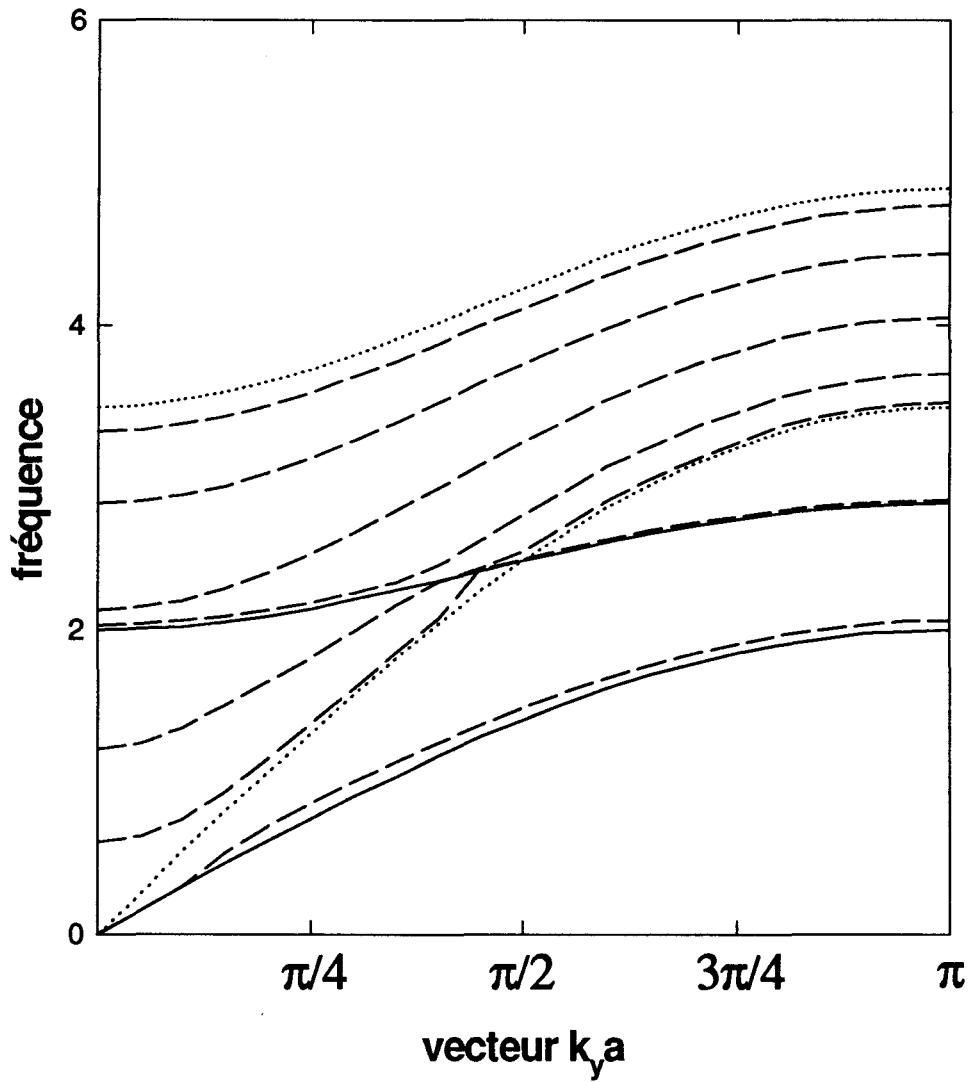


Figure III-10 : Modes localisés et résonants pour le système greffé à cinq chaînes infinies à l'intérieur de la zone de Brillouin à une dimension.

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

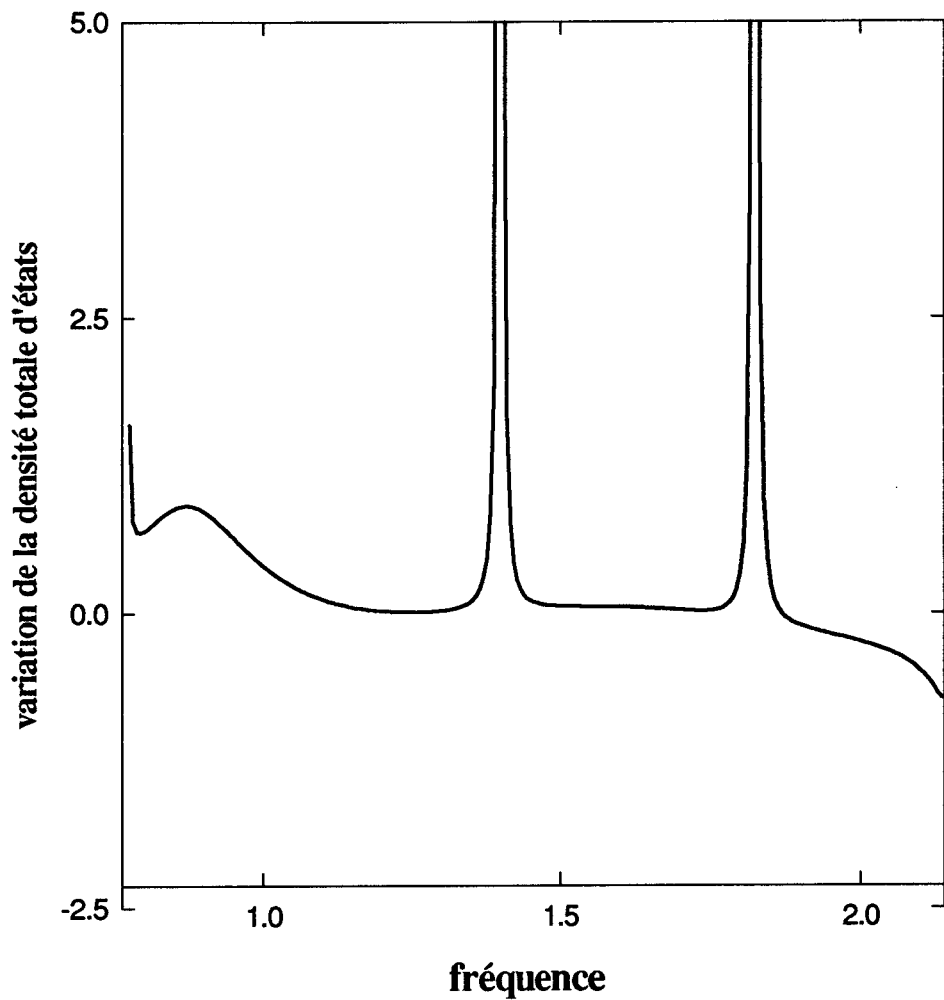


Figure III-11 :Variation de la densité d'états totale en fonction des fréquences de vibration à l'intérieur de la bande de volume du substrat pour $k_y a = 0.79$ dans le cas d'un système greffé à cinq chaînes infinies.

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

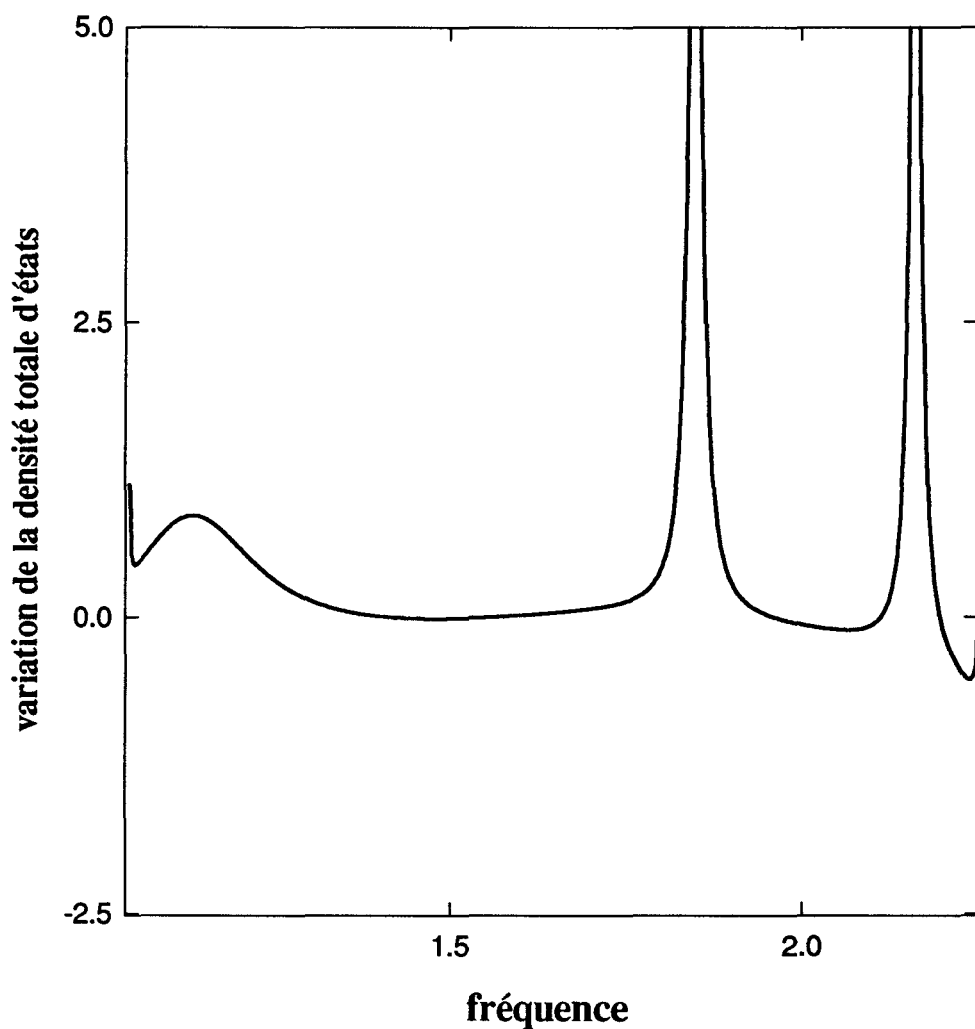


Fig III-12 : Variation de la densité d'états totale en fonction des fréquences de vibration à l'intérieur de la bande de volume du substrat pour $k_y a = 1.10$ dans le cas d'un système greffé à cinq chaînes infinies.

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

composite, plus que β_I et β_{II} prennent des valeurs importantes, plus les résonances deviennent faibles en intensité et moins localisées (largeur du pic plus importante). La résonance de plus basse fréquence n'est pas la continuation d'un mode localisé, elle apparaît à partir de $k_y a = 0.37$ jusqu'à $k_y a = \pi$ et reste à une différence ($\Delta \omega = 0.1$) constante de la limite inférieure de la bande de volume.

III.7- Calcul des coefficients de transmission et de réflexion [11,16,17]

Pour le calcul des coefficients de transmission et de réflexion nous avons eu recours l'équation (II-2-21). Lorsque nous considérons une onde plane $\langle U(D) | = t_1^\ell$ se propageant dans le milieu (I) (cette onde de référence n'a pas de composante dans le milieu (II)), les indices ℓ et ℓ' des éléments matriciels $A(\ell, \ell')$ de l'opérateur réponse d'interface seront tels que ℓ appartienne à l'espace des interfaces et ℓ' au milieu (I);

$$\vec{A}(MD) = \begin{bmatrix} A(0, \ell) \\ A(1, \ell) \\ A(L, \ell) \\ A(L, \ell) \end{bmatrix},$$

Le vecteur de référence est $\langle U(M) | = (1, 0, 0, t_1^L)$. En se plaçant dans le milieu (I), il faut envisager les cas suivants :

$$\ell' \leq 0 \quad , \quad 0 \leq \ell' \leq L \quad \text{et} \quad \ell' \geq L.$$

En effet,

* dans la région I du milieu (I) $\ell' \leq 0$,

$$\vec{A}(MD) = \frac{m_1}{\beta_1^x} \frac{t_1^{1-\ell}}{t_1^2 - 1} \begin{bmatrix} -\frac{\beta_I}{m_1} \\ \frac{\beta_I}{m_2} \\ \frac{\beta_{II}}{m_2} t_1^L \\ -\frac{\beta_{II}}{m_2} t_1^L \end{bmatrix},$$

* dans la région II du milieu I $0 \leq \ell' \leq L$,

$$\vec{A}(MD) = \frac{m_1}{\beta_1^x} \frac{t_1}{t_1^2 - 1} \begin{bmatrix} -\frac{\beta_I}{m_1} t_1^{1+\ell} \\ \frac{\beta_I}{m_2} t_1^{1+\ell} \\ \frac{\beta_{II}}{m_2} t_1^{L-\ell+1} \\ -\frac{\beta_{II}}{m_2} t_1^{L-\ell+1} \end{bmatrix},$$

* dans la région III du milieu (I) $\ell' \geq L$,

$$\vec{A}(MD) = \frac{m_1}{\beta_1^x} \frac{t_1^{1+\ell}}{t_1^2 - 1} \begin{bmatrix} -\frac{\beta_I}{m_1} \\ \frac{\beta_I}{m_2} \\ \frac{\beta_{II}}{m_2} t_1^{-L} \\ -\frac{\beta_{II}}{m_2} t_1^{-L} \end{bmatrix}.$$

Sachant que :

$$\langle \mathbf{u}(M) \rangle \cdot \vec{\Delta}^{-1}(MM) = [\Delta^{-1}(0,0) + t_1^L \Delta^{-1}(L,0), \Delta^{-1}(0,1) + t_1^L \Delta^{-1}(L,1), \Delta^{-1}(0,L) + t_1^L \Delta^{-1}(L,L), \Delta^{-1}(0,L) + t_1^L \Delta^{-1}(L,L)].$$

Tenons compte de ceci, nous trouvons que:

* dans la région I, le vecteur déplacement est

$$u_{\ell'}^I(t_1) = \{1 + R_I(\omega)\} t_1^{\ell'}, \quad (\text{III-9-1})$$

avec

$$R_I(\omega) = -\frac{1}{\beta_1^x W t_1^2 - 1} \left\{ \beta_I \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^L (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} \left[(1 - A_1 - B_1) t_1^L + (C_1 + D_1) \right] \right\}.$$

$R_I(\omega)$ est le coefficient de réflexion dans la région I du milieu (I), $A_1, A_2, B_1, B_2, C_1, C_2, D_1, D_2$ et W sont respectivement définis selon les expressions ci dessous.

$$A_1 = \frac{\beta_I}{\beta_1^x} \frac{t_1}{t_1^2 - 1}, \quad A_2 = \frac{\beta_{II}}{\beta_1^x} \frac{t_1}{t_1^2 - 1}, \quad B_1 = \frac{\beta_I}{\beta_2^x} \frac{t_2 + t_2^{2L'}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})}, \quad B_2 = \frac{\beta_{II}}{\beta_2^x} \frac{t_2 + t_2^{2L'}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})},$$

$$C_1 = \frac{\beta_I}{\beta_1^x} \frac{t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1}, \quad C_2 = \frac{\beta_{II}}{\beta_1^x} \frac{t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1}, \quad D_1 = \frac{\beta_I}{\beta_2^x} \frac{t_2^{2L} + t_2^{2L'+1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})}, \quad D_2 = \frac{\beta_{II}}{\beta_2^x} \frac{t_2^{2L} + t_2^{2L'+1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})},$$

et

$$W = (1 - A_1 - B_1)(1 - A_2 - B_2) - (C_1 + D_1)(C_2 + D_2).$$

* dans la région II du milieu (II) le vecteur déplacement s'écrit :

$$u_{\ell}^{II}(t_1) = B_t t_1^{\ell} + B_r t_1^{-\ell}, \quad (\text{III-9-2})$$

Avec,

$$B_t = \left\{ 1 + \frac{\beta_I}{\beta_1^x \cdot W} \cdot \frac{t_1}{t_1^2 - 1} \cdot \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^L \cdot (C_2 + D_2) \right] \right\}$$

et

$$B_r = \frac{\beta_I}{\beta_1^x \cdot W} \cdot \frac{t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1} \cdot \left[(C_1 + D_1) + t_1^L \cdot (1 - A_1 - B_1) \right].$$

* Alors que dans la région III du milieu (I), le vecteur déplacement se met sous l'expression ci dessous :

$$u_n^{III}(t_1) = T_{III}(\omega) t_1^{\ell}, \quad (\text{III-9-3})$$

Avec,

$$T_{III}(\omega) = 1 + \frac{1}{\beta_1^x W} \frac{t_1}{t_1^2 - 1} \left\{ \beta_I \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^L (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} \left[(1 - A_1 - B_1) t_1^L + (C_1 + D_1) \right] \right\}.$$

$T_{III}(\omega)$ est le coefficient de transmission dans la région III du milieu (I).

Lorsque l'onde se propage dans le volume du milieu (II), les indices ℓ et ℓ' des éléments matriciels $A(n, n')$ sont tels que n appartient à l'espace des interfaces ($\ell = 0, 1', L', L$) et ℓ' au milieu (II). $\langle U(M) | = (1, 0, 0, t_1^L)$ est le vecteur de référence. Le vecteur déplacement $u_{\ell}^{D_2}(t_2)$ est déterminé à partir de l'équation (II-2-21). Compte tenu de l'expression de $\langle U(M) | \cdot \tilde{\Delta}^{-1}(MM)$, et que

$$\tilde{A}(MD) = \begin{bmatrix} \frac{\beta_I}{m_1} g_{s2}(1', \ell') \\ -\frac{\beta_I}{m_2} g_{s2}(1', \ell') \\ -\frac{\beta_{II}}{m_2} g_{s2}(L', \ell') \\ \frac{\beta_{II}}{m_2} g_{s2}(L', \ell') \end{bmatrix}.$$

Le vecteur déplacement $u_{\ell}^{D_2}(t_2)$ s'écrit dans le milieu (II) par :

$$u_{\ell}^{D_2}(t_2) = D_t(\omega) t_2^{\ell} + D_r(\omega) t_2^{-\ell}, \quad (\text{III-9-4})$$

avec,

$$D_t(\omega) = -\frac{1}{\beta_2^x W} \frac{m_2}{m_1} \frac{1}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L})} \left\{ \beta_I \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^L (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} \left[(1 - A_1 - B_1) t_1^L + (C_2 + D_2) \right] t_2^L \right\}$$

et

$$D_r(\omega) = -\frac{1}{\beta_2^x W} \frac{m_2}{m_1} \frac{t_2^{L+1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L})} \left\{ \beta_I \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^L (C_2 + D_2) \right] t_2^L + \beta_{II} \left[(1 - A_1 - B_1) t_1^L + (C_2 + D_2) \right] \right\}.$$

En introduisant une nouvelle variable $t_2 = e^{q_2}$, le vecteur déplacement des atomes dans le milieu (II) s'écrit :

$$u_{\ell}^{D_2} = \frac{m_2}{m_1} \frac{1}{\beta_2^x w} \left\{ \begin{array}{l} \beta_I \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^L (C_2 + D_2) \right] chq_2 \left(L' - \ell' + \frac{1}{2} \right) + \\ \beta_{II} \left[(1 - A_1 - B_1) t_1^L + (C_1 + D_1) \right] chq_2 \left(\ell' - \frac{1}{2} \right) \end{array} \right\} \times \frac{1}{2sh\left(\frac{q_2}{2}\right)sh(q_2 L')}.$$

Les courbes (III-13) et (III-14) représentent respectivement les variations du carré des modules des coefficients de réflexion dans la région I et du transmission dans la région III à l'intérieur de la bande de volume du substrat. Nous constatons que pour la première résonance les courbes ne présentent aucune caractéristiques remarquable, alors que pour les autres modes résonants qui sont des continuations des modes localisés à l'intérieur de la bande de volume du substrat, nous remarquons que le coefficient de réflexion dans la région I est maximal (égal à l'unité), alors que la transmission dans la région III est nulle. Les deux modes résonants qui sont placés à l'intérieur de la bande de volume du milieu greffé présentent un obstacle qui empêche la propagation de la vibration des atomes de la zone I du milieu (I) vers la zone III du même milieu.

Pour les atomes situés dans la région II du milieu (I) et ceux placés dans le milieu greffé, nous avons calculé le carré du module des vecteurs déplacement aux fréquences de résonance ainsi que la densité locale $d_{\ell}(\omega)$ définie par $d_{\ell}(\omega) = -\frac{1}{\pi} Im[g(\ell, \ell)]$, où $g(\ell, \ell)$ est un élément de la diagonale de la fonction réponse), aux fréquences correspondant aux zéros du coefficient de réflexion dans la zone I pour $k_1 a = 1.10$ (figures III-15, III-16).

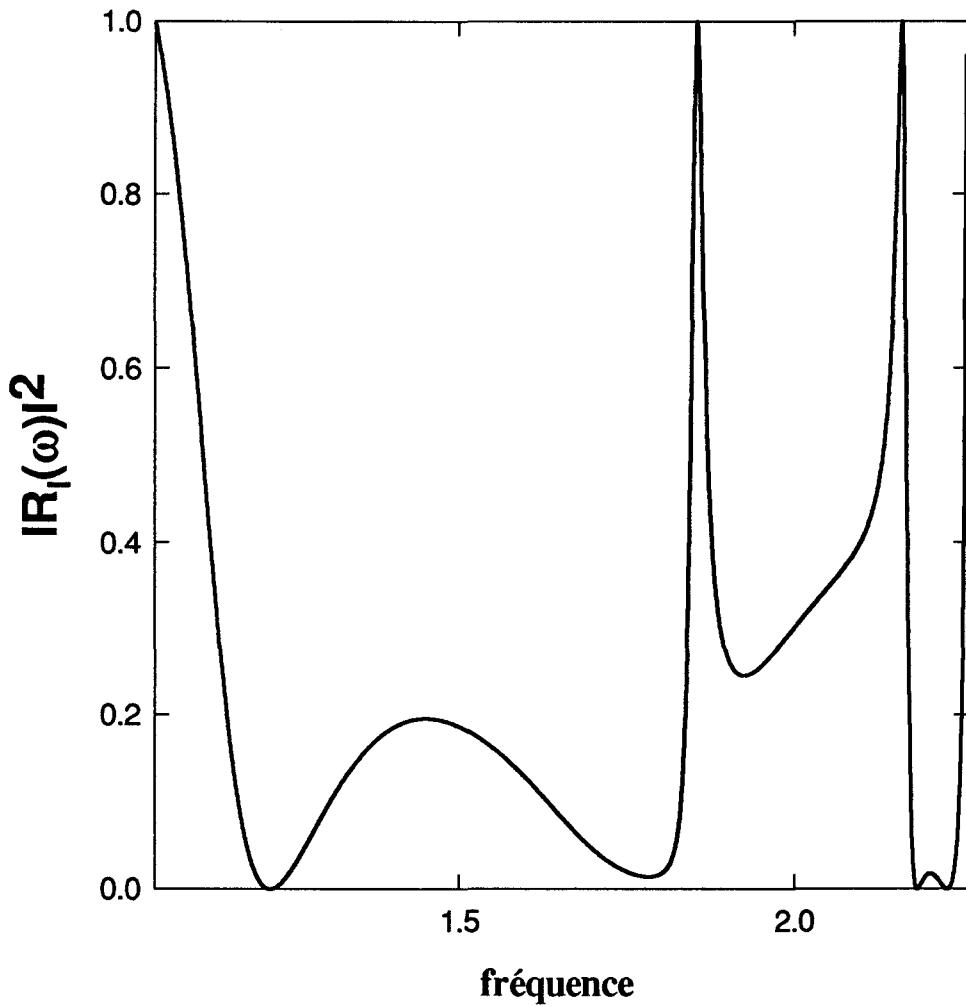


Fig III-13 : Variation du carré du module du coefficient de reflexion en fonction des fréquences de vibration dans la région III à l'intérieur de la bande de volume du substrat pour $k_y a = 1.10$.

$$L = 3, L' = 5, m_I = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

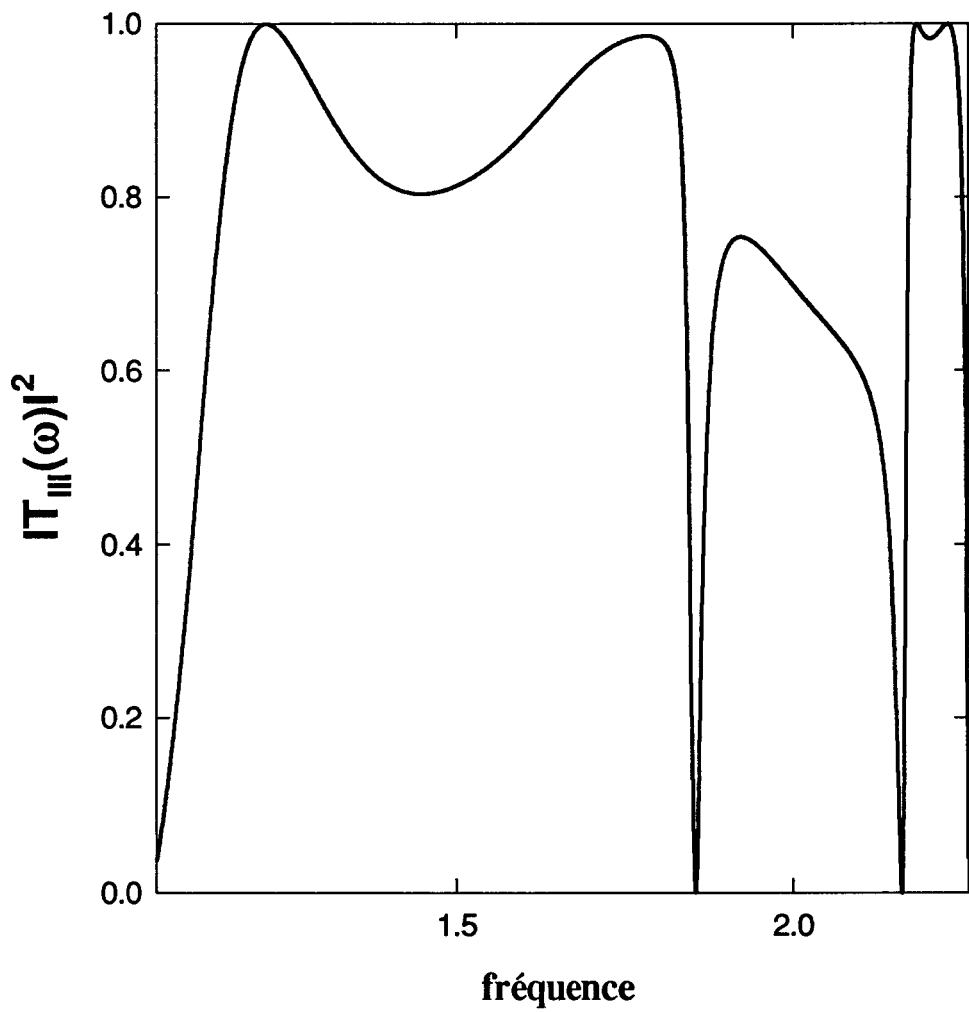


Fig III-14 : Variation du carré du module du coefficient de transmission en fonction des fréquences de vibration dans la région III à l'intérieur de la bande de volume du substrat pour $k_y a = 1.10$.

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

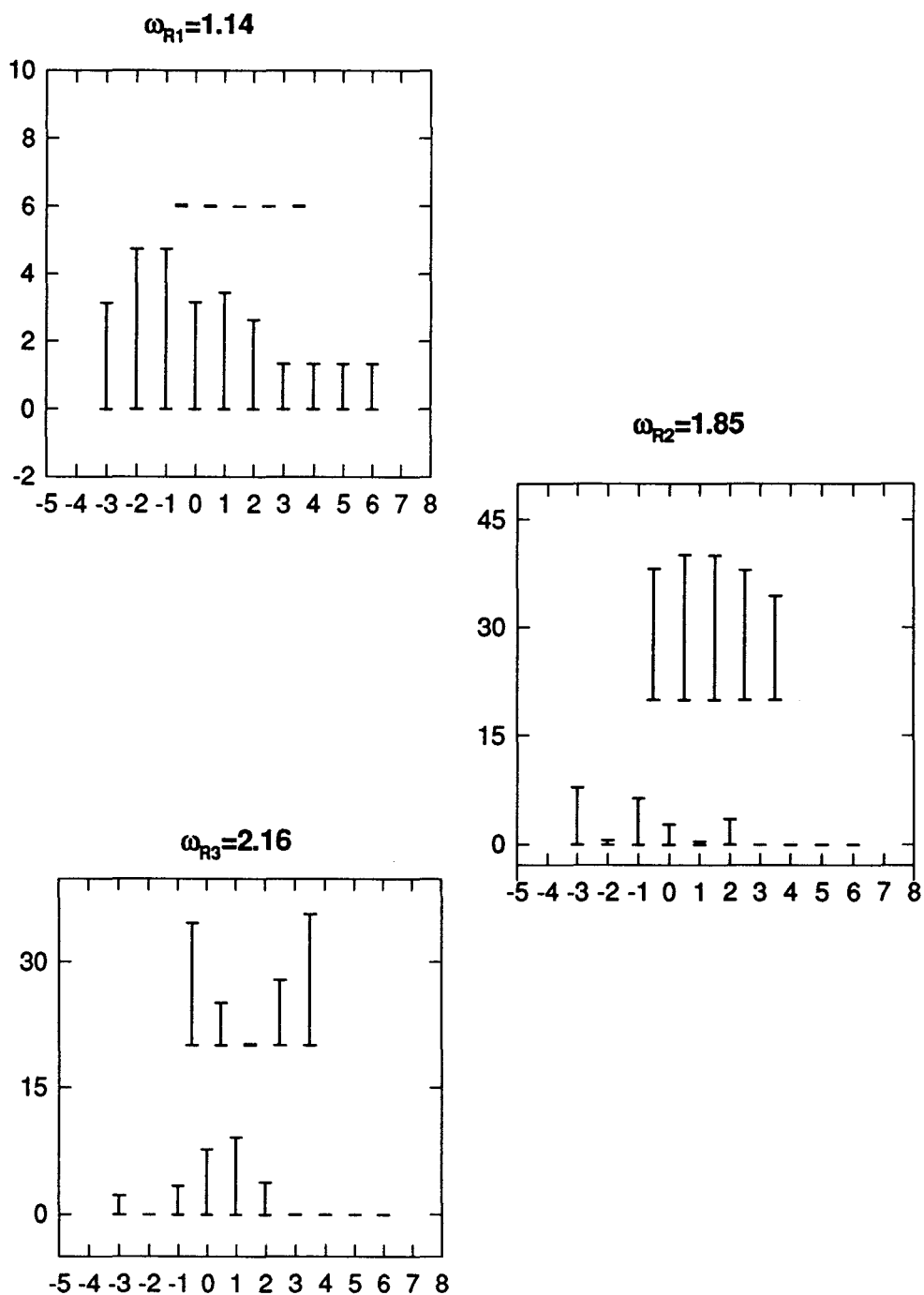


Figure III-14 : Carré du module des vecteurs déplacement correspondant aux trois fréquences de résonance pour quelques valeurs de ℓ indice des atomes du milieu (I) et celle de ℓ' indice des atomes du milieu (II), $k_v a = 1.10$.

$$L=3, L'=5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

La figure III-15 présente le carré du module des vecteurs déplacements en fonction de ℓ pour $k_y a = 1.14$. A la première fréquence de résonance ($\omega_{R_1} = 1.14$), nous constatons que l'amplitude des vibrations des atomes du milieu (II) est nulle, alors qu'elle est différente de zéro pour les atomes du milieu (I); ceci peut être expliqué par le fait que la première résonance située en dehors de la bande de volume du milieu greffé est localisée dans le milieu infini (I). Alors que pour les deux autres fréquences ($\omega_{R_2} = 1.85$ et $\omega_{R_3} = 2.16$) des modes résonants, c'est tout à fait le contraire; l'amplitude de vibrations des atomes du milieu (II) est plus importante que celles des atomes du milieu (I), ce qui nous permet de dire que les deux modes résonants placés à l'intérieur de la bande de volume du milieu (II) et qui sont considérés comme des continuations des deux modes localisés, sont localisés dans la partie greffée. La résonance ω_{R_2} s'étale sur les cinq chaînes greffées alors que ω_{R_3} est plus localisée sur les chaînes extrêmes et prend une valeur nulle sur la chaîne centrale.

La figure III-16 donne la densité d'états locale en fonction de ℓ pour $k_y a = 1.14$ et pour les fréquences $\omega_{01} = 1.28$, $\omega_{02} = 1.73$, $\omega_{03} = 2.18$ et $\omega_{04} = 2.23$; fréquences pour lesquelles le coefficient de réflexion $R_I(\omega)$ (Voir figure III-13). Nous constatons que pour le premier, le deuxième et le quatrième zéro de $R_I(\omega)$, la vibration des atomes est localisée dans le milieu (I), tandis qu'elle est plus localisée dans le milieu (II) pour le troisième zéro de $R_I(\omega)$, ceci permet de constater l'existence de deux types de zéros du coefficient de réflexion dans la zone I. Comme la densité locale d'états est proportionnelle au carré du module du vecteur déplacement de chaque atome, nous concluons que :

- La première résonance est localisée dans le milieu (I), les deux autres modes résonants associés aux prolongements des modes localisés, sont plus localisés dans la partie greffée.

- Deux types de zéros du coefficient de réflexion dans la zone I, il y a ceux qui sont associés à des ondes propagatives dans le milieu (I) et évanescentes dans le milieu (II) et ceux qui sont associés à des modes confinés dans la partie greffée et possèdent des amplitudes très faibles dans le milieu (I).

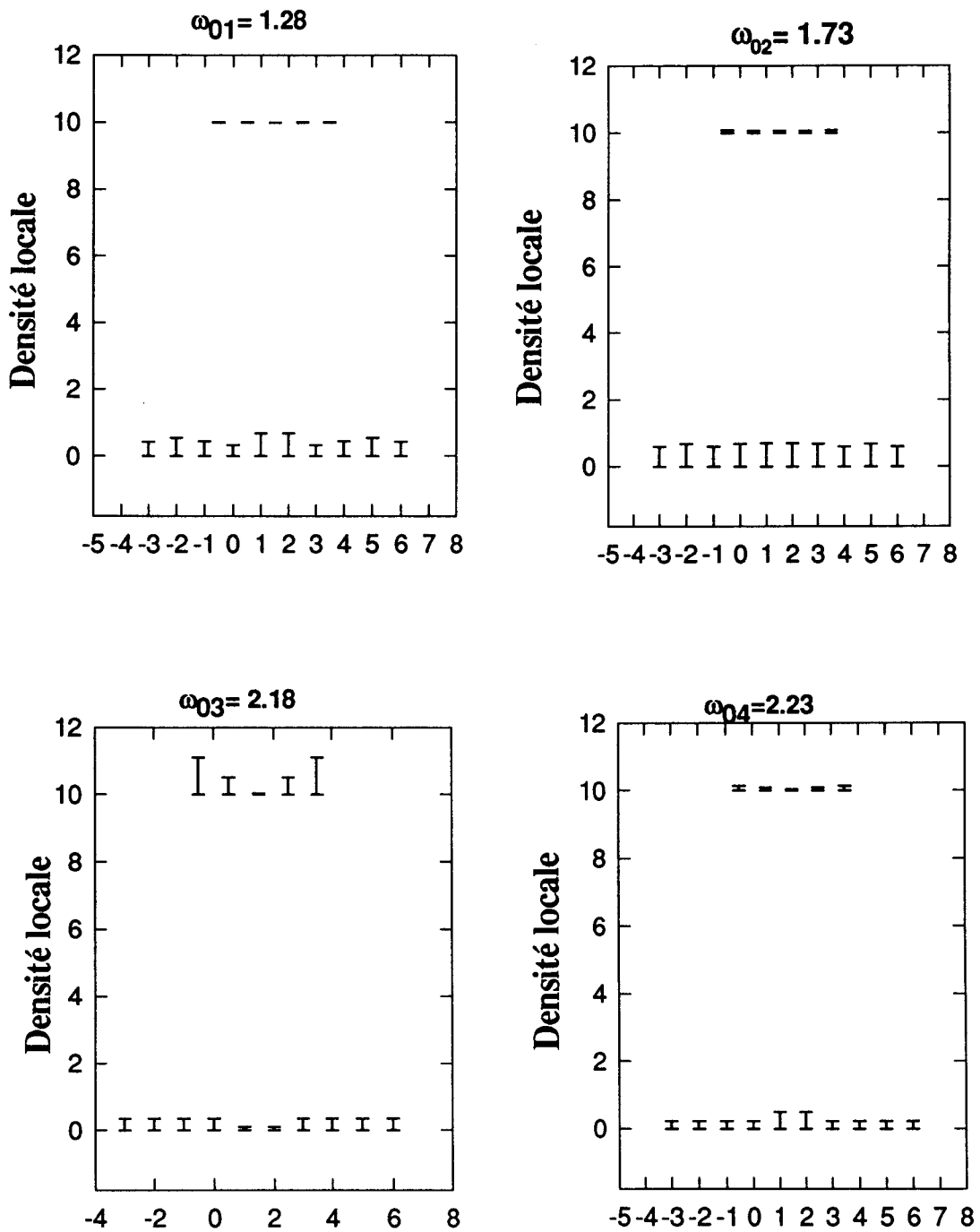


Figure III-16 : Représentation de la densité locale en fonction de quelques valeurs de ℓ indice des atomes du milieu (I) et de celle de ℓ' indice des atomes du milieu (II) aux fréquences ω_{01} , ω_{02} , ω_{03} et ω_{04} ; fréquences pour lesquelles le coefficient de réflexion $R_I(\omega)$ s'annule dans la région I du milieu (I).

$$L = 3, L' = 5, m_1 = m_2 = 1, \beta_1^x = \beta_1^y = 1, \beta_2^x = \beta_2^y = 3 \text{ et } \beta_I = \beta_{II} = 0.5.$$

Bibliographie du chapitre III

- [1] **A. A. Maradudin, R. F. Wallis and L. Dobrzynski**, *Surface Phonons and Polaritons*, dans *Handbook of Surfaces and Interfaces*, Vol. 3, edited by L. Dobrzynski (Garland Press, New York, 1980).
- [2] **G. Benedek and A. Frey**, Phys. Rev. B 21, 2482 (1980).
- [3] **E. de Rouffignac, G. Alldredge and F. W. deWette**, Phys. Rev. B 23, 4208 (1981).
- [4] **G. Alldredge, E. de Rouffignac, B. Fireg and F. W. deWette**, Phys. Rev. B 29, 3712 (1984).
- [5] **B. Sylla**, *PhD Thesis*, Université de Lille 1 (1990).
- [6] **P. Zielinski and L. Dobrzynski**, Phys. Rev. B 41, 10377 (1990).
- [7] **L. Miglio, P. Santini, P. Ruggerone and G. Benedek**, Phys. Rev. Lett. 62, 3070 (1989).
- [8] **P. Santini, L. Miglio, G. Benedek, U. Harten, P. Ruggerone and J. P. Toennies**, Phys. Rev. B 42, 11942 (1980).
- [9] **L. Miglio, P. Ruggerone, G. Benedek and L. Colombo**, Phys. Scr. 37, 768 (1988).
- [10] **G. Benedek, F. Hofman, P. Ruggerone, G. Onida and L. Miglio**, Surf. Sci. Rep. 20, 1 (1994).
- [11] **N. S. Luo, P. Ruggerone and J. P. Toennies**, Phys. Rev. B 54, 5051 (1996).

- [12] **H. Ibach**, J. Vac. Sci. Technol., A 5, 419 (1987).
- [13] **G. Brusdeylins, R. Rechsteiner, J. G. Skofronic, J. P. Toennies, G. Benedek and L. Miglio**, Phys. Rev. B 34, 902 (1986).
- [14] **J. P. Toennies**, J. Vac. Sci. Technol., A 5 440 (1987).
- [15] **J. L. Wilkes, R. E. Palmer and R. F. Willis**, J. Electron Spectrosc. Rel. Phen. 44, 355 (1987).
- [16] **J. P. Toennies and R. Vollmer**, Phys. Rev B 40, 3459 (1988).
- [17] **C. Oshima, T. Aizawa, R. Souda, Y. Ishizawa and Y. Sumiyoshi**, Solid State Commun. 65, 1601 (1988).
- [18] **G. Benedek, G. Brusdeylins, C. Heimlich, L. Miglio, J. G. Skofronick, J. P. Toennies and R. Vollmer**, Phys. Rev. Lett., 60, 1037 (1988).
- [19] **J. G. Skofronick and J. P. Toennies**, *Surface Properties of Layered Structures*, Ed. G. Benedek (Kluwer, Dordrecht, 1992) ch 4.
- [20] **F. Nizzoli, K. H. Rieder and R. F. Willis**, *Springer Series in Surface Science* (Berlin : Springer, 1985) vol 3
- [21] **G. Benedek and J. P. Toennies**, Surf. Sci. 299/300, 587 (1994).
- [22] **R. F. Wallis**, Surf. Sci. 299/300, 612 (1994).
- [23] **G. Benedek, J. Ellis, A. Reichmuth, P. Ruggerone, H. Schief and J. P. Toennies**, Phys. Rev. Lett. 69, 251 (1992).

- [24] **L. Dobrzynski, A. Akjouj, B. Sylla and B. Djafari-Rouhani**, Acta. Phys. Pol. A 81, 85 (1992).
- [25] **A. Akjouj, E. H. El Boudouti, B. Sylla, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski**, Solid State Commun. 97, 611 (1996); **E. H. El boudouti, B. Djafari-Rouhani and A. Akjouj**, Phys. Rev. B 55, 4442 (1997).
- [26] **L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani, P. Zielinski, A. Akjouj, B. Sylla and E. Oumghar**, Acta. Phys. Pol. A 89, 139 (1996).
- [27] **S. A. Safron, G. G. Bishop, J. Duan, E. S. Gillmon, J. G. Skofronik, N. S. Luo and Ruggerone**, J. Phys. Chem 97, 2270 (1993).
- [28] **W. Porod, Zhi-An Shao and C. S. Lent**, Appl. Phys. Lett. 61, 1350 (1992).
- [29] **J. O. Vasseur, P. A. Deymier, L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani and A. Akjouj**, Phys. Rev. B 55, 15 Avril (1997).
- [30] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 175, 1-8 (1986).
- [31] **E. N. Montroll and R. B. Potts**, Phys. Rev. 102, 72 (1956).
- [32] **L. Dobrzynski and H. Puzkarski**, J. of Phys.: Condens. Matter 1, 1239-1245 (1989).
- [33] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 180, 489 (51987).
- [34] **L. Dobzyski, J. Mendialdua, A. Rodriguez, S. Bolibo and M. More**, J. Phys. (Paris) 50, 2563 (1989).

CHAPITRE IV

Modèles pour l'étude des propriétés vibrationnelles des polymères adsorbés

IV.1- Introduction :

L'étude des films de macromolécules adsorbées sur une surface a fait l'objet de nombreux travaux ces dernières années. Les films macromoléculaires sont des systèmes hétérogènes de plusieurs milliers d'atomes pouvant s'associer entre eux pour former des assemblages complexes. L'étude de la structure des films macromoléculaires à l'échelle atomique représente une grande importance si nous voulons comprendre leur fonctionnement. Les films de Langmuir et Blodgett constituent un exemple montrant un grand potentiel de recherche dans un large domaine scientifique et technologique [1]. Les propriétés d'un film macromoléculaire adsorbé sont reliées aux caractéristiques physiques et microscopiques de l'adsorbant et du substrat , ainsi qu'aux paramètres traduisant l'interaction adsorbant/substrat.

Dans ce chapitre , nous nous intéresserons aux propriétés vibrationnelles des films macromoléculaires adsorbés sur un substrat solide et en particulier aux modes résonants [2]. Les phonons résonants des molécules adsorbées ou des films moléculaires apparaissent comme des modes vibrationnels situés à l'intérieur de la bande de volume du substrat , il sont caractérisés par des pics aigus dans la variation de la densité d'états du système composite étudié [3].

Dans notre étude, nous allons nous intéresser au cas des phonons résonants avec un nombre fini de polymères adsorbés sur une surface, ainsi qu'à celui d'un nombre infini de polymères adsorbés sur une surface. Dans les deux cas, nous trouvons des phonons résonants pour des fréquences situées à l'intérieur de la bande de volume du substrat. Nous avons aussi mis en évidence l'existence des bandes interdites (Gaps) dans ce type de modèles en se basant sur le calcul des coefficients de transmission.

IV.2- Modèles pour les polymères adsorbés sur une surface

Les propriétés vibrationnelles des polymères adsorbés sur une surface sont étudiées ici à l'aide de deux modèles simples. Le premier modèle considéré assimile la surface à une chaîne infinie sur laquelle seront greffées des chaînes finies d'atomes représentant les polymères adsorbés. Le deuxième modèle qui est plus réaliste suppose que les polymères sont des chaînes finies d'atomes greffées sur la surface [001] d'un cristal semi-infini de structure cubique simple.

IV.2.1- Substrat à une seule dimension

Le premier modèle consiste en un système unidimensionnel, il se compose d'un nombre (N) de chaînes finies d'atomes identiques dont L' est la longueur atomique, ces chaînes représentant les polymères sont greffées sur la chaîne infinie considérée comme substrat. (m_1) et (m_2^n) sont respectivement les masses des atomes de la chaîne infinie et ceux de la $n^{\text{ième}}$ chaîne finie greffée. β_1 est l'interaction entre atomes premiers voisins de la chaîne infinie, alors que $\beta_2^{(n)}$ et $\beta_1^{(n)}$ sont respectivement les interactions entre atomes premiers voisins de la $n^{\text{ième}}$ chaîne finie greffée et le couplage entre cette dernière avec la chaîne infinie.

Dans un premier temps, nous considérons que les chaînes greffées ainsi que la chaîne infinie sont de même nature [$(m_1) = (m_2^n)$, $\beta_1 = \beta_2^{(n)}$] et que les distances atomiques entre les chaînes greffées sont les mêmes, nous considérons aussi que les couplages $\beta_1^{(n)}$ liant les chaînes greffées à la chaîne infinie sont les mêmes

$(\beta_I^{(n)} = \beta_I)$ Nous allons calculer la variation de la densité d'états pour le système considéré et la variation du coefficient de transmission pour un certain nombre de chaînes greffées en fonction des fréquences de vibration.

L'objectif de ces calculs est de voir si les zéros des coefficients de transmission correspondent à des gaps pour le système considéré et si ces gaps s'élargissent quand le nombre de chaînes greffées augmente.

La figure (IV-1) ci dessous représente un schéma simplifié du système étudié.

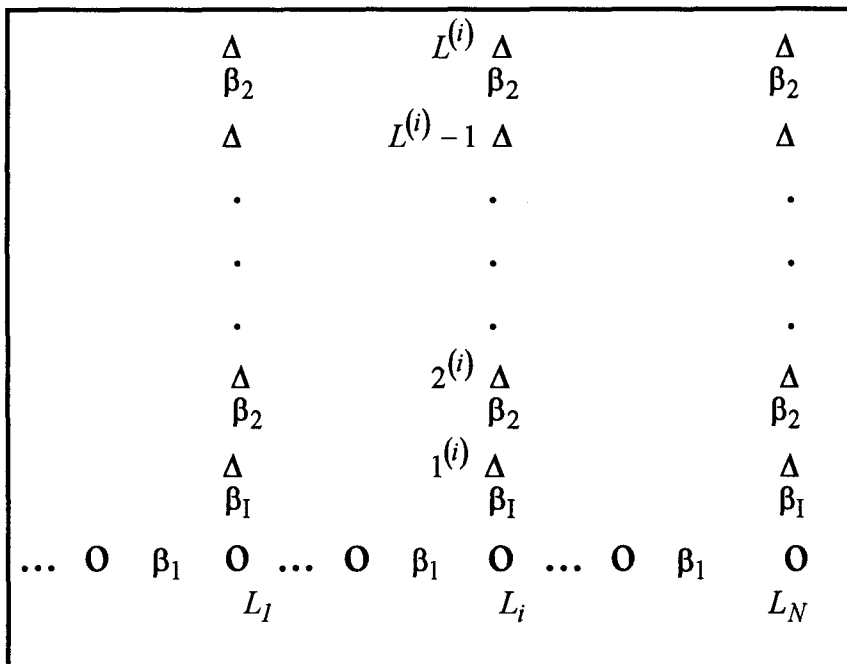


Figure IV-1.

IV.2.1.1- Fonction réponse de référence dans l'espace d'interface

Pour un système composite formé de N chaînes greffées, l'espace d'interface est formé des $2N$ sites $(L_{1,1}^{(1)}; L_{2,1}^{(2)}; \dots; L_{N,1}^{(N)})$. La fonction réponse de références \tilde{G}_s est obtenue par superposition des fonctions de réponse \tilde{G}_0 et \tilde{g}_s associées respectivement à la chaîne infinie et aux chaînes finies dont les expressions sont respectivement données par les équations (III-4-4) et (III-4-12).

IV.2.1.2- Opérateur de couplage

Le système composite est obtenu en assemblant les sous systèmes indépendants (chaînes finies et infinie) par l'opérateur de couplage \vec{V}_I défini par :

$$\vec{V}_I = \vec{h}_C - \vec{h}_D \quad (\text{IV-2-1})$$

\vec{h}_C est la matrice dynamique associée au système composite obtenu en écrivant les équations du mouvement de tous les atomes du système composite. Alors que \vec{h}_D est l'Hamiltonien associé au système composé de la chaîne infinie et des chaînes finies découplées ($\beta_I = 0$).

Il faut noter que les équations du mouvement des atomes sont écrites en ne tenant compte que de l'interaction entre atomes premiers voisins.

Les éléments matriciels $V_I(\ell, \ell')$ de l'opérateur de couplage \vec{V}_I sont définis par :

* Si $\ell = L_n$ et $\ell' = L_n$ ou si $\ell = 1^{(n)}$ et $\ell' = 1^{(n)}$

$$V_I(\ell, \ell') = -\frac{\beta_I}{m}$$

* Si $\ell = L_n$ et $\ell' = 1^{(n)}$ ou si $\ell = 1^{(n)}$ et $\ell' = L_n$

$$V_I(\ell, \ell') = \frac{\beta_I}{m}$$

* Si $\ell = L_n$ et $\ell' = 1^{(m)}$ ou si $\ell = 1^{(m)}$ et $\ell' = L_n$

$$V_I(\ell, \ell') = 0$$

IV.2.1.3: Opérateur réponse d'interface

Du fait du choix de la fonction réponse de référence, l'opérateur réponse d'interface est défini à partir de la relation (III-4-16) soit :

$$\vec{A} = \vec{V}_I \vec{G}_s. \quad (\text{IV-2-2})$$

Dans ce qui suit, nous n'allons pas nous intéresser aux calculs des fonctions réponses dans les différentes régions du système composite comme c'est le cas dans le chapitre précédent. Nous allons juste calculer la variation de la densité totale d'états et le coefficient de transmission pour un système composé d'un certain nombre de chaînes greffées.

IV.2.1.4- Calcul de la variation de la densité totale d'états

A l'aide de ce modèle, nous avons calculé la variation de la densité totale d'états $\Delta n(\omega)$ où ω est la fréquence de vibration. Cette variation est la différence entre la densité d'états du système défini ci-dessus et celle du substrat représentée par la chaîne infinie d'atomes. Elle est calculée en considérant un nombre N limité de chaînes greffées et elle est donnée par la relation suivante [2-4] (soustraction faite des pics delta correspondant aux états propres des chaînes finies) :

$$\Delta n(\omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \text{Im} \text{Ln} \det \left\{ W(\omega^2) \right\} \quad (\text{IV-2-3})$$

où

$W(\omega^2)$ est le déterminant de la matrice $\tilde{\Delta}(\mathbf{m}, \mathbf{m}')$ définie par :

$$\tilde{\Delta}(m, m') = \tilde{I}(m, m') + \tilde{A}(m, m'). \quad (\text{IV-2-4})$$

La figure (IV-2) présente la variation de la densité totale d'états en fonction de la fréquence pour un polymère de cinq atomes adsorbés sur le substrat unidimensionnel (chaîne infinie), il faut noter que $L' = 5$, $\beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1$ et $m_1 = m_2 = 1$. Les fréquences sont exprimées en unité de $\sqrt{\frac{\beta_1}{m_1}}$ et la bande de volume du substrat couvre

l'intervalle 0 à 2 en fréquences réduites. Comme les cinq états propres de la chaîne finie sont situés à l'intérieur de la bande de volume du substrat, la variation de la densité d'états montre cinq résonances représentées par des pics bien définis. Lic delta qui apparait à l'extérieur de la bande de volume correspond à un état de phonon localisé

pour le système considéré. En diminuant la masse des atomes de la chaîne finie et / ou en augmentant la constante de force β_2 liant les atomes de la chaîne finie, nous constatons qu'il y aura une diminution du nombre des états propres de la chaîne à l'intérieur de la bande de volume du substrat et par suite la variation de la densité d'états présentera moins de cinq pics de résonance.

La figure (IV-3) présente la variation de la densité totale d'états pour deux chaînes finies de cinq atomes greffés sur la chaîne infinie. Les paramètres du système sont exactement les mêmes ($L'=5$, $\beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1$ et $m_1 = m_2 = 1$). La distance entre les deux chaînes greffées est de quatre atomes du substrat. Dans ce cas, nous constatons que l'interaction entre les deux chaînes finies par l'intermédiaire du substrat a donné lieu à une levée de dégénérescence. Cette interaction conduit donc à l'apparition d'un dédoublement de pics de résonance dont quatre sont très bien définis, les six autres possèdent une intensité plus faible.

La figure (IV-4) représente la variation de la densité totale d'états dans le cas de huit chaînes de cinq atomes adsorbées, deux chaînes consécutives greffées sont séparées par quatre atomes appartenant à la chaîne infinie. Nous constatons l'existence des modes résonants représentés par des pics dans la variation de la densité d'états, entre deux pics de résonance il y a apparition de modes anti-résonants qui sont représentés par des creux dans la variation de la densité d'états. Ces modes anti-résonants sont caractérisés par des variations négatives de la densité d'états. Dans le cas limité d'un nombre infini de chaînes greffées sur la chaîne infinie, nous pouvons penser que ces anti-résonances peuvent correspondre aux bandes interdites qui seront mises en évidence à partir d'un calcul des coefficients de transmission (gaps) ce type de modèle.

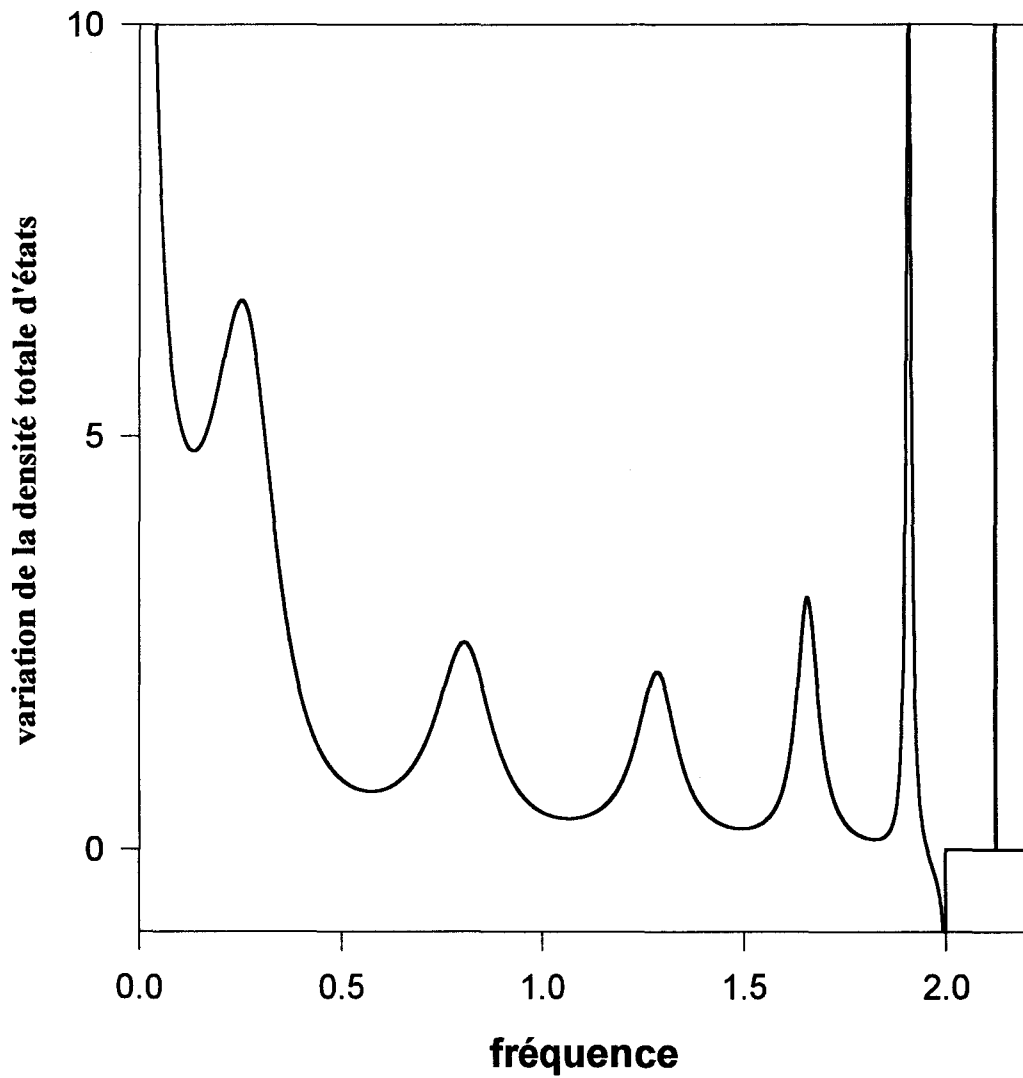


Figure IV-2 : Variation de la densité totale d'états en fonction des fréquences dans le cas du système composé d'un seul polymère adsorbé sur le substrat unidimensionnel.

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

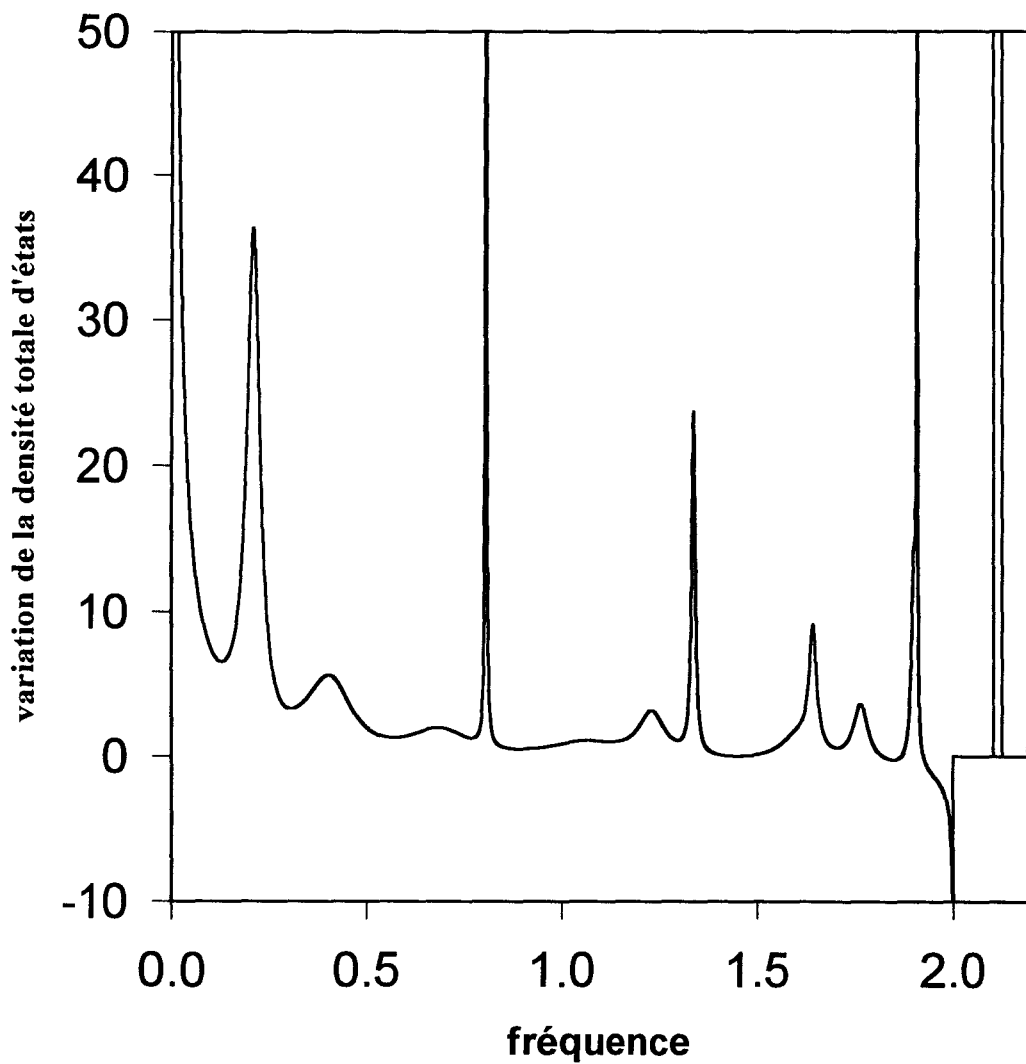


Figure IV-3 : Variation de la densité totale d'états en fonction des fréquences dans le cas du système composé de deux polymères adsorbés sur le substrat unidimensionnel.

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

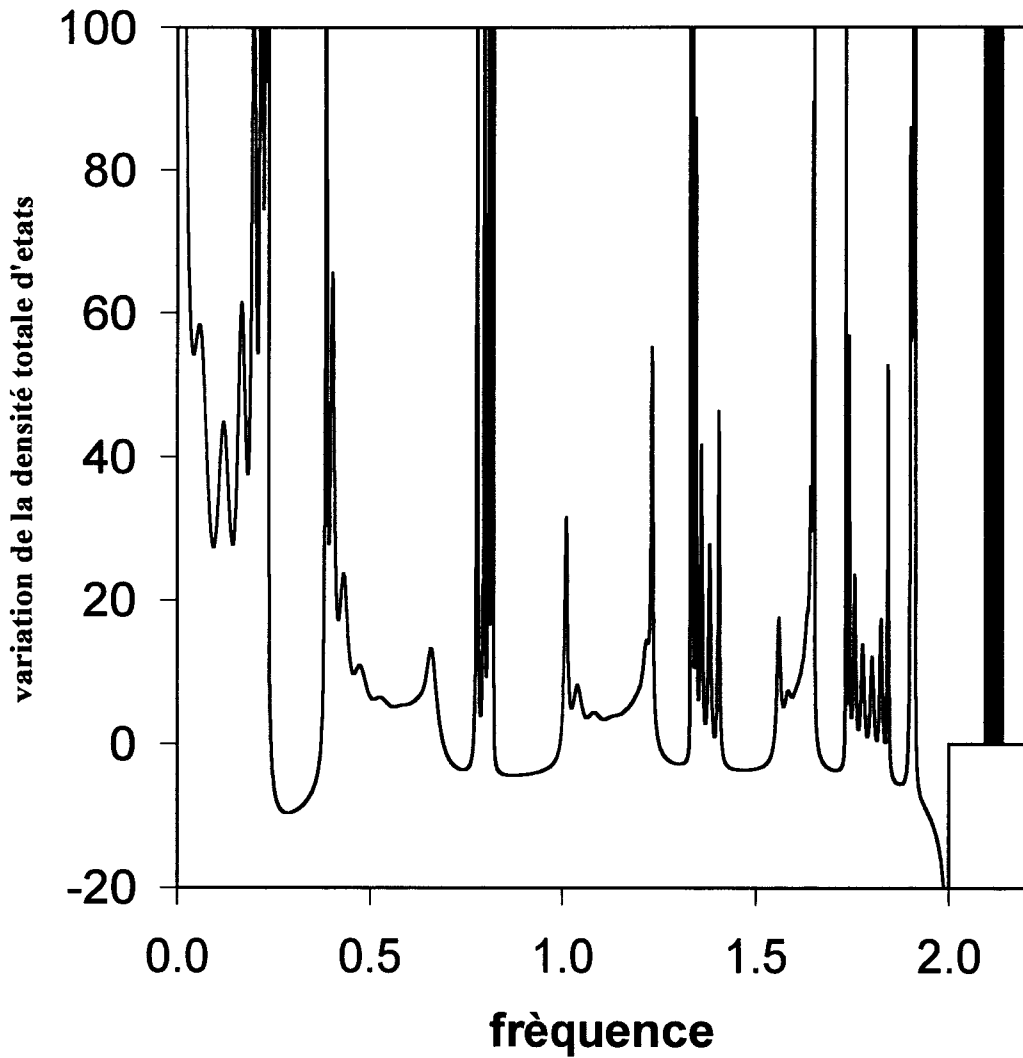


Figure IV-4 : Variation de la densité totale d'états en fonction des fréquences dans le cas d'un système composé de huit polymères adsorbés sur le substrat unidimensionnel.

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

IV.2.1.5- Mise en évidence des gaps pour le modèle considéré à partir du calcul des coefficients de transmission

Nous avons vu que le fait d'avoir greffé un certain nombre de chaînes finies sur la chaîne infinie a pour conséquence l'apparition de régions dans la variation de la densité d'états qui peuvent correspondre à des gaps dans la densité d'états système.

Dans ce paragraphe, nous allons nous intéresser aux calculs de la variation du coefficient de transmission en fonction des fréquences de vibration dans le but de voir si cette variation présente des zéros de transmission, si ceux ci correspondent aux modes anti-résonants de la variation de la densité d'états et s'ils se présentent sous forme de paliers qui s'élargissent avec l'augmentation du nombre de chaînes greffées.

Pour les calculs ultérieurs, nous avons considéré que la première chaîne finie est greffée en l'atome d'indice (0) de la chaîne infinie et que la longueur des chaînes finies greffées est de cinq atomes, alors que la distance atomique entre deux chaînes greffées consécutives est de quatre atomes.

Le calcul des coefficients de transmission a été fait à partir de l'équation (II-2-21) donnant les vecteurs déplacements pour un système composite. En effet, en considérant une onde plane $u(\ell') = t_1^{\ell'}$ se propageant dans la chaîne infinie, les indices ℓ et ℓ' des éléments matriciels $A(\ell, \ell')$ de l'opérateur réponse d'interface seront tel que ℓ appartienne à l'espace des interfaces et ℓ' à la chaîne infinie.

Le vecteur $\vec{A}(MD)$ s'écrira sous l'équation (IV-2-5) ci dessous

$$\bar{A}(MD) = \begin{bmatrix} A(L_1, \ell') \\ A(1^{(1)}, \ell') \\ \vdots \\ A(L_n, \ell') \\ A(1^{(n)}, \ell') \\ \vdots \\ A(L_N, \ell') \\ A(1^{(N)}, \ell') \end{bmatrix}.$$

L'indice n caractérise la $n^{\text{ième}}$ chaîne greffée.

Le vecteur de référence est

$$\langle U(M) | = (t_1^{L_1}, 0, t_1^{L_2}, 0, \dots, t_1^{L_n}, 0, \dots, t_1^{L_N}, 0), \quad (\text{IV-2-6})$$

Pour $n' \geq L_N$, le vecteur déplacement est donné par l'expression

$$u_{\ell'}(t_1) = T(\omega) t_1^{\ell'} \quad (\text{IV-2-7})$$

où $T(\omega)$ représente le rapport des vecteurs d'ondes transmis et incidents. On définit le coefficient de transmission comme $|T(\omega)|$.

Excitée par l'onde incidente $t_1^{\ell'}$, la chaîne greffée vibre également. Les déplacements de ses atomes, obtenus à partir de l'équation (II-2-21) sont :

$$u_{\ell'}(q_2) = A(q_2) \frac{chq_2 \left(L' - \ell' + \frac{1}{2} \right)}{2sh\left(\frac{q_2}{2}\right) sh(q_2 L')} \quad (\text{V-2-8})$$

Il est à noter que $t_2 = e^{q_2}$ et que L' désigne la longueur de la chaîne greffée. Nous remarquons que le vecteur déplacement s'annule pour $chq_2 \left(L' - \ell' + \frac{1}{2} \right) = 0$,

soit

$$q_2' = \left(p + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{L' - \ell' + \frac{1}{2}} \quad (\text{IV-2-8b})$$

où $q_2' = -iq_2$ et p est un entier positif. Le module du vecteur déplacement est donc égale à zéro quand $q_2' \left(L' - \ell' + \frac{1}{2}\right)$ est un multiple impaire de $\frac{\pi}{2}$ et prend sa valeur maximale de 1 quand $q_2' \left(L' - \ell' + \frac{1}{2}\right)$ est un multiple de π .

Sur la figure (IV-5) nous avons représenté la variation du carré du module du coefficient de transmission en fonction de la fréquence pour un système composé d'une chaîne finie de cinq atomes greffée en l'atome (0) de la chaîne infinie dans le cas où les deux milieux sont de même de nature ($L' = 5$, $\beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1$ et $m_1 = m_2 = 1$). La courbe présente cinq points correspondant à des transmissions nulles. Compte tenu de l'équation (IV-2-8), en considérant une onde qui se propage dans la chaîne greffée, les fréquences réduites interdites ω_g s'écrivant comme suit

$$\omega_g = \sqrt{1 + \cos \left[\frac{\left(p + \frac{1}{2}\right)\pi}{L' - \ell' + \frac{1}{2}} \right]}$$

Les fréquences ω_g correspondent aux modes propres des chaînes finies greffées. Ces chaînes greffées se comportent comme un résonateur, ainsi ce composite simple filtre les fréquences ω_g . On note que l'existence des transmissions nulles a été aussi démontrée dans des systèmes électroniques [7] et photonique [8] pour des systèmes quazi-unidimensionnels. Les figures (IV-6), (IV-7), (IV-8) et (IV-9) représentent également la variation du coefficient de transmission en fonction de la fréquence de vibration, mais pour des systèmes plus complexes correspondant respectivement à quatre, huit, vingt et cent chaînes greffées sur la chaîne infinie.

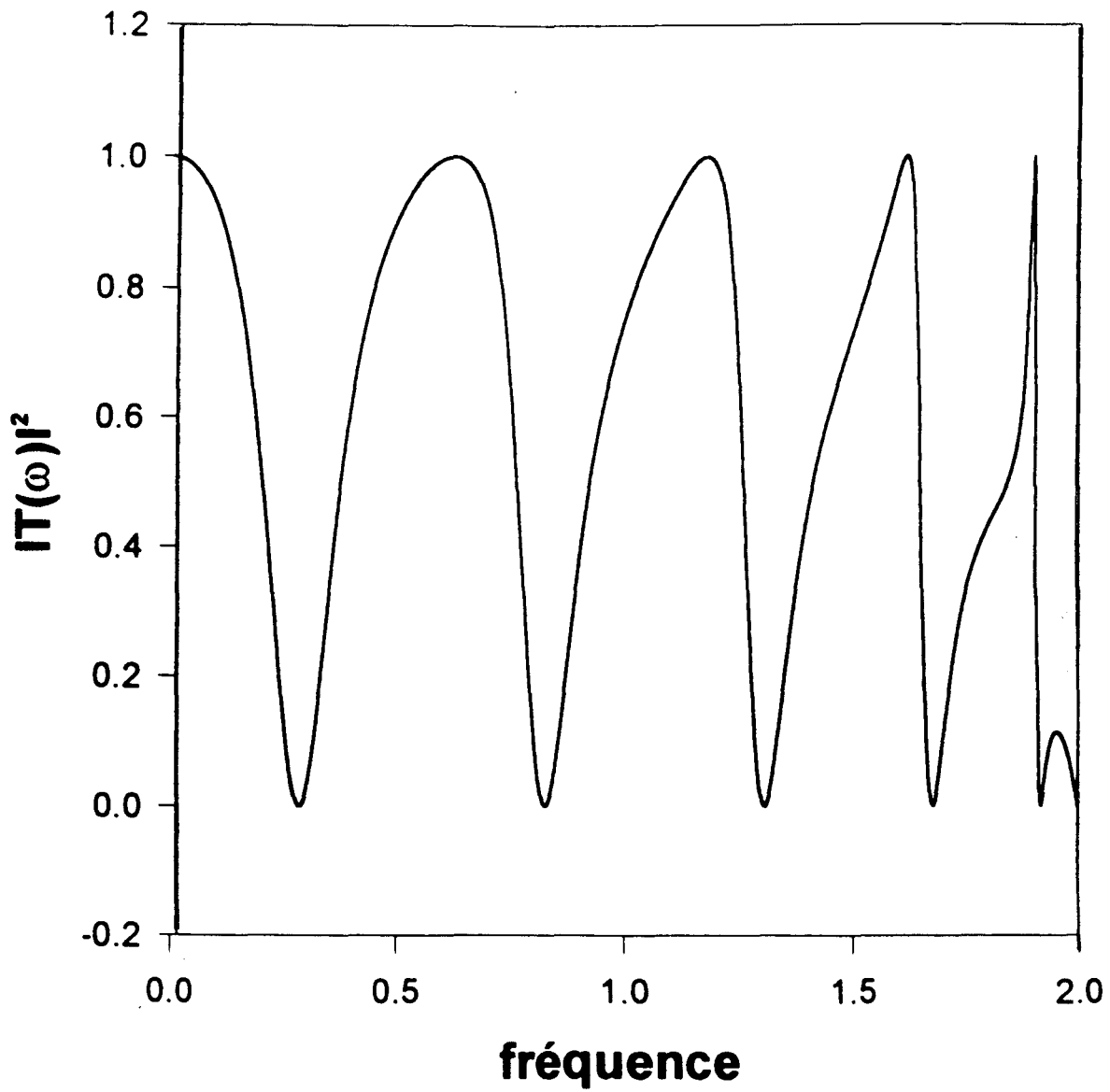


Figure IV-5 : Variation du coefficient de transmission en fonction des fréquences dans le cas du système composé d'une seule chaîne finie greffée sur la chaîne infinie.

$$L=5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

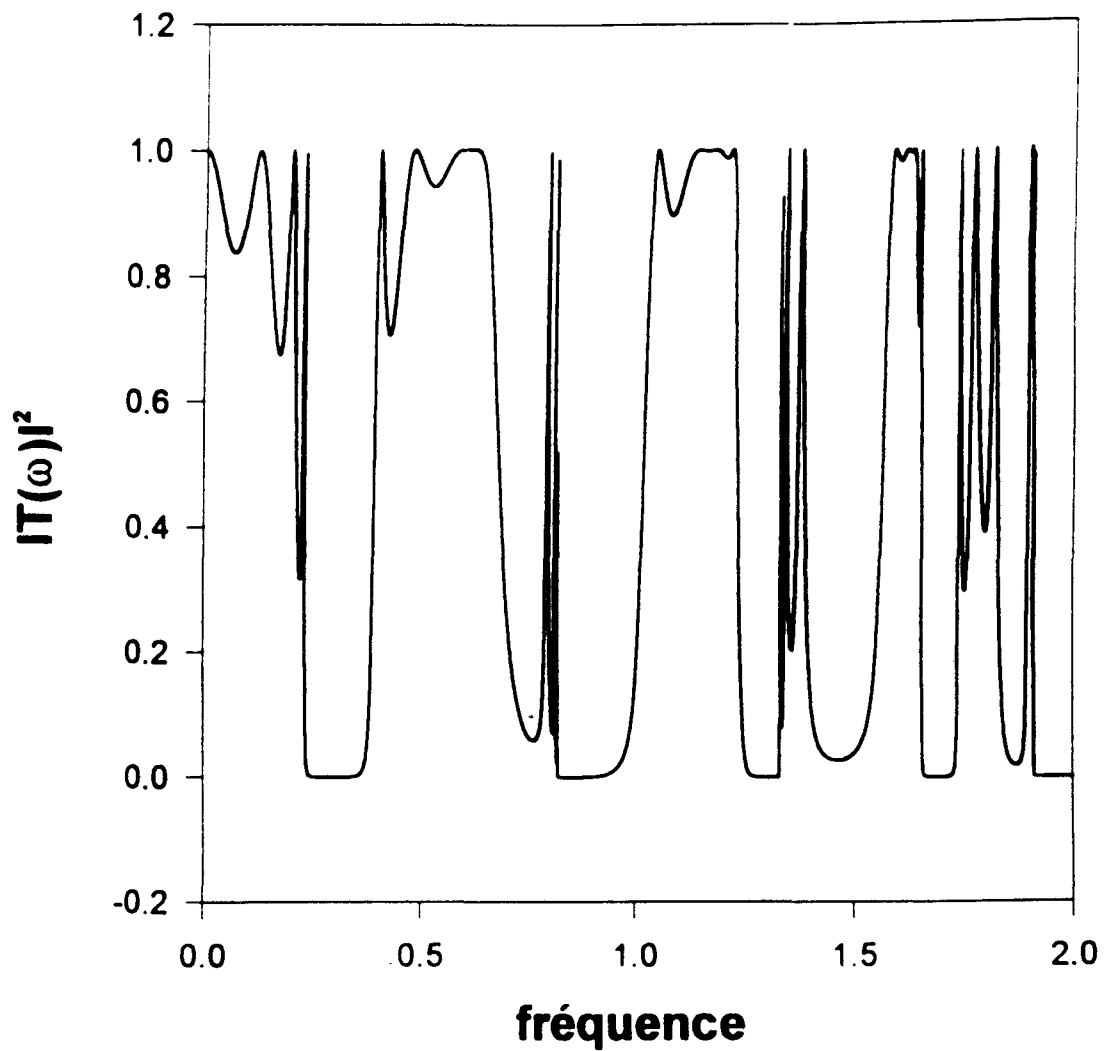


Figure IV-6 : Variation du coefficient de transmission en fonction des fréquences dans le cas du système composé de quatre chaînes finies greffées sur la chaîne infinie.

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

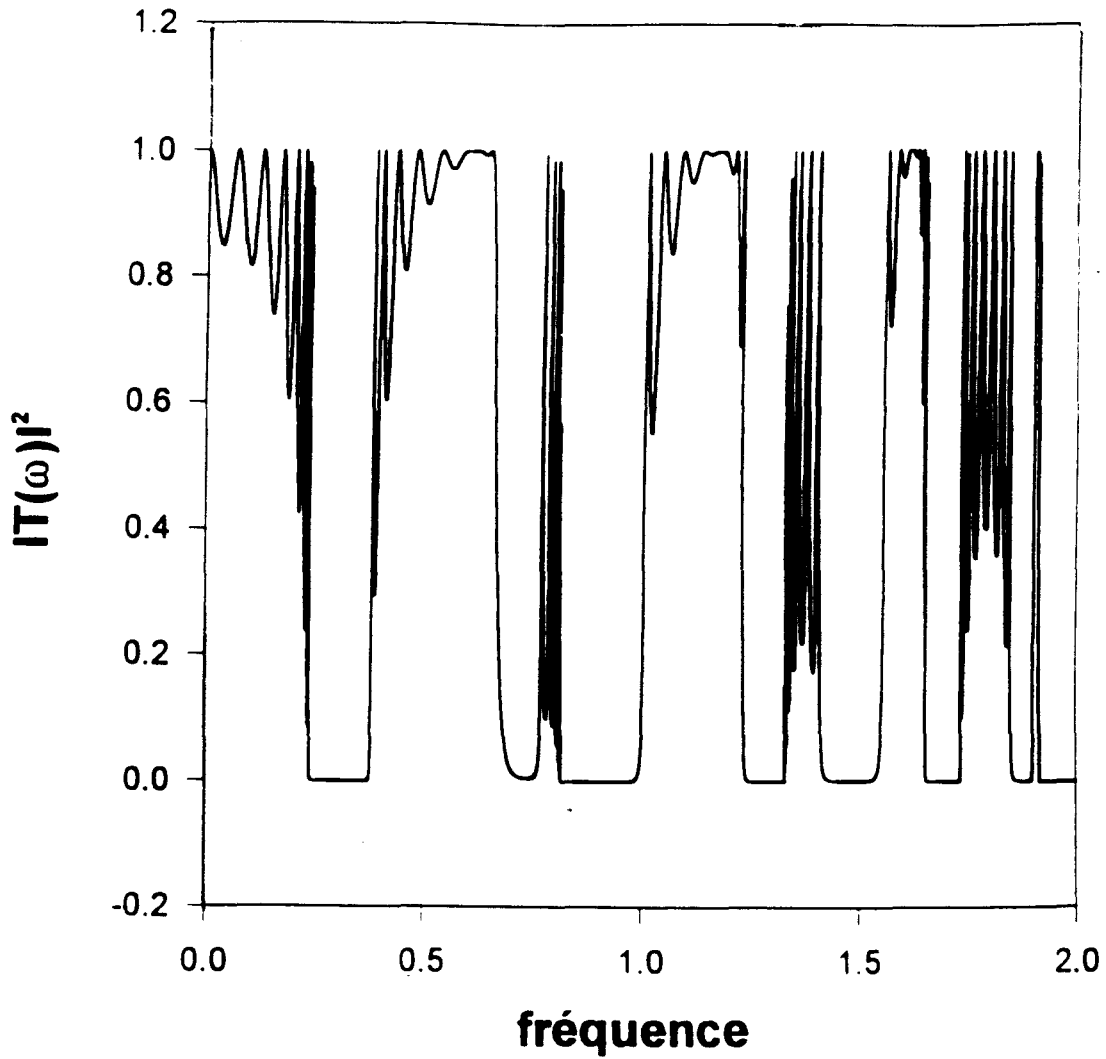


Figure IV-7 : Variation du coefficient de transmission en fonction des fréquences dans le cas du système composé de huit chaînes finies greffées sur la chaîne infinie.

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

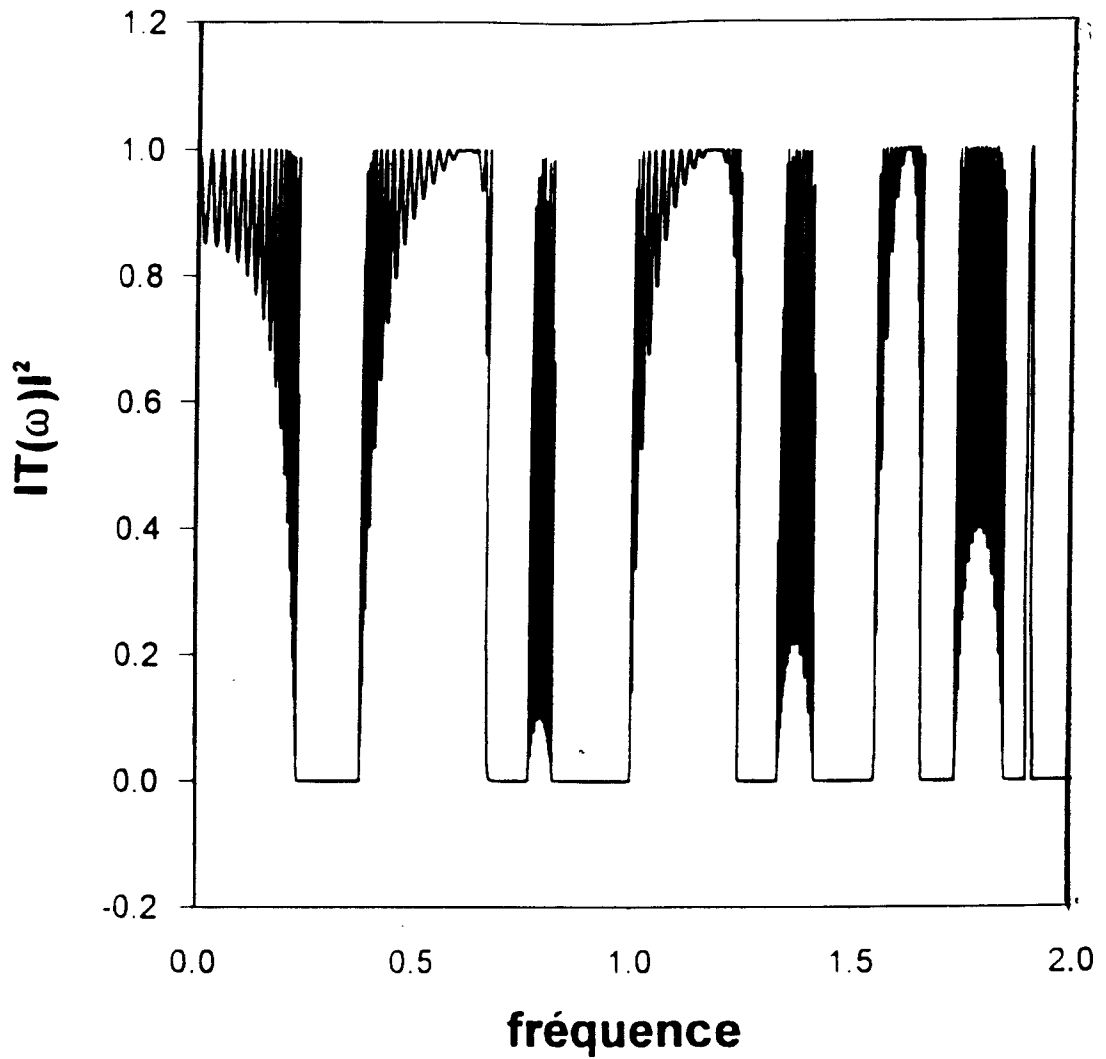


Figure IV-8 : Variation du coefficient de transmission en fonction des fréquences dans le cas du système composé de vingt chaînes finies greffées sur la chaîne infinie.

$$L' = 5, |\beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

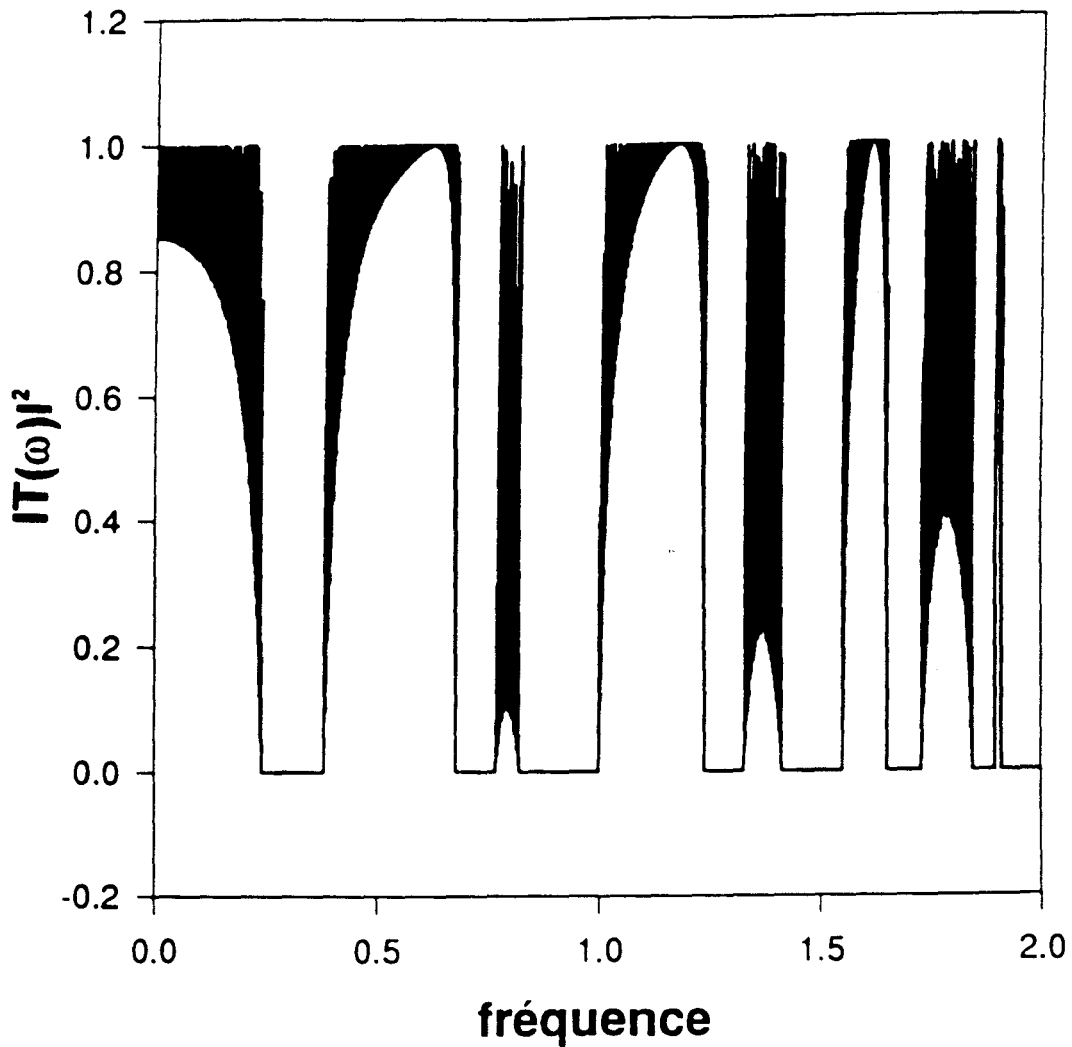


Figure IV-9 : Variation du coefficient de transmission en fonction des fréquences dans le cas du système composé de cent chaînes finies greffées sur la chaîne infinie.

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

Nous remarquons que pour quatre chaînes greffées, certains paliers associés à des transmissions nulles continuent à se creuser. Cependant, à partir de huit chaînes greffées la largeur des paliers correspondant aux zéros de transmission reste n'évoluent pas en fonction du nombre de chaînes greffées et restent constants (figures IV-7, IV-8, IV-9). Il reste à voir si ces paliers correspondant aux zéros de transmission correspondent à des gaps, raison pour laquelle nous aurons ultérieurement recours à la fonction réponse structurale dans le but de déterminer la structure de bandes d'un système composite formé d'une infinité de chaînes finies greffées sur la chaîne infinie.

IV.2.1.6- Structure de bandes d'un film de polymères adsorbés sur le substrat unidimensionnel (chaîne infinie)

a- Fonction réponse structurale associée à une chaîne infinie d'atomes identiques.

Considérons une chaîne infinie d'atomes identiques de masse (m_1) et de paramètre cristallin a . Chaque atome est soumis à une constante de rappel β_1 entre atomes premiers voisins. La fonction réponse (fonction de Green) associée à la chaîne infinie s'écrit

$$G(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell - \ell'| + 1}}{\beta_1 t_1^2 - 1}.$$

En subdivisant la chaîne infinie en des portions égales renfermant chacune N atomes, nous définissons ainsi dans l'espace réel une nouvelle cellule unitaire ($0 \leq \ell, \ell' \leq N - 1$). Pour tenir compte de la périodicité du système, nous introduisons la fonction réponse structurale associée à la cellule unitaire, elle s'écrit

$$G_k(\ell - \ell') = \frac{m_1}{\beta_1} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} G(\ell + nN - \ell'). \quad (\text{IV-2-9})$$

Sachant que $\vec{k} \cdot \vec{R}_n = nNka$ et compte tenu de l'expression de $G_k(\ell - \ell')$,

$$G_k(\ell - \ell') = \frac{m_1}{\beta_1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{inNka} \frac{t_1^{|\ell - \ell' + nN| + 1}}{t_1^2 - 1}. \quad (\text{IV-2-10})$$

En introduisant la variable $t_1 = e^{q_1}$, l'expression ci dessus devient

$$G_k(\ell - \ell') = \frac{m_1}{2\beta_1 \text{sh}q_1} \left[-e^{-q_1|\ell - \ell'|} + \frac{e^{q_1(\ell - \ell')}}{1 + e^{N(q_1 + ika)}} + \frac{e^{q_1(\ell' - \ell)}}{1 + e^{N(q_1 - ika)}} \right]. \quad (\text{IV-2-11})$$

Finalement la fonction réponse structurale associée est définie pour $\ell \geq \ell'$ et pour $\ell \leq \ell'$ respectivement par

* pour $\ell \geq \ell'$

$$G_k(\ell - \ell') = \frac{m_1}{2\beta_1} \frac{\text{sh}q_1(\ell - \ell' - N) - e^{-iNka} \text{sh}q_1(\ell - \ell')}{\text{sh}q_1[\text{ch}(Nq_1) - \cos(Nka)]}, \quad (\text{IV-2-12})$$

* pour $\ell \leq \ell'$

$$G_k(\ell - \ell') = \frac{m_1}{2\beta_1} \frac{\text{sh}q_1(\ell' - \ell - N) - e^{-iNka} \text{sh}q_1(\ell' - \ell)}{\text{sh}q_1[\text{ch}(Nq_1) - \cos(Nka)]}. \quad (\text{IV-2-13})$$

Les détails de calcul de la fonction réponse structurale associée à la chaîne infinie sont données en l'appendice II associé à ce chapitre.

b- Phonons localisés associés au système composé de la chaîne finie greffée sur un atome de la cellule unitaire.

En considérant le système composé d'une infinité de chaînes finies greffées sur la chaîne infinie, dont la distance atomique entre les chaînes finies est de N atomes, nous constatons l'existence d'une périodicité dont la période est le système composé de la cellule unitaire formée par les N atomes de la chaîne infinie et de la chaîne finie greffée en l'atome (ℓ).

Compte tenu de cette périodicité, nos calculs ultérieurs vont se restreindre au système composé de la cellule unitaire composée de N atomes de masse (m_1); β_1 est l'interaction entre les atomes premiers voisins. Sur l'atome (ℓ) est greffée une chaîne finie de L' atomes de masse (m_2), β_2 est l'interaction entre les atomes premiers voisins de la chaîne finie. β_1 est l'interaction entre l'atome (ℓ) de cellule unitaire et l'atome (1') de la chaîne finie. La fonction réponse de référence \vec{G}_s , ainsi que l'opérateur de couplage \vec{V}_I sont définis respectivement par les expressions matricielles ci dessus,

$$\vec{G}_s = \begin{bmatrix} \vec{G}_k & \vec{0} \\ \vec{0} & \vec{g}_s \end{bmatrix} \text{ et } \vec{V}_I = \begin{bmatrix} -\frac{\beta_1}{m_1} & \frac{\beta_1}{m_1} \\ \frac{\beta_1}{m_2} & -\frac{\beta_1}{m_2} \end{bmatrix}. \quad (\text{IV-2-14})$$

\vec{G}_k est la fonction réponse structurale définie par l'équation (IV-2-12).

\vec{g}_s est la fonction réponse associée à la chaîne finie, elle est définie par l'équation (III-4-12).

La configuration de la cellule unitaire d'un tel système est la suivante est représenté par la figure (IV-10) ci dessous.

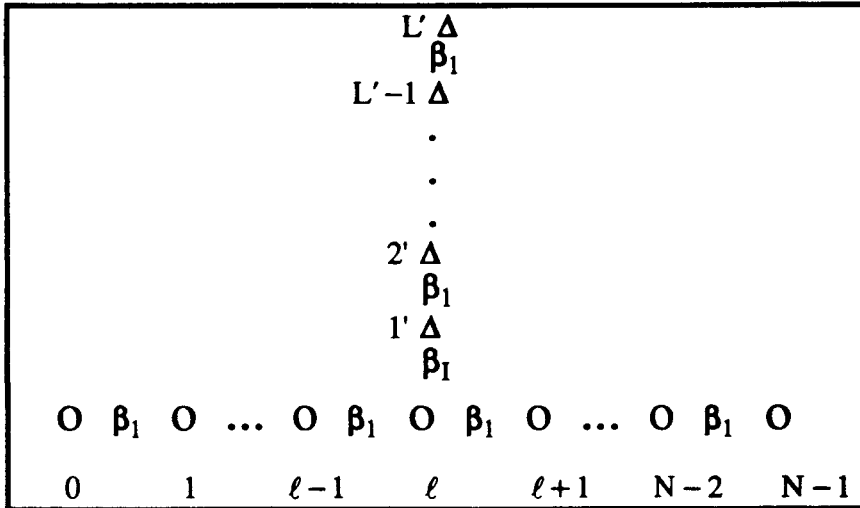


Figure IV-10

Connaissant la fonction réponse de référence et l'opérateur de couplage, l'opérateur réponse d'interface est définie par la relation

$$\vec{A} = \vec{V}_I \cdot \vec{G}_s. \quad (\text{IV-2-15})$$

ou encore

$$A(\ell, \ell') = \sum_{\ell''=\ell, 1'} A(\ell, \ell'') G_s(\ell'', \ell).$$

En introduisant la variable $t_2 = e^{q_2}$ et en tenant compte de la définition de l'opérateur réponse d'interface, les états propres de ce système sont donnés en posant $\det(\vec{\Delta}(m, m')) = 0$ [4] c'est à dire la valeur donnée par l'équation :

$$1 + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\beta_I}{\beta_1} \frac{sh(Nq_1)}{sh(q_1)[ch(Nq_1) - \cos(Nka)]} + \frac{\beta_I}{\beta_2} \frac{chq_2 \left(L' - \frac{1}{2} \right)}{sh\left(\frac{q_2}{2}\right)sh(q_2 L')} \right\} = 0 \quad (\text{IV-2-16})$$

L'expression matricielle de $\ddot{\Delta}(m, m')$ est donnée en appendice II.

Il faut noter que l'équation ci dessus est purement réelle, quelque soit la nature (réelle ou complexe) de $t_1 = e^{q_1}$ et de $t_2 = e^{q_2}$. L'équation (IV-2-16) nous permet d'obtenir à l'aide d'un calcul les états vibrationnels localisés associés au système composite considéré. Nous allons illustrer ces résultats analytiques par des courbes à l'intérieur de la zone de Brillouin unidimensionnelle.

La figure (IV-11) présente les états vibrationnels localisés associés au système composé d'une chaîne finie de cinq atomes greffée sur la cellule unitaire ($N=4$). En effet cette figure illustre la structure de bandes d'un film de polymères constitué d'une infinité de chaînes finies et adsorbés sur le substrat unidimensionnel. Les polymères sont arrangés périodiquement sur le substrat avec une période égale à quatre sites atomique du substrat. Il faut noter que les vecteurs d'onde et les fréquences sont respectivement exprimés dans les unités $\frac{1}{a}$ et $\sqrt{\frac{\beta}{m}}$, a est la distance interatomique. La figure (IV-11) montre l'existence de huit gaps absolus dans la structure de bandes, ils correspondent aux huit bandes d'anti-résonance observés dans la variation de la densité d'états (figure IV-4)) et aux huit paliers de zéros de transmission pour le système composé de cent chaînes finies greffées sur la chaîne infinie (figure IV-9)). La structure de bandes est composée de neuf branches, dont cinq sont associées à la dispersion des phonons résonants dans la chaîne finies, alors que les autres quatre sont dues au repliement de la structure de bandes du substrat causé par la période $4a$ du système adsorbé. la bande supérieure résulte de la dispersion des modes vibrationnels considérés comme localisés dans le cas d'un nombre fini de polymères adsorbés sur le substrat.

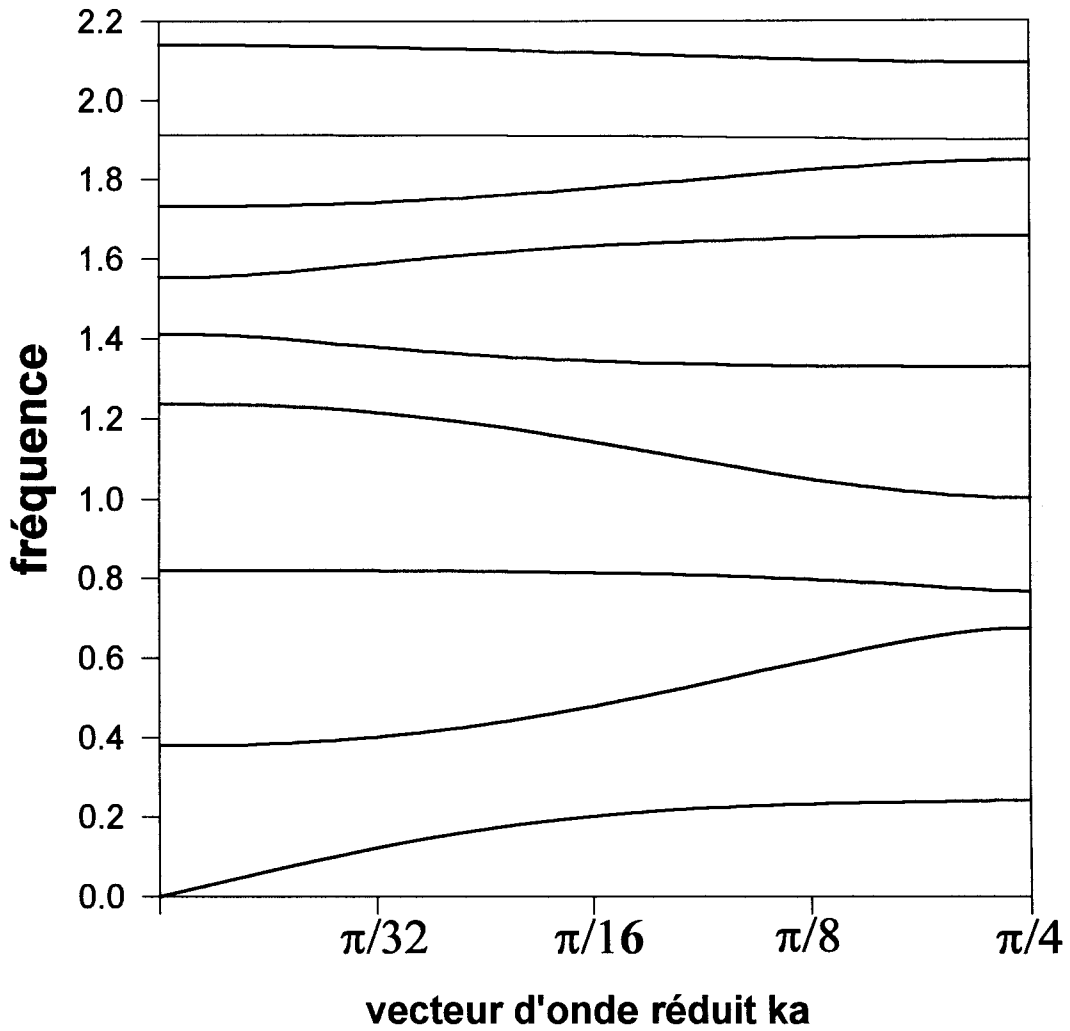


Figure IV-11 : Structure de bandes d'un film de polymères adsorbés sur le substrat unidimensionnel.

$$L=5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

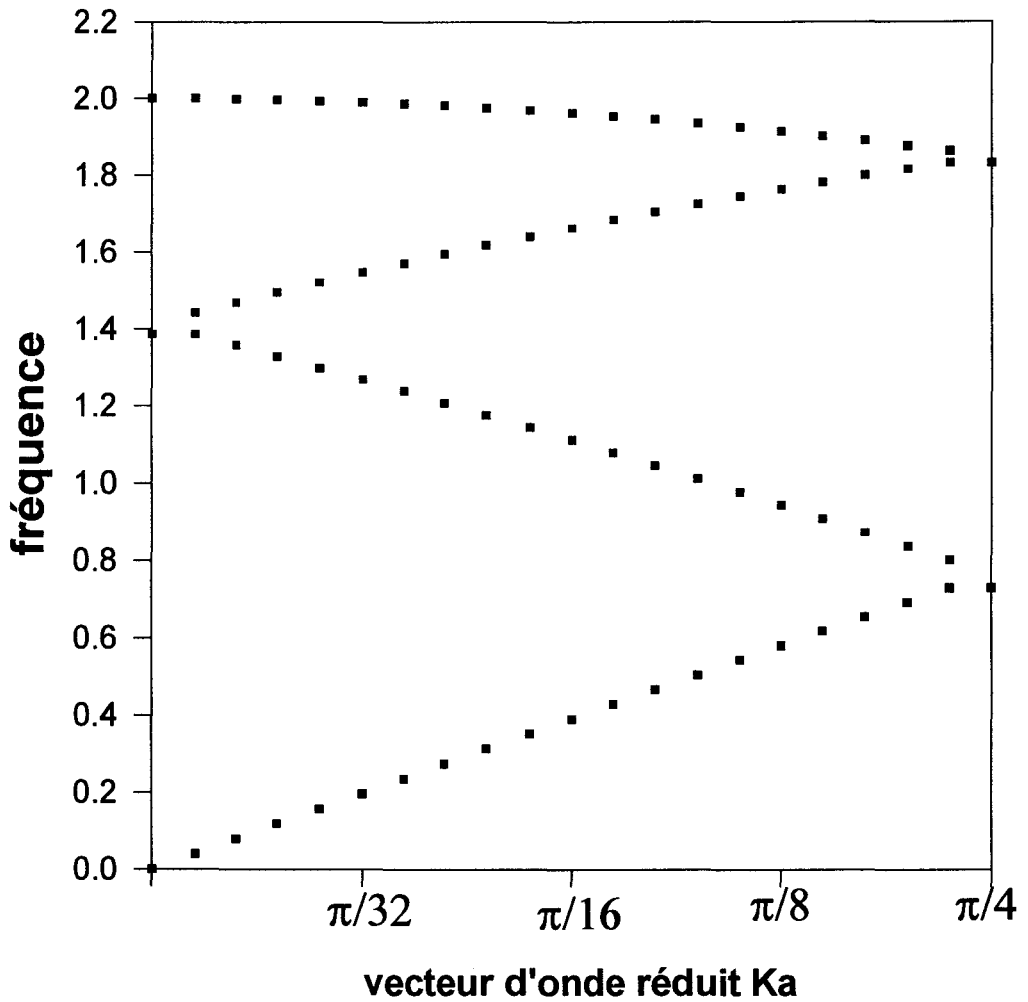


Figure IV-12 : Structure de bandes du système composé de la cellule unitaire découplée de la chaîne finie.

$$L=5, \beta_1 = \beta_2 = 1, \beta_I = 0 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

La figure (IV-12) présente la structure de bandes du système considéré lorsque le couplage est nul ($\beta_1=0$). Nous constatons que ces états correspondent au repliement des états propres associés à la chaîne infinie dans la zone de Brillouin réduite.

IV.2-2- Substrat tridimensionnel.

Ultérieurement, nous allons étudier le deuxième modèle de polymères adsorbés sur une surface. Ce modèle plus réaliste que le premier consiste en des polymères représentés par des chaînes finies adsorbés sur la surface [001] d'un cristal semi infini de structure cubique simple. Pour des raisons de simplicité, nous considérons que les masses du système adsorbé sont identiques (toutes les masses sont égales à l'unité), les constantes de force liant les atomes premiers voisins des chaînes finies, celles qui lient les atomes du substrat, ainsi que celle permettant le couplage entre les chaînes finies et le substrat sont identiques (toutes les constantes de force sont prises égales à l'unité).

La fonction réponse d'un cristal semi infini de structure cubique simple présentant une surface libre [001] en $n_3, n'_3 \leq 0$ s'écrit dans l'espace de Fourier à deux dimensions [5] :

$$g_{s2}(k_{//}, n_3, n'_3) = \frac{m_1}{\beta_1} \frac{t_1^{1+|n_3-n'_3|} + t_1^{2-(n_3+n'_3)}}{t_1^2 - 1}, \quad (\text{IV-2-17})$$

avec

$$\begin{aligned} t_1 &= \xi_1 - (\xi_1^2 - 1)^{\frac{1}{2}} && \text{pour} && \xi_1 > 1, \\ t_1 &= \xi_1 + (\xi_1^2 - 1)^{\frac{1}{2}} && \text{pour} && \xi_1 < -1 \\ \text{et} \quad t_1 &= \xi_1 + i(1 - \xi_1^2)^{\frac{1}{2}} && \text{pour} && -1 < \xi_1 < 1. \end{aligned}$$

où

$$\xi_1 = 3 - \cos(k_1 a_0) - \cos(k_2 a_0) - \frac{m_1 \omega^2}{2\beta_1},$$

a_0 est le paramètre cristallin, ω est la fréquence de vibration et n_3 désigne la côte des plans atomiques parallèles à la surface [001] suivant l'axe $(o\vec{Z})$.

Le fait de greffer un nombre limité de chaînes finies sur la surface libre du cristal détruit la périodicité parallèle à la surface, raison pour laquelle les calculs qui suivent doivent être effectués dans l'espace réel. Le substrat possède une périodicité de translation parallèle à la surface, ainsi pour se placer sur celle-ci nous prenons $n_3 = n'_3 = 0$ et grâce à un calcul numérique de la transformée de Fourier inverse de la fonction réponse $g_{S2}(k, 0, 0)$, nous obtenons la fonction de réponse $g_{S2}(n_1, n_2)$ entre deux sites de la surface. Le vecteur $\vec{n} = (n_1, n_2)$ relie les deux sites de la surface.

En se limitant à l'espace d'interface, la fonction de Green de référence est définie comme dans le cas du modèle précédant avec le substrat unidimensionnel. Quant aux opérateurs de couplage et de réponse d'interface, ils sont respectivement définis par les équations (IV-2-2) à (IV-2-4) comme ceux définis pour le système adsorbé du premier modèle.

IV.2.2.1- Calcul de la variation de la densité totale d'états [2]

Comme dans le cas des polymères adsorbés sur le substrat unidimensionnel, la variation de la densité d'états pour le système composé d'un certain nombre de polymères (chaînes finies composées de cinq atomes) adsorbés sur la surface libre du cristal semi infini est calculée à partir de l'équation (IV-2-5). La figure (IV-13) présente la variation de la densité d'états pour un seul polymère adsorbé le site (0,0) de la surface. Cette figure montre l'existence de cinq pics bien définis correspondant aux phonons résonants induits par les chaînes adsorbées. Il faut noter que ces pics sont

étroits par comparaison avec ceux de la variation de la densité d'états de la figure (IV-2). En adsorbant plusieurs polymères sur plusieurs sites voisins nous nous attendons à ce qu'il y ait plusieurs modes résonants résultant de l'interaction polymère/polymère par l'intermédiaire du substrat. L'adsorption de deux polymères aux sites (0,0) et (0,a) (figures IV-14 et IV-15) montre le dédoublement des pics de résonance. L'interaction entre les polymères adsorbés est à courte distance. Le dédoublement des pics de résonance devient à peine perceptible pour les distances entre polymères dépassant deux distances interatomiques. L'adsorption d'un nouveau polymère au site (0,2a) a pour effet d'approfondir l'enfoncement entre les deux pics. Comme l'interaction entre les polymères séparés par la distance 2a est faible, le troisième pic est non observable.

IV.2.2.2- Structure de bandes du système constitué d'un film de polymères adsorbés sur tous les sites de la surface libre du substrat [2].

Dans ce qui suit, le système composite étudié se compose d'un film de polymères adsorbés sur tous les sites de la surface libre du cristal semi-infini considéré comme substrat. Compte tenu de la symétrie de translation de la surface [001], nos calculs vont se restreindre à la cellule élémentaire composée d'un atome de surface sur lequel est greffée une chaîne finie représentant un polymère adsorbé.

La fonction réponse de référence \tilde{G}_s , ainsi que l'opérateur de couplage \tilde{V}_I sont respectivement définis par :

$$\tilde{G}_s = \begin{bmatrix} \tilde{g}_{s2}(k_{//}) & \tilde{0} \\ \tilde{0} & \tilde{g}_s \end{bmatrix} \text{ et } \tilde{V}_I = \begin{bmatrix} \frac{\beta_I}{m_1} & \frac{\beta_I}{m_1} \\ \frac{\beta_I}{m_1} & -\frac{\beta_I}{m_1} \end{bmatrix} \quad (\text{IV-2-18})$$

$\tilde{g}_{s2}(k_{//})$ est la fonction réponse en $n_3=n'_3=0$ associée au cristal semi infini de la structure cubique simple.

\tilde{g}_s est la fonction réponse associée à la chaîne finie (équation II-4-12).

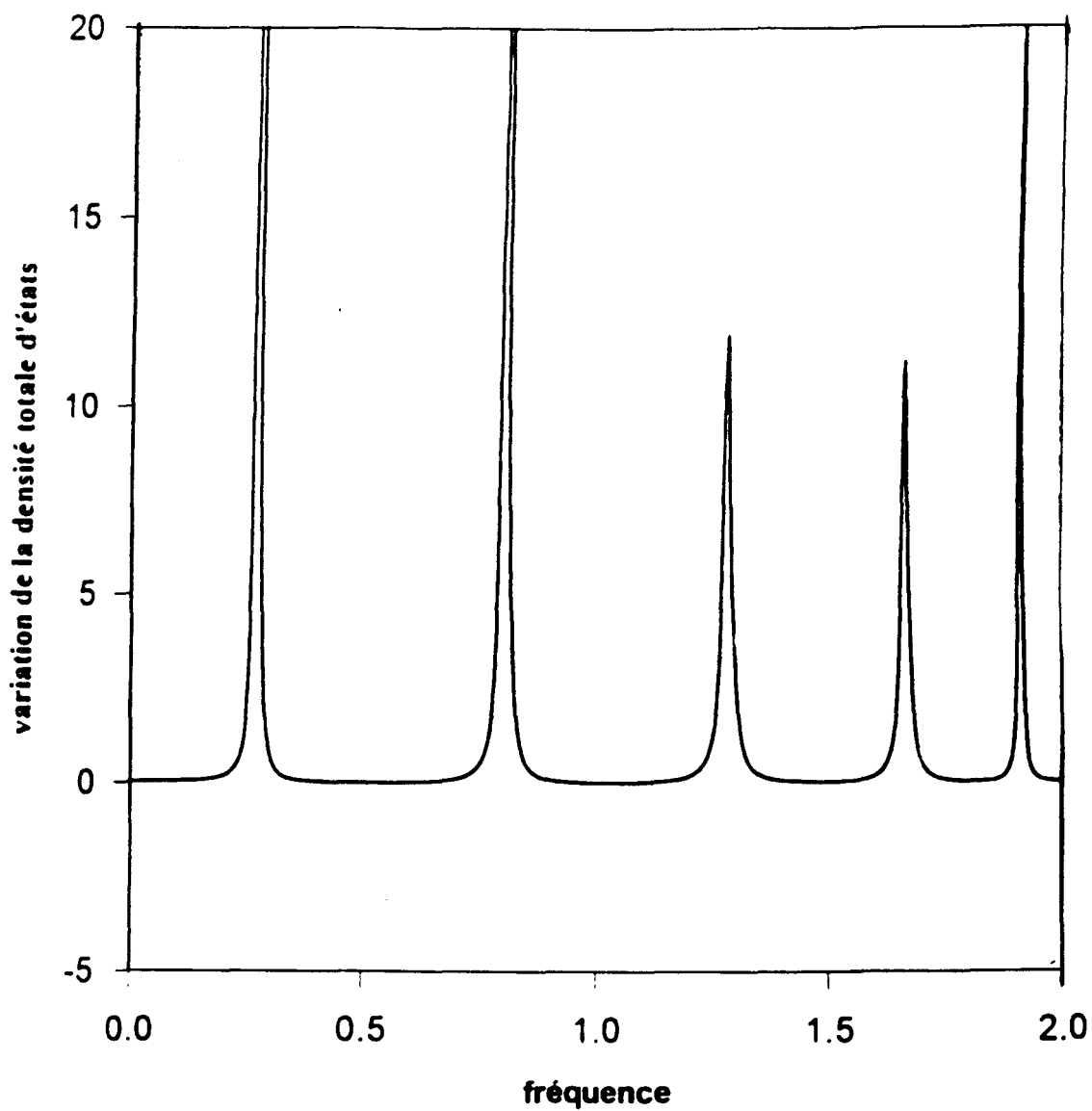


Figure IV-13 : Variation de la densité d'états en fonction des fréquences dans le cas du système composé d'un seul polymère adsorbé au site (0,0) de la surface libre du cristal semi-infini (substrat)

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

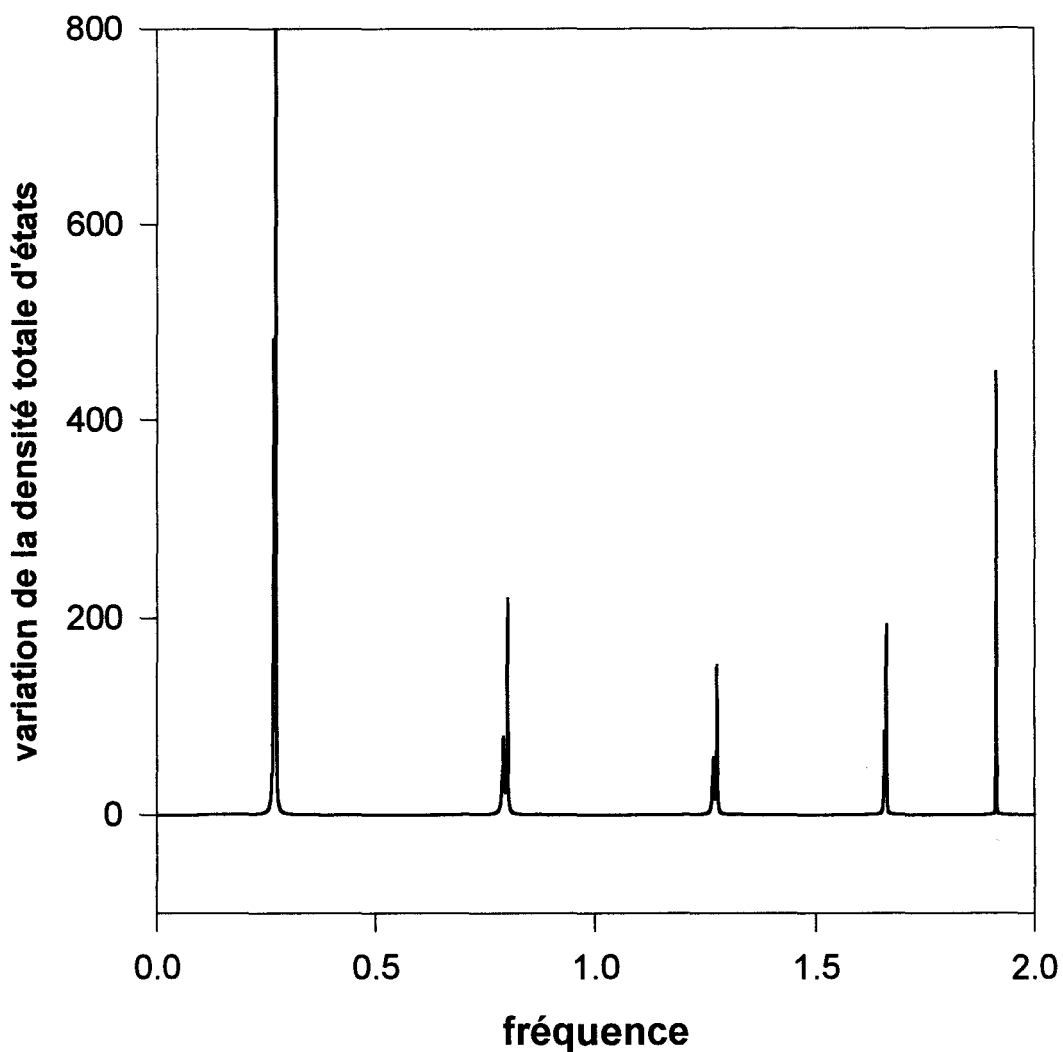


Figure IV-13 : Variation de la densité totale d'états en fonction des fréquences dans le cas du système composé de deux polymères adsorbés aux sites (0,0) et (0,a) de la surface libre du cristal semi-infini (substrat).

$$L'=5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

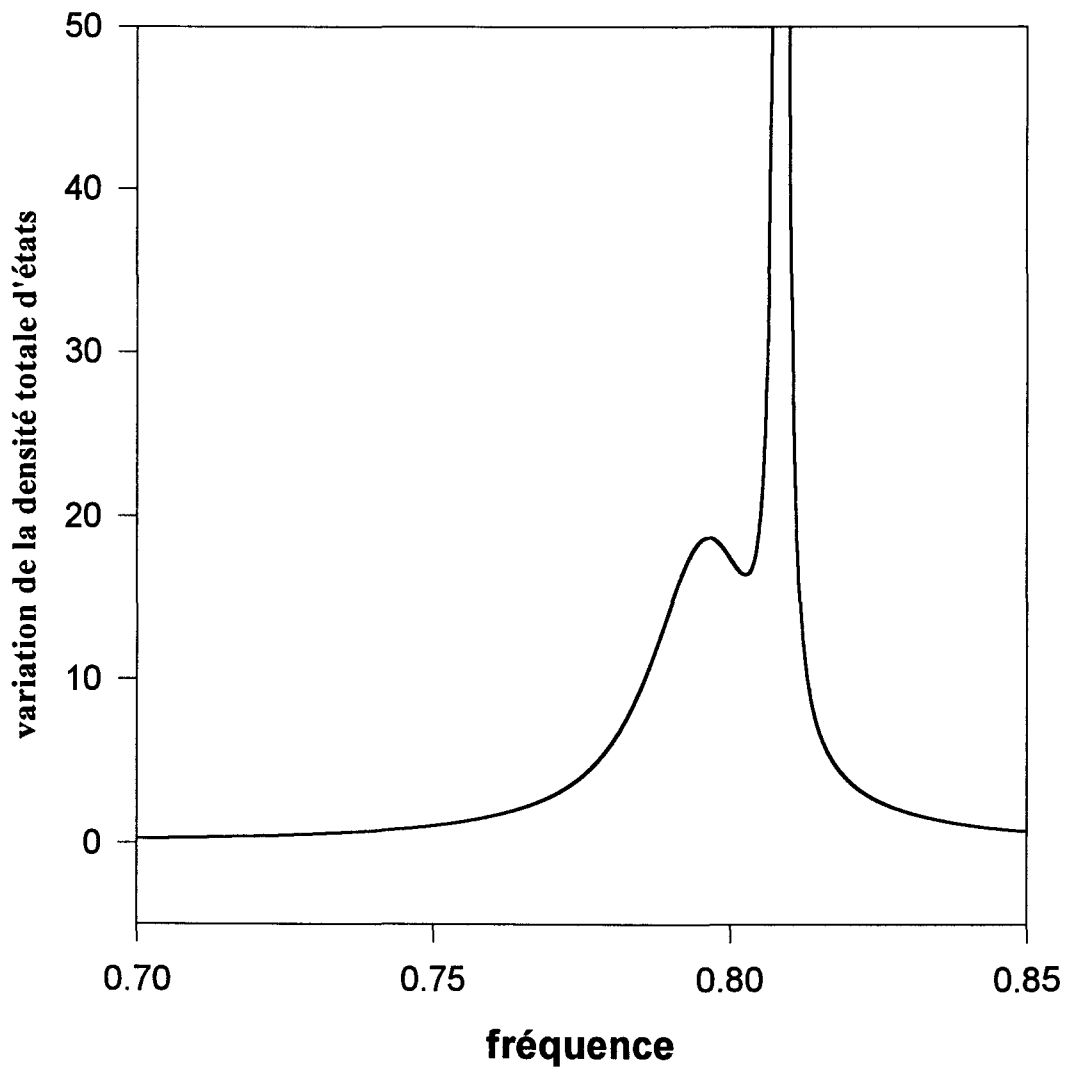


Figure IV-15 : Dédoublément du second pic de résonance dans le cas du système composé de deux polymères adsorbés aux sites $(0,0)$ et $(0,a)$ de la surface libre du cristal semi-infini (substrat).

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

La connaissance de la fonction réponse de référence et de l'opérateur de couplage permet la détermination de l'opérateur réponse d'interface défini par l'équation (IV-2-15). Le système sur lequel les calculs sont effectués peut être considéré comme un système composite semi-infini, par suite les états propres associés sont donnés en posant $\det(\tilde{\Delta}(m, m')) = 0$. ($\tilde{\Delta}(m, m')$ est la matrice définie par l'équation (II-2-15), c'est à dire la valeur donnée par l'équation :

$$1 - \frac{1}{2} \left[\frac{\beta_I}{\beta_1} \frac{e^{\frac{q_1}{2}}}{\text{sh}\left(\frac{q_1}{2}\right)} + \frac{\beta_I}{\beta_2} \frac{\text{ch}q_2 \left(L' - \frac{1}{2}\right)}{\text{sh}\left(\frac{q_2}{2}\right) \text{sh}(q_2 L')} \right] = 0, \quad (\text{IV-2-19})$$

où L' est la longueur de la chaîne finie.

L'équation (IV-2-19) nous permet d'obtenir à l'aide d'un calcul numérique une appréciation qualitative pour l'existence des états vibrationnels localisés associés au système composite considéré. La figure (IV-16) présente la structure de bandes dans la région de la zone de Brillouin correspondant à $k_{//} = (k_1, 0)$ pour un système adsorbé dont les masses des atomes des chaînes finies sont identiques à celles des atomes du substrat ($m_1 = m_2 = 1$) et dont les constantes de force sont toutes identiques ($\beta_1 = \beta_2 = \beta_I = \beta = 1$). Les vecteurs d'onde sont exprimés en l'unité de $\frac{1}{a}$, a est la distance entre atomes premiers voisins et les fréquences sont exprimées dans l'unité de $\sqrt{\frac{\beta_1}{m_1}}$. Les extrémités de la bande de volume du substrat sont tracées en trait discontinus. En dessous de la bande de volume apparaissent cinq branches associées aux polymères adsorbés et correspondant à des modes localisés. A l'extrémité de la zone de Brillouin où l'interaction avec la bande de volume est minimum, les fréquences des modes localisés sont proches de celles des modes résonants trouvés dans le cas du système composé d'un seul polymère adsorbé sur la surface libre du substrat. Une fois

que ces branches pénètrent à l'intérieur de la bande de volume du substrat, elles deviennent des modes résonants. Dans le but d'étudier si ces résonances ont des caractéristiques bien définies et peuvent être détectées expérimentalement, nous avons calculé la variation de la densité d'états pour $k_{//} = \left(\frac{\pi}{4a}, 0\right)$ (figure IV-17). Pour cette valeur de vecteur d'onde seulement trois branches interceptent la bande de volume, un tel comportement fait penser aux phonons résonants associés aux couches adsorbées sur un substrat [3]. Il faut remarquer que l'amplitude des pics augmente avec la fréquence. Des calculs de la variation de la densité d'états pour d'autres valeurs de vecteur d'onde $k_{//}$ montrent que les pics de résonance s'élargissent et deviennent mal définis lorsque leurs positions s'éloignent du bas de la bande de volume. Loin de cette limite, les modes résonants disparaissent à l'intérieur de la bande de volume.

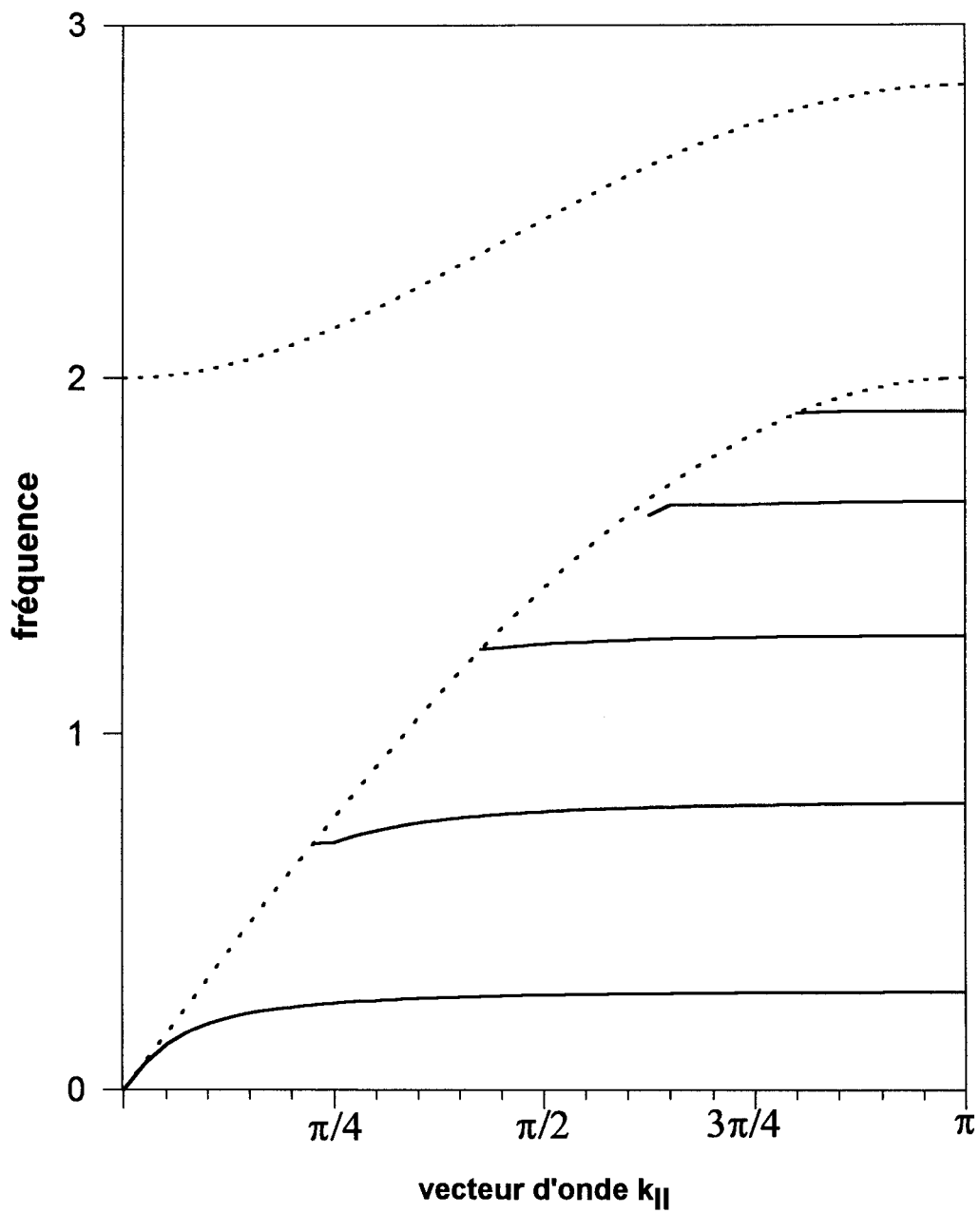


Figure IV-16 : Structure de bandes d'un film de polymères adsorbés sur tous les sites de la surface libre du cristal semi-infini considéré comme substrat.

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

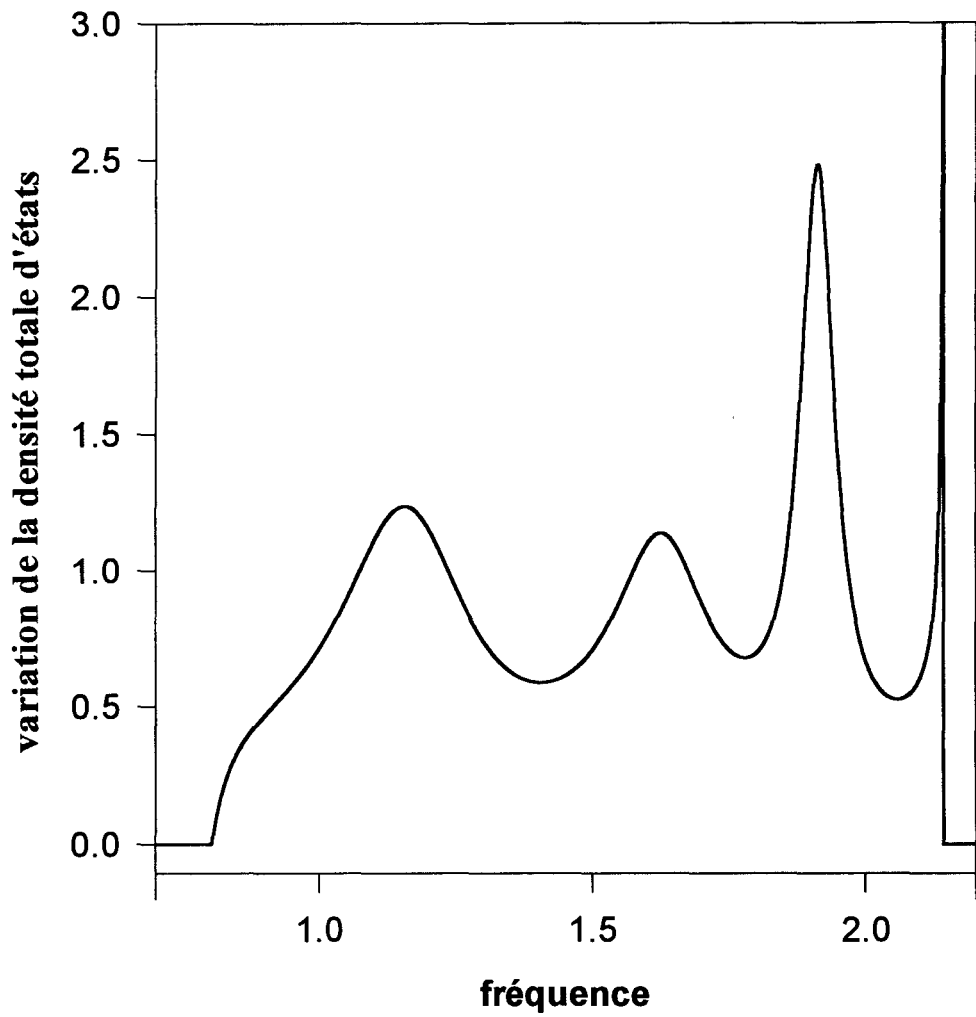


Figure IV-17 : Variation de la densité d'états en fonction de la fréquence pour le système adsorbé dans le cas où $k_{II} = \left(\frac{\pi}{4a}, 0\right)$.

$$L' = 5, \beta_1 = \beta_2 = \beta_I = 1 \text{ et } m_1 = m_2 = 1.$$

IV.3- Conclusion :

Nous avons vu que les propriétés vibrationnelles des polymères adsorbés sur une surface peuvent être étudiés grâce à deux modèles simples. Le premier modèle modélise la surface par un substrat unidimensionnel d'atomes, les polymères sont représentés par des chaînes finies d'atomes. L'adsorption des polymères conduit à l'apparition des modes vibrationnels résonants qui sont représentés par des pics bien définis dans la variation de la densité totale d'états. L'interaction entre les polymères adsorbés conduit à l'apparition de phonons anti-résonants et à la formation des bandes interdites dans la variation de la densité d'états. Le deuxième modèle est plus réaliste. Il considère que les polymères sont des chaînes finies d'atomes identiques greffées sur la surface [001] d'un cristal semi-infini de structure cubique simple considéré comme substrat. Comme dans le cas du premier modèle la variation de la densité d'états montre l'apparition de modes résonants dus à l'interaction entre les polymères et le substrat. Dans ce cas l'interaction entre les polymères est de courte portée. L'adsorption d'un film de polymères conduit à l'apparition des modes résonants qui restent des caractéristiques bien définies à l'intérieur de la bande de volume du substrat.

Bibliographie du chapitre IV

- [1] **G. G. Roberts**, in *Langmuir-Blodgett films*, edited by G. G. Roberts, (Plenum, New York 1990), p. 317.
- [2] **P. A. Deymier, E. Oumghar, J. O. Vasseur, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski**, Prog. Surf. Scien (à paraître).
- [3] **L. Dobrzynski, A. Akjouj, B. Sylla and B. Djafari-Rouhani**, Acta. Phy. Pol. A 81, 85 (1992).
- [4] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 180, 489 (1987).
- [5] **B. Sylla**, Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille I, France (1989); **A. Akjouj, B. Sylla and L. Dobrzynski**, Ann. Phys. Fr. 18, 363 (1993).
- [6] **L. Dobrzynski, V. R. Velasco and F. Garcia Moliner**, Phys. Rev. B, 35, 5872-5875 (1987).
- [7] **W. prod, Z. Shao and C. S. Lent** : Appl. Phys. Lett 61, 1350 (1992).
- [8] **J. O. Vasseur, P. A. Deymier, L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani and A. Akjouj**, Phys. Rev. B 55, 15 Avril (1997).

CHAPITRE V

Phonons résonants dans les couches adsorbées

V.1- Introduction :

Les propriétés structurales et dynamiques des surfaces métalliques sont souvent dominées par le comportement des électrons et par leur influence sur le réseau des cations. Pour plusieurs études, il convient de construire des modèles simples dans lesquels les interactions microscopiques compliquées sont représentées par un nombre de paramètres capables de décrire les degrés de liberté appropriés au type donné de l'expérience.

La théorie dynamique harmonique de Born Von Karman a été utilisée comme base pour l'étude des surfaces métalliques [1-3]. Dans ce type de théorie toutes les interactions sont réduites à des constantes de force décrivant l'augmentation de l'énergie potentielle lorsque les atomes sont en mouvement autour de leur position d'équilibre.

Une grande majorité des calculs concernant les réseaux dynamiques et qui visent la modélisation des surfaces propres sont faits grâce à la méthode des lames minces [3-5]. Récemment, des travaux utilisant une approche en fonctions de Green basée sur la théorie des réponses d'interface ont été publiés [6-9]. La présence des surfaces propres ou des couches adsorbées modifie les propriétés dynamiques du cristal par l'introduction de phonons localisés correspondant à des fréquences qui se situent à l'extérieur des bandes de volume et par la modification du mouvement vibrationnel des atomes pour des fréquences situées à l'intérieur des bandes de volume. Dans l'approximation harmonique ce dernier effet est également dû à un mélange d'ondes résultant de la destruction de la périodicité de la symétrie de translation du système dans la direction perpendiculaire à la surface. Comme conséquence [10], pour un

système semi-infini avec une surface propre ou pour un système composé d'un cristal semi-infini avec des couches adsorbées, nous constatons que la densité d'état locale des atomes appartenant aux couches qui sont situées près de la surface est différente de celle des atomes qui appartiennent aux couches se trouvant dans le volume du cristal. Ces caractéristiques, sont maintenant étudiées par des méthodes de diffusion telles que; la diffusion inélastiques des électrons [11] et des atomes d'hélium [12-18].

Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser aux résonances dans un cristal semi-infini avec une surface propre et dans le système composé des couches adsorbées sur un cristal semi-infini. Nous commencerons ce chapitre par un rappel du modèle des constantes de force pour le cristal cubique centré. Nous présenterons également dans ce chapitre des rappels concernant la méthode du calcul des fonctions de Green pour un système infini avec des interactions harmoniques étendues aux seconds voisins, pour un cristal semi-infini, ainsi que pour le système composé du cristal semi-infini et des couches adsorbées. Nous finirons par la présentation d'une méthode permettant le calcul des densités d'états locales pour les systèmes signalés.

Comme exemple réel, nous étudierons la surface propre (001) du fer (Fe) et le système composé des couches de Tungstène (W) adsorbées sur la surface (001) du fer.

V.2- Modèle des constantes de force pour le cristal cubique centré

Dans l'approximation harmonique, l'énergie potentielle d'un cristal composé d'atomes interagissant par paire entre eux, par des forces centrales est donnée par l'expression :

$$V = V_0 + \sum_{j \neq i} \alpha_{ij} (dR_{ij}) + \frac{1}{2} \beta_{ij} (dR_{ij})^2 + \dots \quad (\text{V-2-1})$$

où V_0 est une constante indépendante de la distance atomique, dR_{ij} est la variation de la distance entre les atomes i et j , et α_{ij} et β_{ij} correspondent respectivement aux constantes des termes du premier ordre, dans ce développement en série.

Nous ne retenons que les interactions harmoniques entre les atomes premiers et seconds voisins selon [5,19]. En choisissant un système de coordonnées cartésiennes avec des axes parallèles à ceux de la maille élémentaire d'un cristal cubique centré et en prenant les déplacements des atomes autour de leur position d'équilibre (\vec{r}) suivant les trois axes comme suit :

$$u_i(\vec{r}) = u_i(k, \omega) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \text{ pour } i = 1, 2$$

$$\text{et } u_3(\vec{r}) = -iu_3(\vec{r}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)},$$
(V-2-2)

nous obtenons la matrice dynamique d'un cristal infini de structure cubique centré définie par

$$D(k, \omega) = \tilde{D}(k) - I\omega^2$$

$$D(k, \omega) = \begin{bmatrix} \Lambda_1(1-C_1C_2C_3) + \Lambda_2(1-C_1) + & (\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1S_2C_3 & i(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1C_2S_3 \\ \Lambda_3(2-C_2-C_3) - \omega^2 & \Lambda_1(1-C_1C_2C_3) + \Lambda_2(1-C_2) + & i(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)C_1S_2S_3 \\ (\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1S_2C_3 & \Lambda_3(2-C_1-C_3) - \omega^2 & \\ -i(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1C_2S_3 & -i(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)C_1S_2S_3 & -i \left[\begin{array}{l} \Lambda_1(1-C_1C_2C_3) + \Lambda_2(1-C_3) + \\ \Lambda_3(2-C_1-C_3) - \omega^2 \end{array} \right] \end{bmatrix}$$
(V-2-3)

où

$$C_i = \cos\left(\frac{k_i a}{2}\right), S_i = \sin\left(\frac{k_i a}{2}\right), C'_i = \cos(k_i a), i = 1, 2, 3$$

$$\Lambda_1 = \frac{8\beta_1 - 16\lambda}{3m}, \Lambda_2 = \frac{2\beta_2}{m}, \Lambda_3 = \frac{2\lambda}{m} \text{ et } m \text{ est la masse des atomes du cristal.}$$

La définition de λ , β_1 et β_2 , ainsi que les détails de calcul de la matrice dynamique $\tilde{D}(k, \omega)$ sont donnés en appendice III.

L'étude des surfaces planes et interfaces perpendiculaires à la direction cristallographique (001) nécessite la connaissance de la matrice d'énergie $H_0(k_1, k_3, \ell_3, \ell'_3, \omega)$; transformée de Fourier de la matrice dynamique $\tilde{D}(k, \omega)$. k_1 et k_2 sont les composantes du vecteur d'onde parallèle à la surface. ℓ_3 et ℓ'_3 sont les indices des plans atomiques parallèles au plan (0 0 1). La matrice d'énergie sous sa forme explicite $H_0(k_{//}, \Delta\ell_3, \omega)$ est déduite à partir de la relation

$$D_{ij}(k_{//}, \omega) = \sum_{\Delta \ell_3 = -2}^2 H_{0ij}(k_{//}, \Delta \ell_3, \omega) e^{ik_3 \frac{a}{2}} \quad (\text{V-2-4})$$

où $\Delta \ell_3 = \ell_3 - \ell'_3$ et $k_{//} = (k_1, k_2)$ vecteur d'onde parallèle à la surface (0 0 1). Les détails de calcul de la matrice d'énergie $H_0(k_{//}, \Delta \ell_3, \omega)$ sont donnés en appendice III.

V.3- Fonction de Green de volume d'un cristal infini de structure cubique centrée [20-21]

Pour un cristal infini de structure cubique centrée, la fonction de Green de volume est l'inverse de la matrice dynamique $\vec{D}(k, \omega)$,

$$\vec{D}(k, \omega) \cdot \vec{G}(k, \omega) = \vec{I}. \quad (\text{V-3-1})$$

Il vient alors que

$$\vec{G}(k, \omega) = \frac{1}{\det(\vec{D}(k, \omega))} \begin{bmatrix} A_{11}(k, \omega) & A_{12}(k, \omega) & A_{13}(k, \omega) \\ A_{21}(k, \omega) & A_{22}(k, \omega) & A_{23}(k, \omega) \\ A_{31}(k, \omega) & A_{32}(k, \omega) & A_{33}(k, \omega) \end{bmatrix}.$$

Autrement dit, chaque élément de la fonction réponse $\vec{G}(k, \omega)$ s'écrit sous l'expression

$$G_{ii'}(k, \omega) = \frac{1}{\det(\vec{D}(k, \omega))} A_{i'i}(k, \omega). \quad (\text{V-3-2})$$

$A_{i'i}(k, \omega)$ est le cofacteur obtenu en multipliant par $(-1)^{i+i'}$ le déterminant de la matrice d'ordre (2X2) obtenue en éliminant la $i^{\text{ème}}$ ligne et la $i^{\text{ème}}$ colonne de $\vec{D}(k, \omega)$. L'expression explicite $G_{0ii'}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega)$ de élément matriciel est obtenue à partir de la relation

$$G_{0ii'}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{A_{i'i}(k, \omega)}{\det(\vec{D}(k, \omega))} e^{i(\ell_3 - \ell'_3)\theta} d\theta \quad (\text{V-3-3})$$

avec

$$\theta = \frac{k_3 a}{2}.$$

En posant $z = e^{i\theta}$, $G_{0ii'}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega)$ s'écrit

$$G_{0ii}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{A_{ii}(k_{//}, z, \omega) z^{\ell_3 - \ell'_3 - 1}}{\det(\tilde{D}(k_{//}, z, \omega))} dz. \quad (\text{V-3-4})$$

Dans le plan des variables complexes, le contour fermé est le cercle centré à l'origine $z=0$ et de rayon l'unité. La forme explicite de la matrice \tilde{D} et la relation (V-1-4) nous permettent de déduire que le déterminant $\det(\tilde{D}(k_{//}, z, \omega))$ est une fonction symétrique de la variable z , c'est à dire que les puissances z^n et z^{-n} se présentent dans cette fonction avec les mêmes coefficients. Soit z^M la puissance la plus élevée de la variable z dans la fonction $\det(\tilde{D}(k_{//}, z, \omega))$, en multipliant cette fonction par z^M le polynôme de la variable z $P(k_{//}, z, \omega) = z^M \det(\tilde{D}(k_{//}, z, \omega))$. L'équation (V-2-4) peut alors s'écrire sous la forme

$$G_{0ii}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{A_{ii}(k_{//}, z, \omega) z^{\ell_3 - \ell'_3 + M - 1}}{P(k_{//}, z, \omega)} dz \quad (\text{V-3-5})$$

La valeur de l'intégrale ci dessus est donnée par la somme des résidus de la fonction à intégrer aux pôles contenus dans le cercle de centre $O(0,0)$ et de rayon unité dans le plan complexe. Une fois que le polynôme $P(k_{//}, z, \omega)$ est symétrique, M racines z_n , $n=1, \dots, M$ ont leur module inférieur à l'unité ; $|z_n| < 1$ les autres racines sont $z_{n+M} = z_n^{-1}$. Ainsi, la fonction de Green pour le cristal infini s'écrit par

$$G_{0ii}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) = \frac{1}{B} \sum_{n=1}^M \frac{A_{ii}(k_{//}, z_n, \omega) z_n^{\ell_3 - \ell'_3 + M}}{(z_n^2 - 1) \prod_{m=1, m \neq n}^M [(z_n - z_m)(z_n - z_m^{-1})]}, \quad (\text{V-3-6})$$

B est le coefficient associé à la puissance la plus élevée de la variable z .

Pour chaque $n=1, \dots, M$, la condition $|z_n| < 1$ définit les régions des fréquences situées à l'extérieur des bandes de volume. Pour une fréquence ω le nombre des racines telles que $|z_n| = 1$ donne le nombre des bandes de volume. Pour chaque racine z_n telle que $|z_n| = 1$, la quantité

$$\eta_{ii}^{(n)}(k_{//}, \ell_3, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{0ii}^{(n)}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega), \quad (\text{V-3-7})$$

représente la contribution à la densité locale d'états pour une direction donnée i du déplacement atomique le long du cristal infini, il faut noter que les densités locales d'états sont identiques pour chaque plan atomique ℓ_3 .

V.4- Fonction de Green pour un cristal semi-infini de structure cubique centré [22]

Dans le présent modèle, la perturbation introduite à la matrice d'énergie définie en appendice III par la création de la surface propre (001) au plan atomique $\ell_3 = 1$ est traduite par l'opérateur de clivage $\vec{V}_0(k_{//}, \ell_3, \ell'_3)$ définie par :

$$\begin{aligned} V_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3) &= -H_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) \text{ pour } \ell_3 = 1, 2 \text{ et } \ell'_3 = -1, 0 \quad \forall i, j = 1, 2, 3, \\ V_{011}(k_{//}, 1, 1) &= V_{022}(k_{//}, 1, 1) = -\frac{\Lambda_1 + \Lambda_3}{2} \quad , \\ V_{033}(k_{//}, 1, 1) &= -\frac{\Lambda_1 + \Lambda_2}{2} \quad , \\ V_{011}(k_{//}, 2, 2) &= V_{022}(k_{//}, 2, 2) = -\frac{\Lambda_3}{2} \quad , \\ V_{033}(k_{//}, 2, 2) &= -\frac{\Lambda_2}{2} \quad . \end{aligned}$$

Les détails de calcul de la matrice d'énergie $h_0(k_{//}, \Delta\ell_3, \omega)$ associée au cristal semi-infini avec surface propre (001) au plan atomique $\ell_3 = 1$, ainsi que ceux de l'opérateur de clivage $\vec{V}_0(k_{//}, \ell_3, \ell'_3)$ sont données en appendice III.

La fonction réponse $g_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell_3, \omega)$ associée au cristal semi-infini avec une surface propre est définie par la relation

$$\sum_{\ell_3''=1}^{+\infty} \sum_{i''=1}^3 g_{0i''j''}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) h_{0i''i'}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) = \delta_{\ell_3 \ell'_3} \delta_{i' i''} \quad (\text{V-4-1})$$

Selon la théorie des réponses d'interface, l'équation ci dessus s'écrit sous l'expression suivante [22]

$$g_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) = G_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) - \sum_{\ell_3, \ell'_3=1}^2 \sum_{i''=1}^3 G_{0i''}(k_{//}, \ell_3, \ell''_3, \omega) \Delta_{i''}^{-1}(k_{//}, \ell_3, \ell''_3, \omega) A_{0i''j}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega), \quad (\text{V-4-2})$$

où

$$A_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) = \sum_{\ell_3=-1}^2 \sum_{i'=1}^3 V_{0i'}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3) G_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega), \quad (\text{V-4-3})$$

et

$$\Delta_{ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) = \delta_{ij} \delta_{\ell_3 \ell'_3} + A_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega), \quad \ell_3, \ell'_3 = 1, 2 \text{ et } i, j = 1, 2, 3. \quad (\text{V-4-4})$$

Dans l'équation (V-4-3) la sommation sur les plans atomiques est étendue à tous les éléments $V_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3)$ non nuls.

V.5- Fonction réponse du système composé de couches adsorbées sur un cristal semi-infini

Considérons le système composé de couches atomiques déposées sur la surface libre du cristal semi-infini reste similaire, mais pour tenir compte des changements de masses et des constantes de force dans la région occupée par les couches atomiques, il faut ajouter à l'opérateur de clivage des termes $V_{\alpha ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3)$. En effet, lorsque les n premiers plans atomiques sont remplacés par n couches adsorbées, nous construisons l'opérateur de perturbation

$$V_{\alpha ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3) \quad \ell_3, \ell'_3 = 1, 2, \dots, n+2.$$

qui donne la différence entre les équations du mouvement avec et sans couche adsorbée. en effet dans les équations du mouvement avec couche adsorbée, la constante de force Λ_i ($i=1,2,3$) du substrat sera remplacée par la constante Λ_i^α associée aux couches adsorbées dont les indices ℓ_3 et ℓ'_3 sont tels que $\ell_3, \ell'_3 = 1, 2, \dots, n-2$; alors que pour les couches atomiques dont les indices ℓ_3 et ℓ'_3 sont tels que $\ell_3, \ell'_3 = n-2, n-1, \dots, n+2, \dots$ pour tenir compte des interactions entre les couches adsorbées et les plans atomiques du substrat, la constante de force Λ_i ($i=1,2,3$) est remplacée par $\Lambda_i^n = \frac{\Lambda_i + \Lambda_i^\alpha}{2}$. Compte tenu de ceci, l'opérateur de perturbation complet est défini par la relation

$$V_{ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3) = V_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3) + V_{\alpha ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3), \quad (\text{V-5-1})$$

dont les éléments matriciels non nuls sont définis pour $\ell_3 = 1, 2, \dots, n$ et $\ell'_3 = -1, 0, \dots, n+2$. Par analogie avec l'équation (V-4-2) la fonction réponse du système composé de n couches adsorbées sur la surface libre du cristal semi-infini est donnée par

$$g_{ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) = G_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) - \sum_{\ell_3, \ell_3''=1}^{n+2} \sum_{i', i''=1}^3 G_{0i'i''}(k_{//}, \ell_3, \ell_3'', \omega) \Delta_{i'i''}^{-1}(k_{//}, \ell_3, \ell_3'', \omega) A(k_{//}, \ell_3''', \ell'_3). \quad (\text{V-5-2})$$

où dans $\vec{\Delta}$ et \vec{A} , \vec{V}_0 est remplacé par le \vec{V} donné par l'équation (V-5-1). La densité d'état locale correspondante devient

$$\eta_{ii}(k_{//}, \ell_3, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} g_{ii}(k_{//}, \ell_3, \ell_3, \omega), \quad (\text{V-5-3})$$

fonction de l'indice ℓ_3 (profondeur dans le système) des plans atomiques.

V.6- Application à la surface (001) du fer sur laquelle sont adsorbées des couches atomiques de tungstène [

Les fréquences des excitations élémentaires dans les systèmes harmoniques sont définies par les singularités des fonctions de Green associées à ces systèmes. Dans le cas des systèmes avec une surface propre ou avec des interfaces dont les fonctions de Green correspondantes sont respectivement données par les équations (V-4-2) et (V-5-2), nous pouvons distinguer deux types de singularités. En effet, les pôles de la fonction de Green associée à un système infini (équation V-3-6) définissent les singularités de la densité d'états dans le volume du système, alors que pour un système avec une surface propre ou avec des couches adsorbées les singularités de la fonction de Green correspondantes apparaissent lorsque la matrice $\vec{\Delta}$ est singulière, ce sont les modes localisés.

La structure des bandes de volume et la dispersion des phonons localisés dans le cas de la surface propre (001) du fer ou dans les cas correspondant à une couche ou trois couches

de tungstène adsorbées sur la surface (0 0 1) du fer sont obtenues [22] en utilisant des constantes de force ajustées à des courbes de dispersion expérimentales pour le fer de structure cubique centrée [18]. Les configurations de ces trois systèmes signalés sont respectivement représentées sur la figure (V-1) et (V-2) par une coupe perpendiculaire à la surface (0 0 1) du fer; donc suivant l'axe ($O\vec{z}$).

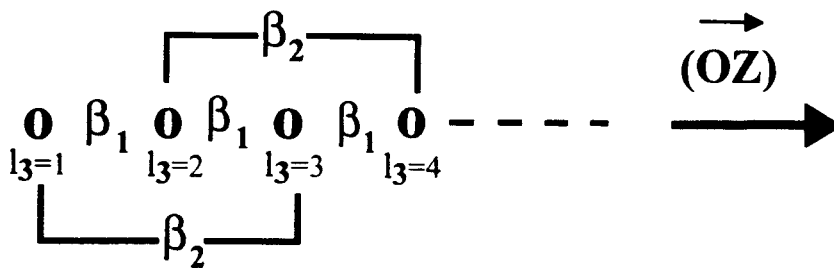


Figure V-1-a : Représentation de la configuration de cristal semi infini considéré comme substrat par une coupe perpendiculaire à la surface propre (suivant l'axe ($O\vec{z}$)), il s'agit du fer de structure cubique centrée avec la surface propre (0 0 1).

Figure V-1.

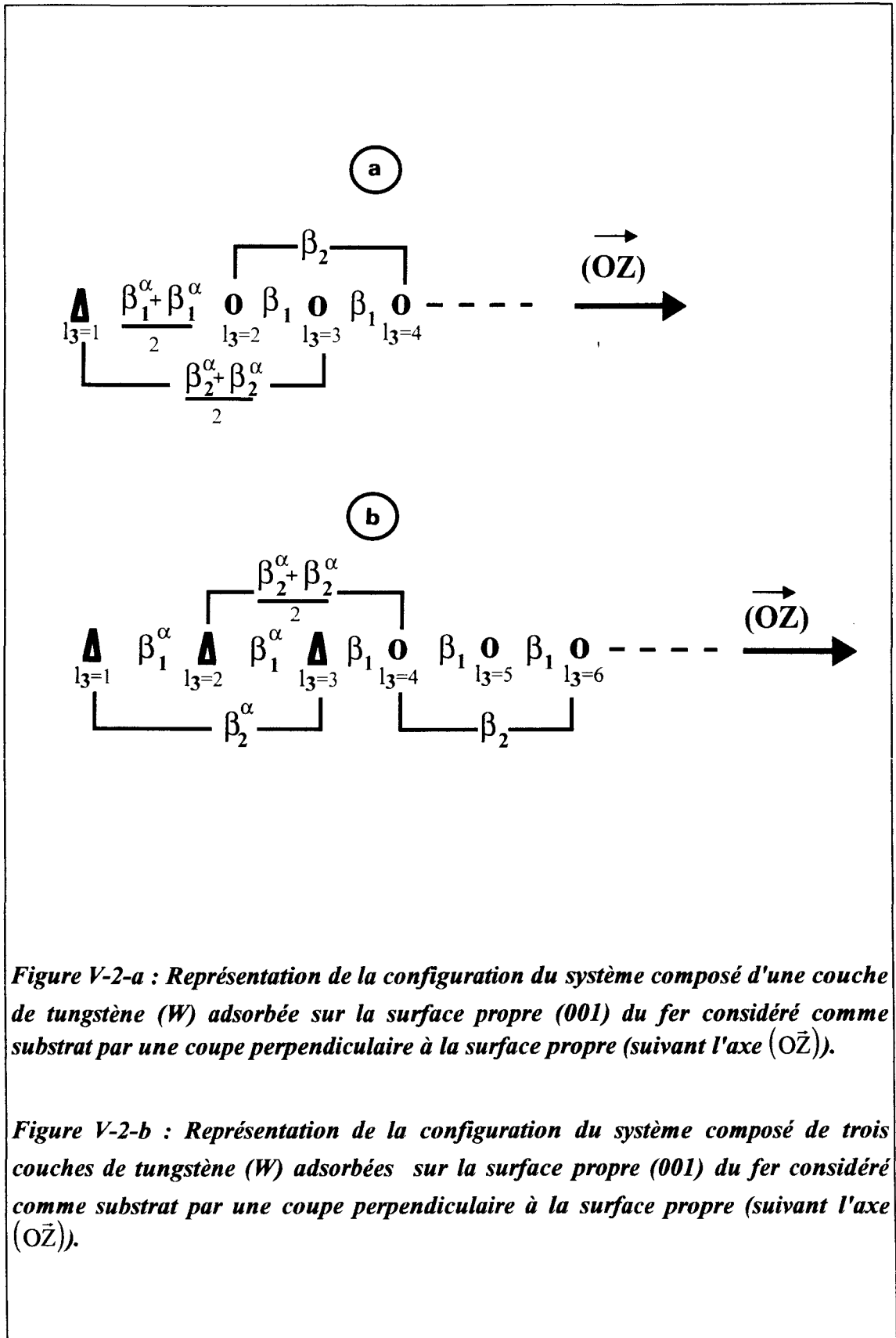


Figure V-2.

Ultérieurement, nous allons nous intéresser aux résonances dans ces trois systèmes, raison pour laquelle nous avons calculé dans un premier temps la densité d'état locale (équation V-5-3) en fonction des fréquences de vibration situées à l'intérieur de la bande de volume au point $k_{//} = \left(k_x = \frac{0.7}{a}, k_y = \frac{0.05}{a} \right)$ de la zone de Brillouin à deux dimensions, a étant le paramètre du réseau.

La figure (V-3) présente la structure des bandes de volume et la dispersion des phonons à l'intérieur de la zone de Brillouin à deux dimensions représentée par la figure (V-9) pour le Fer avec la surface propre (001). Les courbes tracées en lignes épaisses représentent les extrémités des bandes de volume; régions pour lesquelles la plus petite valeur des racines z_n a son module égal à l'unité. Les courbes tracées à l'intérieur des bandes de volume en traits discontinus indiquent les singularités de la densité d'état, alors que les lignes tracées à l'extérieur des bandes de volume correspondent aux fréquences des phonons de surface solutions de l'équation

$$\det \Delta(k_{//}, \omega) = 0$$

Les éléments $\Delta_{ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3)$ de la matrice $\Delta(k_{//}, \omega)$ sont définis à partir de l'équation (V-4-4). L'équation (V-5-3) nous permet de considérer que les densités d'états locales dépendent de façon importante de la position des plans atomiques sur lesquels elles sont calculées. La figure (V-4) présente la variation de la densité locale d'états $\eta_{ii}(k_{//}, \ell_3, \omega)$ ($i=x, y$ et z) en fonction de la fréquence à l'intérieur des bandes de volume pour le premier plan atomique du fer ($\ell_3 = 1$, courbes tracées en trait continu) et pour le deuxième plan atomique ($\ell_3 = 2$, courbes tracées en traits discontinus). Les courbes tracées en pointillés présentent également les variations de la densité locale en fonction des fréquences de vibration suivant les trois directions pour un plan atomique situé dans le volume du cristal (loin de la surface). Les pics qui apparaissent dans ces variations correspondent aux singularités de Van Hove; ce sont des singularités correspondant à une divergence de la densité totale d'états. Nous notons que les

densités dans le premier et deuxième plan du réseau sont différentes. Le maximum observé dans la variation de $\eta_{yy}(k_{//}, 1, \omega)$ (variation correspondant au premier plan du réseau dans la direction (\vec{y})) qui coïncide avec le bas de la bande de volume est considérée comme trace d'une onde acoustique pseudo localisée de polarisation transverse. Dans la variation de $\eta_{zz}(k_{//}, 1, \omega)$, nous constatons une anti-résonance, défaut de la densité d'état locale à la fréquence $\omega = 4.02 \times 10^{12}$ Hz. Les maximas de la densité d'état sont appelés des résonances et les minimas des anti-résonances et nous pensons que cette fréquence a le comportement d'une anti-résonance [20].

L'adsorption d'une couche de tungstène sur la surface (0 0 1) du Fer conduit à la modification du spectre de phonons représentée représenté sur la figure (V-3). Ces modifications sont représentées sur la figure (V-5). Comme la masse atomique de tungstène est supérieure à celle du Fer, nous constatons un déplacement des états de phonons de surface vers les basses fréquences. La figure (V-6) correspond au système composé d'une couche de tungstène adsorbée sur la surface (0 0 1) du fer. Les courbes tracées en trait continu présentent la densité locale d'états suivant les trois directions de l'espace pour une seule couche de tungstène adsorbée, alors que les courbes tracées en traits discontinus et en pointillés correspondent respectivement à la densité locale $\eta_{ii}(k_{//}, \ell_3, \omega)$ ($i=x, y$ et z) pour le premier plan atomique du substrat et pour un plan situé dans le volume du cristal de fer. Nous constatons que malgré un déplacement de la densité locale d'états vers les basses fréquences à cause de la grande masse atomique de tungstène, la variation de la densité locale dans le cas d'une couche de tungstène adsorbée sur la surface (0 0 1) du fer présente des caractéristiques similaires à celle observée dans la variation de la densité locale de la figure (V-4). En adsorbant trois couches de tungstène sur la surface (0 0 1) du fer, nous constatons une augmentations des états de phonons de surface avec un déplacement vers les basses fréquences (figure V-7). La figure (V-8) présente la densité locale $\eta_{ii}(k_{//}, \ell_3, \omega)$ ($i=x, y$ et z) en fonction des fréquences de vibration au point $k_{//} = \left(k_x = \frac{0.7}{a}, k_y = \frac{0.05}{a} \right)$, nous remarquons l'existence d'une structure riche en résonance.

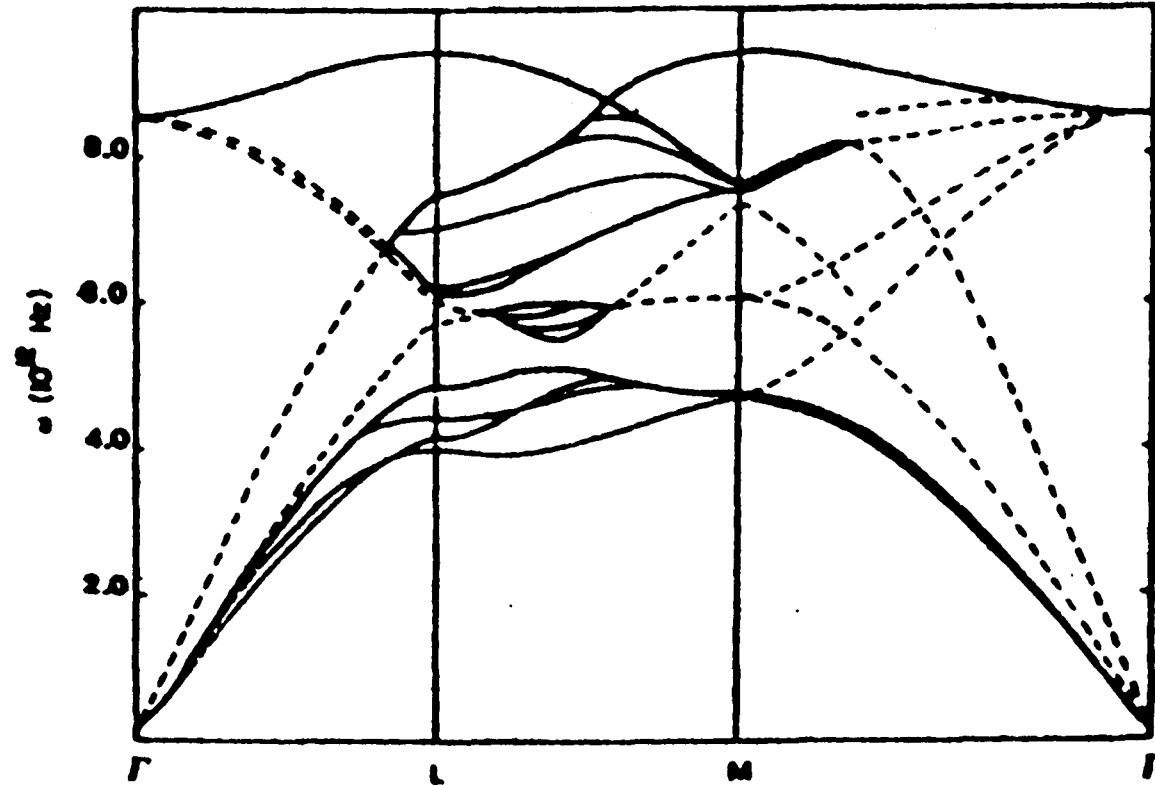


Figure V-3 : Structure des bandes de volume et dispersion des phonons localisés à l'intérieur de la zone de Brillouin à deux dimensions pour le Fer avec une surface propre (001).

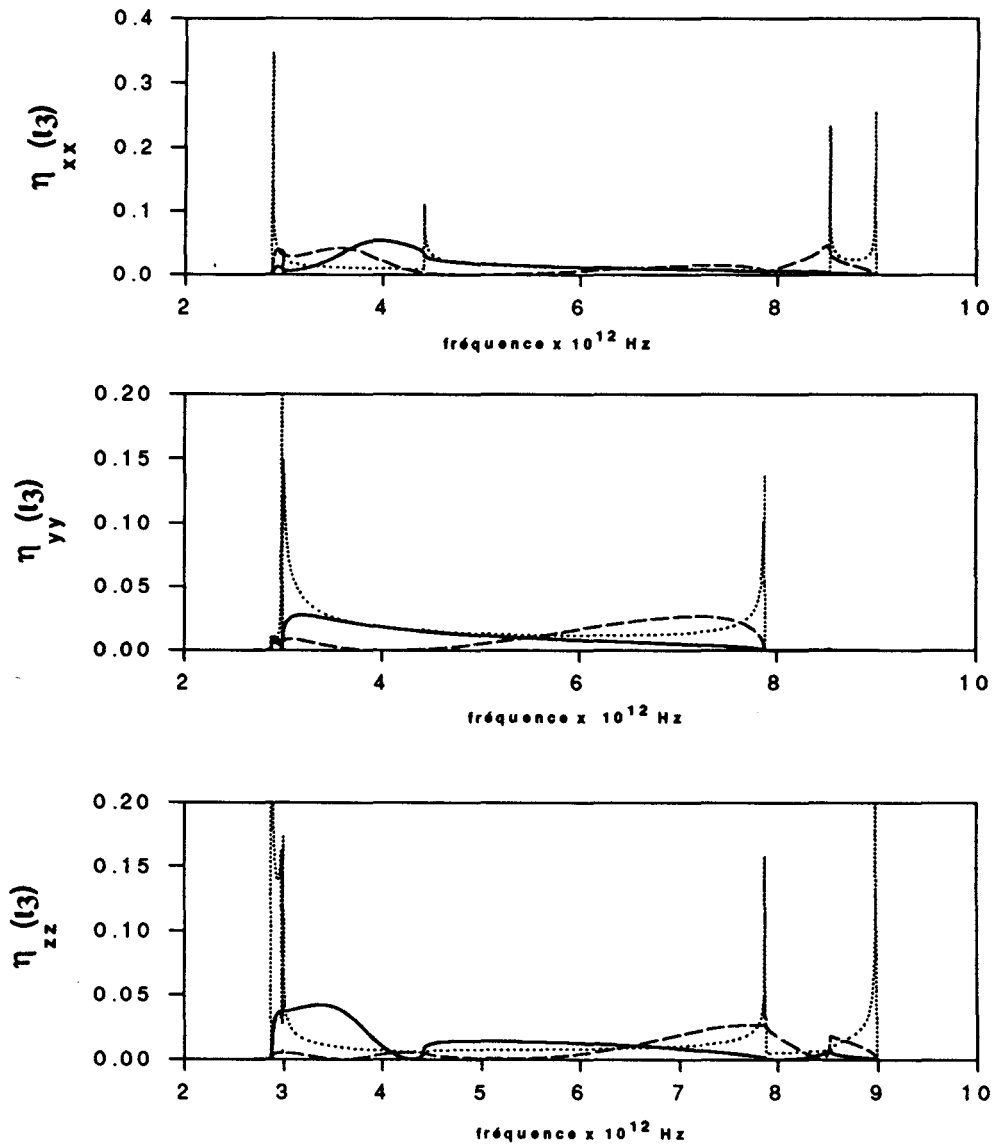


Figure V-4 : Densité d'état locale $\eta_{ii}(k_{//}, l_3, \omega)$ ($i = x, y$ et z) en fonction des fréquences de vibration pour le Fer une avec une surface propre (001), au point $k_{//} = \left(k_x = \frac{0.7}{a}, k_y = \frac{0.05}{a} \right)$ de la zone de Brillouin à deux dimensions.

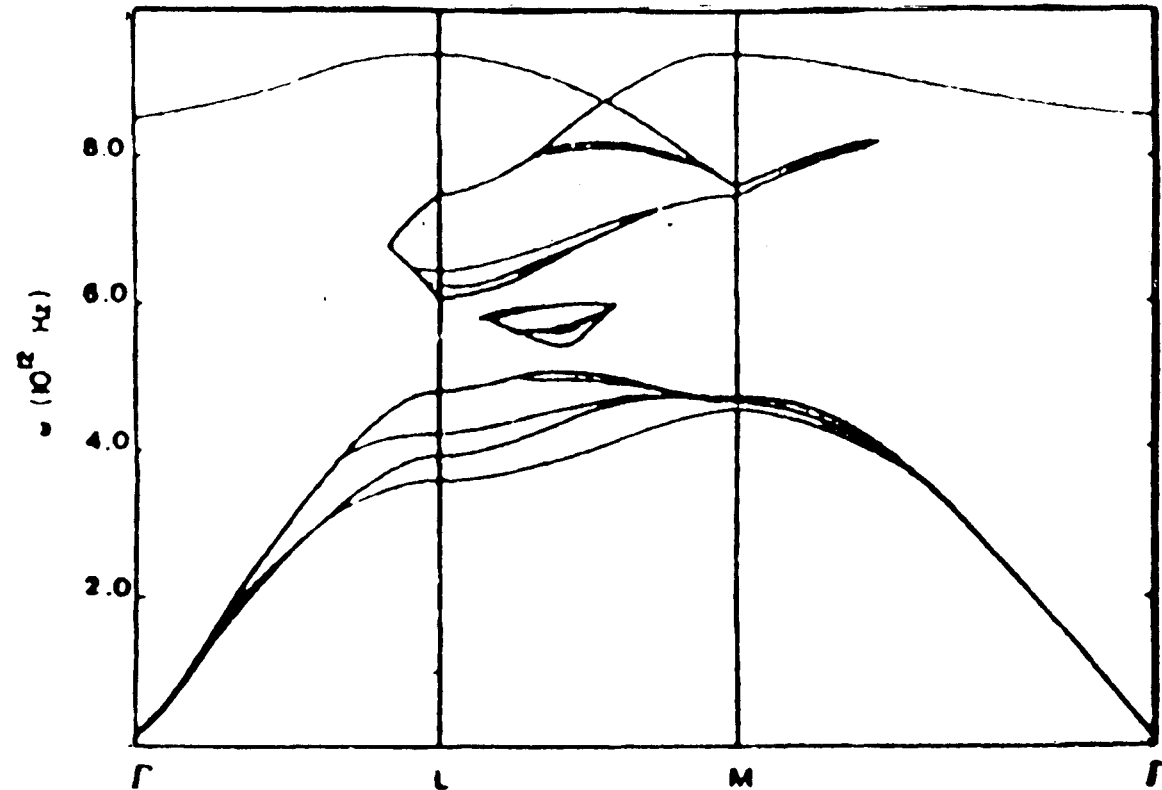


Figure V-5 : Dispersion des phonons localisés à l'intérieur de la zone de Brillouin à deux dimensions pour le système composé d'une couche de tungstène adsorbée sur la surface (001) du Fer.

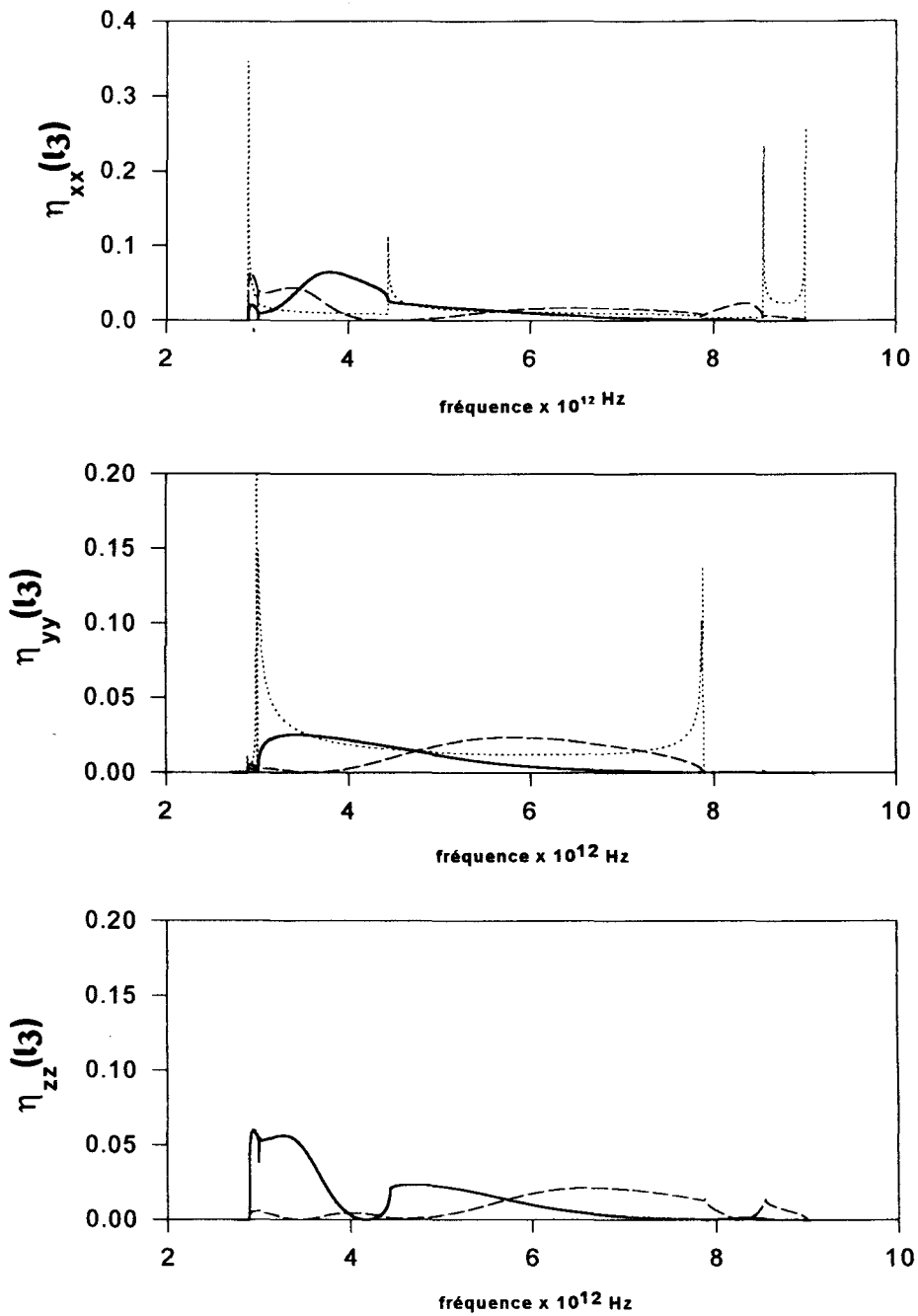


Figure V-6 : Densité d'état locale $\eta_{ii}(k_{//}, \ell_3, \omega)$ ($i = x, y$ et z) en fonction des fréquences de vibration du système composé d'une couche de tungstène adsorbée sur la surface (001) du Fer au point $k_{//} = \left(k_x = \frac{0.7}{a}, k_y = \frac{0.05}{a} \right)$ de la zone de Brillouin à deux dimensions.

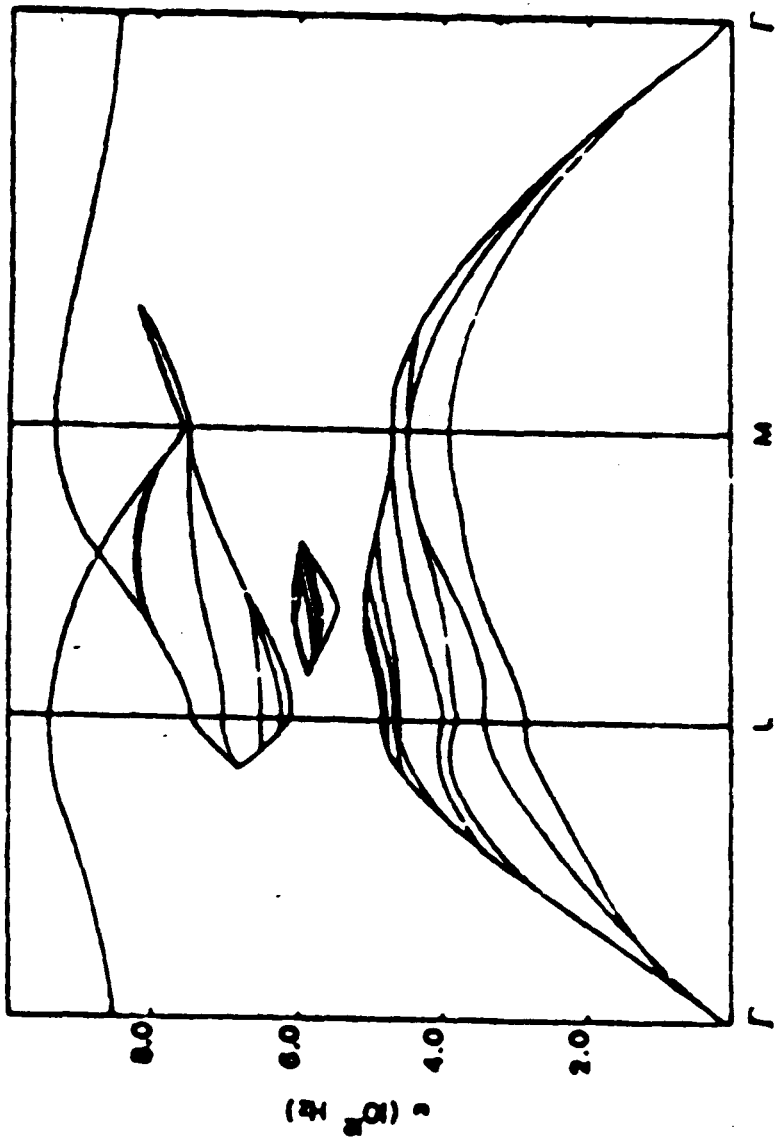


Figure V-7 : Dispersion des phonons localisés à l'intérieur de la zone de Brillouin à deux dimensions pour le système composé de trois couches de tungstène adsorbées sur la surface (001) du Fer.

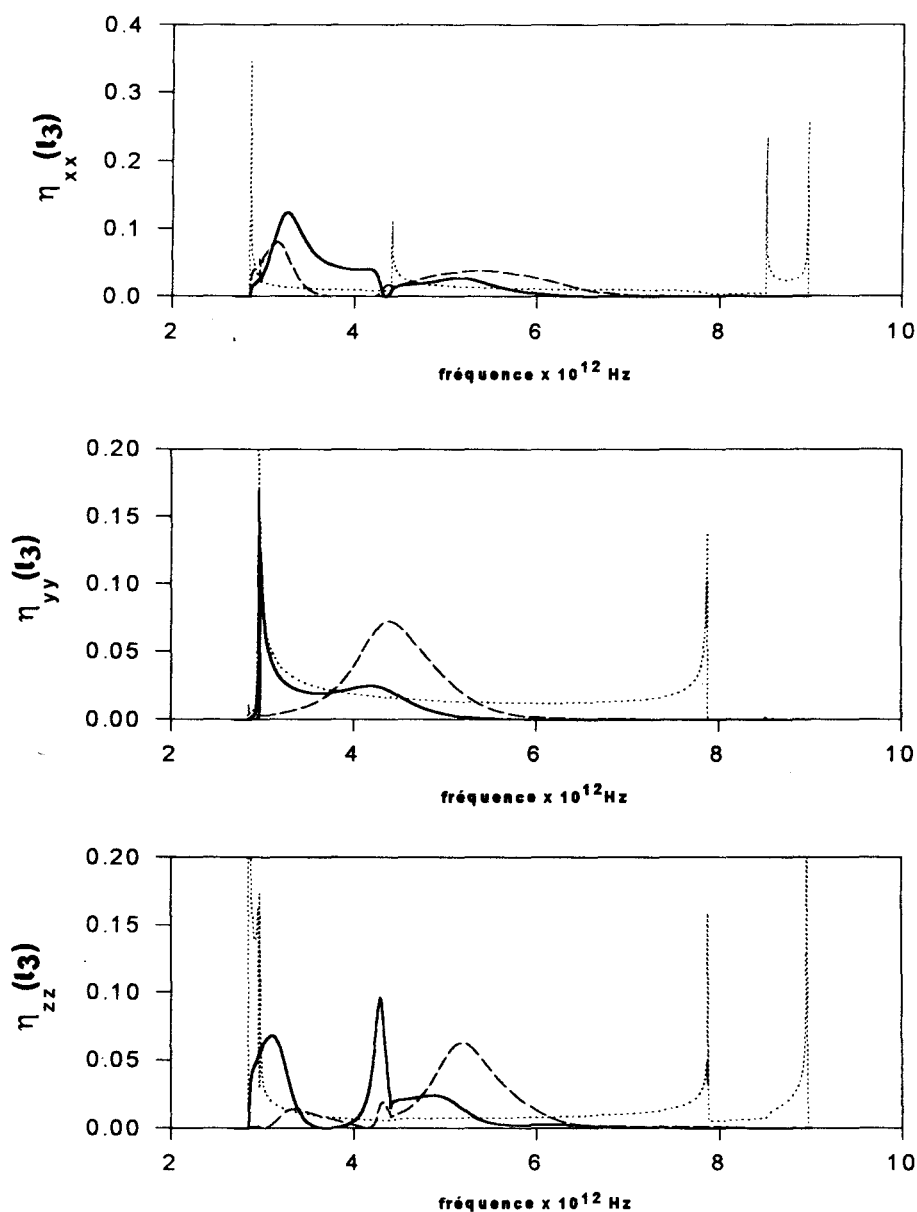


Figure V-8 : Densité d'état locale $\eta_{ii}(k_{//}, l_3, \omega)$ ($i = x, y$ et z) en fonction des fréquences de vibration du système composé de trois couches de tungstène adsorbées sur la surface (001) du Fer au point $k_{//} = \left(k_x = \frac{0.7}{a}, k_y = \frac{0.05}{a} \right)$ de la zone de Brillouin à deux dimensions.

V-6 Conclusion

Les formules explicites des fonctions de Green associées au cristal infini, au système semi-infini avec la surface propre et au système composé des couches adsorbées sur la surface propre du cristal semi-infini sont données comme fonction des paramètres microscopiques d'interaction.

Dans ce chapitre, nous avons donné une vue des propriétés dynamiques de la surface (001) du fer, avec ou sans couches de tungstène adsorbées. Les quantités physiques calculées pour les systèmes étudiées pourront servir à interpréter les expériences de diffusion faites sur ces systèmes.

Nous avons considéré que les maxima de la densité d'état locale correspondent à des résonances alors que les anti-résonances sont associées aux minimas, par conséquent pour les différentes couches du cristal infini, du système semi-infini (fer avec la surface propre (001)) et du système composé du fer avec la surface propre (001) et des couches de tungstène adsorbées sur la même surface nous avons trouvé des résonances et des anti-résonances. La propriété la plus frappante que nous pouvons retenir de cette étude c'est que les vibrations des atomes appartenant aux couches situées près de la surface sont caractérisées par des densités d'état locales différentes de celle des atomes éloignés de la surface.

Bibliographie du chapitre V

- [1] **R. E. Allen, G. P. Alldredge and F. W. de Wette**, Phys. Rev. B 4, 1648 (1971).
- [2] **J. E. Black, D. A. Campbell and R. F. Wallis**, Surf. Sci. 115, 161 (1982).
- [3] **S. W. Musser and K. H. Rieder**, Phys. Rev. B 9, 3969 (1974).
- [4] **A. Fasolino, G. Santoro and E. Tosatti**, Phys. Rev. Lett. 44, 1684 (1980).
- [5] **A. Fasolino, G. Santoro and E. Tosatti**, Phys. Rev. B 35, 4264 (1987).
- [6] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. Reports 6, 119-157 (1986).
- [7] **L. Dobrzynski**, Surf. Sci. 180, 489 (1987)
- [8] **B. Sylla**, Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille I, France (1990).
- [9] **A. Akjouj**, Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille I, France (1989); **A. Akjouj, B. Sylla and L. Dobrzynski**, Ann. phys. Fr. 18, 363 (1993)..
- [11] Voir par exemple : **H. Ibach**, Surf. Sci. 299/300, 116 (1994).
- [12] **G. Brusdeylins, R. Rechsteiner, J. G. Skofronick, J. P. Toennies, G. Benedek and L. Miglio**, Phys. Rev. B 34, 902 (1986).
- [13] **J. P. Toennies**, J. Vac.Sci. Technol. A 5 440 (1987).

- [14] **J. L. Wilkes, R. E. Palmer and R. F. Willis**, J. Electron Spectrosc. Rel. Phen. 44, 355 (1987).
- [15] **J. P. Toennies and R. Vollmer**, Phys. Rev B 40, 3459 (1988).
- [16] **C. Oshima, T. Aizawa, R. Souda, Y. Ishizawa and Y. Sumiyoshi**, Solid State Commun. 65, 1601 (1988).
- [17] **G. Benedek, G. Brusdeylins, C. Heimlich, L. Miglio, J. G. Skofronick, J. P. Toennies and R. Vollmer**, Phys. Rev. Lett. 60, 1037 (1988).
- [18] **J. G. Skofronick and J. P. Toennies** : *Surface Properties of Layered Structures*, Ed. G. Benedek (Kluwer, Dordrecht, 1992) ch 4.
- [19] **D. Castiel, L. Dobrzynski and D. Spanjaard**, Sur. Sci. 59, 252 (1976).
- [20] Voir par exemple : **P. Masri and L. Dobrzynski**, J. Phys. Chem. Solids, 34, 847 (1973).
- [21] **P. Zielinski**, Phys. Rev. B. 38, 12338 (1988).
- [22] **P. Zielinski and L. Dobrzynski**, Phys. Rev. 41, 103377 (1990).
- [10] **P. Zielinski, E. Oumghar and L. Dobrzynski**, Vacuum, à paraître.

CONCLUSION GENERALE

La plus grande partie de ce travail a porté sur l'étude des propriétés vibrationnelles des systèmes greffés tels que le système tunnel étudié dans le troisième chapitre, le système composé d'une chaîne infinie sur laquelle sont greffées des chaînes finies et le système composé de chaînes finies greffées sur la surface (001) d'un cristal semi-infini de structure cubique simple. Nous nous sommes aussi intéressés aux résonances dans les couches de tungstène adsorbées sur la surface (001) du fer. 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 greffées et à ces systèmes avec couches adsorbées, et par conséquent de mettre en évidence des modes localisés (modes d'interface et de surface). et résonants.

Dans le cas du système tunnel présenté dans le troisième chapitre, la connaissance des fonctions réponse permet non seulement de calculer les vecteurs propres, mais aussi de déduire les relations de dispersion des phonons. Grâce au calcul des vecteurs déplacements, nous avons mis en évidence un nouveau phénomène physique qui semble être utile pour les dispositifs à deux dimensions, ainsi qu'à ceux à une seule dimension. Il s'agit du phénomène de la transmission nulle associé aux modes résonants qui jouent le rôle d'un obstacle empêchant la propagation de la vibration des atomes. Ceci est d'une grande importance du fait que la transmission nulle n'apparaît pas pour les systèmes habituels de barrière tunnel résonantes utilisées dans les guides d'ondes quantiques, alors qu'elle est mise en évidence pour le système étudié dans le troisième chapitre considéré comme un modèle simple de guide d'ondes quantiques.

Nous avons aussi appliqué la théorie des réponses d'interface à l'étude des propriétés vibrationnelles des polymères adsorbés. Dans cette étude, nous avons utilisé deux modèles simples. Le premier modèle considère la surface comme un substrat unidimensionnel d'atomes et les polymères sont représentés par des chaînes finies d'atomes. L'adsorption des polymères conduit à l'apparition de modes vibrationnels résonants représentés par des pics bien définis

dans la variation de la densité totale d'états. L'interaction entre les polymères adsorbés est traduite par l'apparition de phonons anti-résonants et à la formation des bandes interdites dans la variation de la densité d'états. Le deuxième modèle est plus réaliste. Il considère les polymères comme des chaînes finies d'atomes greffées sur la surface (001) d'un cristal semi-infini considéré comme substrat. Comme dans le cas du premier modèle la variation de la densité d'état montre l'apparition des modes résonants dus à l'interaction entre les polymères et le substrat.

Dans la dernière partie de ce mémoire, nous avons étudié les propriétés dynamiques de la surface (001) du fer avec ou sans couches de tungstène adsorbées. Les quantités physiques calculées pour les systèmes étudiés pourront servir à interpréter les expériences faites sur ces systèmes. Les maxima de la densité d'état locale correspondent à des résonances alors que les anti-résonances sont associés aux minimas. La propriété la plus frappante que nous pouvons retenir de cette étude c'est que les vibrations des atomes appartenant aux couches situées près de la surface (surface 001 du fer) sont caractérisées par des densités d'état locales différentes des atomes qui appartiennent aux couches éloignées de la surface.

Les prolongements de ces études sont extrêmement nombreux et variés. Etant donné la simplicité des modèles utilisés et la complexité de nombreux systèmes réels pour lesquels nos résultats représentent une première approche qualitative.

APPENDICES

APPENDICE I

Dans cet appendice associé au chapitre III, nous présenterons les définitions des éléments matriciels de certains opérateurs ainsi que les détails de calcul des états propres du milieu (II) découplé du milieu (I).

I.1- Définition de \tilde{h}_C associé au système greffé :

A partir des équations (III-2-1'), (III-2-2'), (III-2-3'), (III-2-4'), (III-2-5'), et (III-2-6')

les éléments matriciels $h_C(\ell, \ell')$ la matrice dynamique \tilde{h}_C sont définis dans la base

$(\dots, u_{-\ell-1}, u_{-\ell}, u_{-\ell+1}, \dots, u_{-1}, u_0, u_1, u_2, \dots, u_{\ell-1}, u_{\ell}, u_{\ell+1}, \dots, u_{L-1}, u_L, u_1, u_2, \dots, u_{\ell-1}, u_{\ell}, u_{\ell+1}, \dots, u_{L-1}, u_L, u_{L+1}, \dots)$

par :

* Pour $\ell < 0$, $1 < \ell < L$, et $\ell \geq L+1$ nous avons :

$$h_C(\ell, \ell-1) = h_C(\ell, \ell+1) = \frac{\beta_1^x}{m_1}$$

$$h_C(\ell, \ell) = \frac{\gamma}{m_1}$$

$$h_C(\ell, \ell') = 0 \text{ pour } \ell \neq \ell' \text{ et } \ell' \neq \ell \mp 1$$

* pour $1' < \ell' < L'$, nous avons :

$$h_C(\ell, \ell-1) = h_C(\ell, \ell+1) = \frac{\beta_2^x}{m_2}$$

$$h_C(\ell, \ell) = \frac{\gamma'}{m_2}$$

$$h_C(\ell, \ell') = 0 \text{ pour } \ell \neq \ell' \text{ et } \ell' \neq \ell \mp 1$$

* Pour $\ell = 0$, les éléments matriciels $h_C(0, \ell)$ non nuls sont :

$$h_C(0, -1) = h_C(0, 1) = \frac{\beta_1^x}{m_1}$$

$$h_C(0, 0) = \frac{\gamma}{m_1}$$

$$h_C(0, 1') = \frac{\beta_I}{m_1}$$

* pour $\ell = 1'$, les éléments $h_C(1', j)$ non nuls sont définis par :

$$h_C(1', 0) = \frac{\beta_I}{m_2}$$

$$h_C(1', 1') = \frac{\gamma_{1'}}{m_2}$$

$$h_C(1', 2') = \frac{\beta_2^x}{m_2}$$

* Alors que pour $i=L'$ et $i=L$ les éléments de l'opérateur \tilde{h}_C non nuls sont respectivement :

$$h_C(L', L'-1) = \frac{\beta_2^x}{m_2} \quad h_C(L, L-1) = h_C(L, L+1) = \frac{\beta_2^x}{m_2}$$

$$h_C(L', L') = \frac{\gamma_{L'}}{m_2} \quad \text{et} \quad h_C(L, L) = \frac{\gamma_L}{m_1}$$

$$h_C(L', L) = \frac{\beta_{II}}{m_2} \quad h_C(L, L') = \frac{\beta_{II}}{m_2}$$

$\gamma, \gamma_0, \gamma_L, \gamma', \gamma_{1'}$ et $\gamma_{L'}$ sont définis par l'équation (III-2-7).

I.2- Définition de l'opérateur Hamiltonien \tilde{h}_D associé au système composé des milieux (I)

et (II) découplés; $\beta_I = \beta_{II} = 0$:

Compte tenu des équations (III-3-1), (III-3-2), (III-3-3), et (III-3-4) les éléments matriciels $h_D(i, j)$ de l'opérateur \tilde{h}_D associé aux milieux (I) et (II) découplés sont définis comme suit :

* Pour $\ell \leq 0, 1 \leq \ell \leq L$, et $\ell \geq L+1$ les éléments matriciels $h_d(i, j)$ sont définis par :

$$h_D(\ell, \ell-1) = h_D(\ell, \ell+1) = \frac{\beta_1^x}{m_1}$$

$$h_D(\ell, \ell) = \frac{\gamma}{m_1}$$

$$h_D(\ell, \ell') = 0 \text{ pour } \ell \neq \ell' \text{ et } \ell' \neq \ell \mp 1$$

* De même pour $1' \leq \ell' \leq L'$, nous avons :

$$h_D(\ell, \ell-1) = h_D(\ell, \ell+1) = \frac{\beta_2^x}{m_2}$$

$$h_D(\ell, \ell) = \frac{\gamma''}{m_2}$$

$$h_D(\ell, \ell') = 0 \text{ pour } \ell \neq \ell' \text{ et } \ell' \neq \ell \mp 1$$

* Alors que pour $\ell=1'$ et $\ell=L'$ les éléments $h_D(i, j)$ non nuls sont respectivement,

$$h_D(1', 1') = \frac{\gamma''}{m_2} \quad h_D(L', L'-1) = \frac{\gamma''}{m_2}$$

$$h_D(1', 2') = \frac{\beta_2^x}{m_2} \quad \text{et} \quad h_D(L', L') = \frac{\beta_2^x}{m_2}$$

γ'' est définie par l'équation (III-3-5)

I.3- Expression matricielle de l'opérateur \vec{h}_{0i} associé au milieu (II) tout seul et de l'opérateur de clivage \vec{V}_{0i} :

En effet, le milieu (II) est considéré constitué d'un nombre L' limité de chaînes finies d'atomes identiques en interaction. Ce milieu peut être obtenu par clivage entre les atomes $(0n)$ et $(1'n)$, $(L'n)$ et $(L'+1n)$ du milieu I considéré constitué d'une infinité de chaînes infinies d'atomes identiques. A la suite de ce clivage le milieu I est divisé en trois parties découplées (partie I, milieu II et la partie III). En tenant compte que le déplacement de chaque atome s'écrit sous l'expression $u_{\ell',n} = u_{\ell'} e^{i(nk_y a - \omega t)}$, les équations du mouvement des atomes $(0,n)$, $(1',n)$, (ℓ',n) (à noter que $\ell' \neq 0, 1', L', L'+1$), (L',n) et $(L'+1,n)$ s'écrivent respectivement :

$$\frac{1}{m_2} \left[\beta_2^x u_{-1'}(k_y) - \delta u_0(k_y) \right] = 0,$$

$$\frac{1}{m_2} \left[-\delta u_1(k_y) + \beta_2^x u_2(k_y) \right] = 0,$$

$$\frac{1}{m_2} \left[\beta_2^x u_{\ell'-1}(k_y) - (\delta + \beta_2^x) u_{\ell'}(k_y) + \beta_2^x u_{\ell'+1}(k_y) \right] = 0,$$

$$\frac{1}{m_2} \left[\beta_2^x u_{L'-1}(k_y) - \delta u_{L'}(k_y) \right] = 0,$$

$$\frac{1}{m_2} \left[\beta_2^x u_{L'}(k_y) - \delta u_{L'+1}(k_y) \right] = 0,$$

avec

$$\delta = \beta_2^x + 2\beta_2^y \left[1 - \cos(k_y a) \right] - m_2 \omega^2$$

Compte tenu des équations de mouvement ci dessus, les éléments matriciels $h_{0i}(\ell', \ell'')$ de la matrice dynamique \vec{h}_{0i} associée aux trois parties découplées obtenues par clivage (partie I, milieu II et partie III) sont définis dans la base

$(\dots u_{-\ell'-1}, u_{-\ell'}, u_{-\ell'+1}, \dots u_{-1}, u_0, u_1, u_2, \dots, u_{\ell'-1}, u_{\ell'}, u_{\ell'+1}, \dots, u_{L'-1}, u_{L'}, u_{L'+1}, \dots)$ par

* pour $\ell' < 0$, $1' < \ell' < L'$, $\ell' > L'+1$ les éléments matriciels $h_{0i}(\ell', \ell'')$ sont définis comme suit

$$h_{0i}(\ell', \ell' - 1) = h_{0i}(\ell', \ell'+1) = \frac{\beta_2^x}{m_2}$$

$$h_{0i}(\ell', \ell') = -\frac{\gamma'}{m_2}$$

$$h_{0i}(\ell', \ell'') = 0 \text{ pour } \ell'' = \ell' \mp 1$$

* pour $\ell' = 0, 1', L', L'+1$ les éléments matriciels non nuls de l'opérateur \vec{h}_{0i} sont

$$\underline{h_{0i}(0, -1') = \frac{\beta_2^x}{m_2}, h_{0i}(0, 0) = -\frac{\delta}{m_2}, h_{0i}(1', 1') = -\frac{\delta}{m_2}, h_{0i}(1', 2') = \frac{\beta_2^x}{m_2},}$$

$$\underline{h_{0i}(L', L') = -\frac{\delta}{m_2}, h_{0i}(L', L'-1) = \frac{\beta_2^x}{m_2}, h_{0i}(L'+1, L') = \frac{\beta_2^x}{m_2}}$$

$$\underline{\text{et } h_{0i}(L'+1, L'+1) = -\frac{\delta}{m_2}.}$$

Sachant que l'opérateur de clivage est défini par la relation :

$$\vec{V}_{0i} = \vec{H}_{0i} - \vec{h}_{0i}$$

\vec{H}_{0i} est l'Hamiltonien associé au milieu infini avant le clivage définie par

$$H_{0i}(\ell', \ell'-1) = H_{0i}(\ell', \ell'+1) = \frac{\beta_2^x}{m_2}$$

$$H_{0i}(\ell', \ell') = -\frac{\gamma'}{m_2}$$

$$H_{0i}(\ell', \ell'') = 0 \text{ pour } \ell'' = \ell' \mp 1$$

Compte tenu des définitions des opérateurs \tilde{H}_{0i} et \tilde{h}_{0i} , l'opérateur de clivage \tilde{V}_{0i} sera défini par

* pour $\ell' \neq 0, 1', L', L'+1$

$$V_{0i}(\ell', \ell'') = 0$$

* pour $\ell' = 0, 1', L', L'+1$ les éléments $V_{0i}(\ell', \ell'')$ non nuls sont

$$V_{0i}(0,0) = \frac{\beta_2^x}{m_2}, V_{0i}(0,-1') = -\frac{\beta_2^x}{m_2}, V_{0i}(1',0) = -\frac{\beta_2^x}{m_2}, V_{0i}(1',1') = \frac{\beta_2^x}{m_2},$$

$$V_{0i}(L',L') = \frac{\beta_2^x}{m_2}, V_{0i}(L',L'+1) = -\frac{\beta_2^x}{m_2}, V_{0i}(L'+1,L') = -\frac{\beta_2^x}{m_2}$$

$$\text{et } V_{0i}(L'+1,L'+1) = \frac{\beta_2^x}{m_2}.$$

I.4- Calcul des états propres associés au milieu (II) découplé du milieu (I);

$$\beta_I = \beta_{II} = 0:$$

Les états propres associés au milieu (II) tout seul sont déterminés en résolvant

l'équation $\det(\tilde{\Delta}(MM)) = 0$, $\tilde{\Delta}(MM)$ est une matrice carré définie par :

$$\tilde{\Delta}(MM) = \begin{bmatrix} 1 + A_s(1',1') & A_s(1',L') \\ A_s(L',1') & 1 + A_s(L',L') \end{bmatrix}.$$

En tenant compte de la définition de l'opérateur de surface \tilde{A}_s , la matrice $\tilde{\Delta}(M,M)$ s'écrit sous l'expression ci dessous :

$$\tilde{\Delta}(MM) = \begin{bmatrix} \frac{1}{1+t_2} & -\frac{t_2^{L'}}{1+t_2} \\ -\frac{t_2^{L'}}{1+t_2} & \frac{1}{1+t_2} \end{bmatrix}.$$

Ainsi, les états propres du milieu (II) sont données par l'équation suivante :

$$t_2^{L'} - t_2^{-L'} = 0.$$

En posant $t_2 = e^{ik_x}$, l'équation ci dessus devient :

$$\sin(k_x L') = 0.$$

Ce qui donne,

$$k_x = \frac{n\pi}{L'}$$

sachant que $\xi_2(k_y, \omega) = \cos(k_x)$ et que $\xi_2(k_y, \omega) = 1 + \frac{\beta_2^y}{\beta_2^x} [1 - \cos(k_y)] - \frac{m_2 \omega^2}{2\beta_2^x}$, nous

déduisons que les états propres associés au milieu (II) sont définis par la relation :

$$\omega^2 = \frac{2}{m_2} \left\{ \beta_2^x \left[1 - \cos\left(\frac{n\pi}{L'}\right) \right] + \beta_2^y [1 - \cos(k_y)] \right\}$$

I.5- Définition détaillée de la fonction réponse de référence \tilde{G}_s associée au système greffé

La fonction réponse de référence \tilde{G}_s est obtenue par l'addition des fonctions réponses \tilde{G}_0 et \tilde{g}_{s2} associées respectivement aux chaînes infinie et fini.

$$\vec{G}_s = \begin{bmatrix} \vec{G}_0 & \vec{0} \\ \vec{0} & \vec{g}_{s2} \end{bmatrix}$$

En effet,

* pour ℓ et ℓ' appartenant au milieu (I),

$$G_s(\ell, \ell') = G_0(\ell, \ell')$$

* pour ℓ et ℓ' appartenant au milieu (II),

$$G_s(\ell, \ell') = g_{s2}(\ell, \ell')$$

* pour n appartenant au milieu (I) et n' appartenant au milieu (II) et vice versa,

$$G_s(\ell, \ell') = 0$$

En se limitant par exemple à l'espace d'interface $M=(0,1',L',L)$, la fonction réponse de référence s'écrit sous l'expression matricielle ci dessous

$$\vec{G}_{sM} = \begin{bmatrix} G_0(0,0) & 0 & 0 & G_0(0,L) \\ 0 & g_{s2}(1',1') & g_{s2}(1',L') & 0 \\ 0 & g_{s2}(L',1') & g_{s2}(L',L') & 0 \\ G_0(L,0) & 0 & 0 & G_0(L,L) \end{bmatrix}$$

I.7- Définition de la matrice $\vec{\Delta}(MM)$ et de son inverse $\vec{\Delta}^{-1}(MM)$:

$\vec{\Delta}$ est une matrice carrée (4X4) dont les éléments matriciels sont définis comme suit

$$\Delta(0,0) = 1 - A_1, \quad \Delta(0,1') = \frac{m_2}{m_1} B_1, \quad \Delta(0,L') = \frac{m_2}{m_1} D_1, \quad \Delta(0,L) = -C_1,$$

$$\Delta(1',0) = \frac{m_1}{m_2} A_1, \quad \Delta(1',1') = 1 - B_1, \quad \Delta(1',L') = -D_1, \quad \Delta(1',L) = \frac{m_1}{m_2} C_1,$$

$$\Delta(L',0) = \frac{m_1}{m_2} C_2, \quad \Delta(L',1') = -D_2, \quad \Delta(L',L') = 1 - B_2, \quad \Delta(L',L) = \frac{m_1}{m_2} A_2,$$

$$\Delta(L,0) = -C_2, \quad \Delta(0,1') = \frac{m_2}{m_1} D_2, \quad \Delta(L,L') = \frac{m_2}{m_1} B_2, \quad \Delta(L,L) = 1 - A_2.$$

où $m, m'=0$, $1'$, L' , et L sont les sites d'interface, avec

$$A_1 = \frac{\beta_I}{\beta_1^x} \frac{t_1}{t_1^2 - 1}, \quad B_1 = \frac{\beta_I}{\beta_2^x} \frac{t_2 + t_2^{2L'}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})}, \quad C_1 = \frac{\beta_I}{\beta_1^x} \frac{t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1}, \quad D_1 = \frac{\beta_I}{\beta_2^x} \frac{t_2^{2L'} + t_2^{2L'+1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})}$$

$$A_2 = \frac{\beta_{II}}{\beta_1^x} \frac{t_1}{t_1^2 - 1}, \quad B_2 = \frac{\beta_{II}}{\beta_2^x} \frac{t_2 + t_2^{2L'}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})}, \quad C_2 = \frac{\beta_{II}}{\beta_1^x} \frac{t_1^{L+1}}{t_1^2 - 1} \quad \text{et} \quad D_2 = \frac{\beta_{II}}{\beta_2^x} \frac{t_2^{2L'} + t_2^{2L'+1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})}$$

Un calcul analytique nous permet d'écrire le déterminant W de la matrice $\bar{\Delta}$ sous la forme l'expression ci-dessous :

$$W = (1 - A_1 - B_1)(1 - A_2 - B_2) - (C_1 + D_1)(C_2 + D_2)$$

la matrice $\bar{\Delta}^{-1}(MM)$ est une matrice (4×4) dont les éléments matriciels sont définis par :

$$\Delta^{-1}(0,0) = \frac{(1 - B_1)(1 - A_2 - B_2) - (C_1 + D_1)D_2}{W},$$

$$\Delta^{-1}(0,1') = -\frac{m_2}{m_1} \frac{B_1(1 - A_2 - B_2) + (C_1 + D_1)D_2}{W},$$

$$\Delta^{-1}(0,L') = -\frac{m_2}{m_1} \frac{B_2 C_1 + B_1(1 - A_2)}{W},$$

$$\Delta^{-1}(0,L) = \frac{D_1 A_2 + C_1(1 - B_2)}{W},$$

$$\Delta^{-1}(1',0) = -\frac{m_1}{m_2} \frac{A_1(1 - A_2 - B_2) + (C_1 + D_1)D_2}{W},$$

$$\Delta^{-1}(1', 1') = \frac{(1 - A_1)(1 - A_2 - B_2) - (C_1 + D_1)D_2}{W},$$

$$\Delta^{-1}(1', L') = \frac{C_1 B_2 + D_1(1 - A_2)}{W},$$

$$\Delta^{-1}(1', L) = -\frac{m_1}{m_2} \frac{D_1 A_2 + C_1(1 - B_2)}{W},$$

$$\Delta^{-1}(L', 0) = -\frac{m_1}{m_2} \frac{A_1 D_2 + (1 - B_1)C_2}{W},$$

$$\Delta^{-1}(L', 1') = \frac{B_1 C_2 + (1 - A_2)D_1}{W},$$

$$\Delta^{-1}(L', L') = \frac{(1 - A_1 - B_1)(1 - A_2) - C_1(C_2 + D_2)}{W},$$

$$\Delta^{-1}(L', L) = -\frac{m_1}{m_2} \frac{(1 - A_1 - B_1)A_2 + C_1(C_2 + D_2)}{W},$$

$$\Delta^{-1}(L, 0) = \frac{A_1 D_2 + (1 - B_1)C_2}{W},$$

$$\Delta^{-1}(L, 1') = -\frac{m_2}{m_1} \frac{B_1 C_2 + (1 - A_1)B_2}{W},$$

$$\Delta^{-1}(L, L') = -\frac{m_2}{m_1} \frac{(1 - A_1 - B_1)B_2 + D_1(C_2 + D_2)}{W},$$

$$\text{et } \Delta^{-1}(L, L) = \frac{(1 - A_1 - B_1)(1 - B_2) - D_1(C_2 + D_2)}{W}.$$

I.7- Calcul des fonctions réponses associées au système greffé

La fonction réponse \tilde{g} du système composite étudié est calculée en utilisant l'équation fondamentale de la théorie des réponses d'interface [10,11] qui peut être évaluée sous la forme matricielle suivante :

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

En effectuant la sommation sur les indices m et m' de l'équation (III-5-1). Il vient alors :

$$\begin{aligned}
 g(\ell, \ell') &= G_s(\ell, \ell') - \\
 &G_s(\ell, 0) \left\{ \Delta^{-1}(0, 0)A(0, \ell') + \Delta^{-1}(0, 1')A(1', \ell') + \Delta^{-1}(0, L')A(L', \ell') + \Delta^{-1}(0, L)A(L, \ell') \right\} - \\
 &G_s(\ell, 1') \left\{ \Delta^{-1}(1', 0)A(0, \ell') + \Delta^{-1}(1', 1')A(1', \ell') + \Delta^{-1}(1', L')A(L', \ell') + \Delta^{-1}(1', L)A(L, \ell') \right\} - \\
 &G_s(\ell, L') \left\{ \Delta^{-1}(L', 0)A(0, \ell') + \Delta^{-1}(L', 1')A(1', \ell') + \Delta^{-1}(L', L')A(L', \ell') + \Delta^{-1}(L', L)A(L, \ell') \right\} - \\
 &G_s(\ell, L) \left\{ \Delta^{-1}(L, 0)A(0, \ell') + \Delta^{-1}(L, 1')A(1', \ell') + \Delta^{-1}(L, L')A(L', \ell') + \Delta^{-1}(L, L)A(L, \ell') \right\}.
 \end{aligned}$$

Ainsi, tous les éléments matriciels de la fonction réponse \bar{g} peuvent être calculés. Nous les donnerons ci après.

a) Dans le milieu (I) :

En se plaçant à l'intérieur du milieu (I), il faut envisager les cas suivants :

- | | | |
|-------------------------------------------|-------------------------------------------|------------------------------------|
| 1) $\ell, \ell' \leq 0$ | 4) $0 \leq \ell, \ell' \leq L$ | 7) $\ell \leq 0$ et $\ell' \geq L$ |
| 2) $\ell \leq 0$ et $0 \leq \ell' \leq L$ | 5) $\ell \geq L$ et $0 \leq \ell' \leq L$ | 8) $\ell \geq L$ et $\ell' \leq 0$ |
| 3) $0 \leq \ell \leq L$ et $\ell' \leq 0$ | 6) $0 \leq \ell \leq L$ et $\ell' \geq L$ | 9) $\ell, \ell' \geq 0$ |

En envisageant ces cas, nous obtenons :

* pour $\ell, \ell' \leq 0$:

$$\begin{aligned}
 g(\ell, \ell') &= \frac{m_1}{\beta_1^x} \frac{t_1^{|\ell-\ell'|+1}}{t_1^2 - 1} + \\
 &\frac{m_1}{(\beta_1^x)^2 W} \frac{t_1^{2-\ell-\ell'}}{(t_1^2 - 1)^2} \left\{ \beta_I \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^L (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} \left[t_1^L (1 - A_1 - B_1) + (C_1 + D_1) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

*pour $\ell \leq 0$ et $0 \leq \ell' \leq L$:

$$g(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell-\ell'+1|}}{\beta_1^x t_1^2 - 1} + \frac{m_1 t_1^{1-\ell}}{(\beta_1^x)^2 W (t_1^2 - 1)^2} \left\{ \beta_I t_1^{1+\ell} \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^L (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} t_1^{L-\ell+1} \left[t_1^L (1 - A_1 - B_1) + (C_1 + D_1) \right] \right\}$$

* pour $0 \leq \ell \leq L$ et $\ell' \leq 0$:

Les éléments de la fonction réponse sont obtenus en interchangeant ℓ et ℓ' dans l'équation ci dessus :

$$g(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell-\ell'+1|}}{\beta_1^x t_1^2 - 1} + \frac{m_1 t_1^{1-\ell'}}{(\beta_1^x)^2 W (t_1^2 - 1)^2} \left\{ \beta_I t_1^{1+\ell'} \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^L (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} t_1^{L-\ell'+1} \left[t_1^L (1 - A_1 - B_1) + (C_1 + D_1) \right] \right\}$$

* pour $0 \leq \ell, \ell' \leq L$:

$$g(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell-\ell'+1|}}{\beta_1^x t_1^2 - 1} + \frac{m_1}{(\beta_1^x)^2 W (t_1^2 - 1)^2} \left\{ \beta_I t_1^{1+\ell} \left[t_1^{1+\ell'} (1 - A_2 - B_2) + t_1^{L-\ell'+1} (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} t_1^{L-\ell+1} \left[t_1^{L-\ell'+1} (1 - A_1 - B_1) + t_1^{1+\ell'} (C_1 + D_1) \right] \right\}$$

* pour $\ell \geq L$ et $0 \leq \ell' \leq L$:

$$g(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell-\ell'+1|}}{\beta_1^x t_1^2 - 1} + \frac{m_1 t_1^2}{(\beta_1^x)^2 W (t_1^2 - 1)^2} \left\{ \beta_I \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^{-L} (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} t_1^{\ell-\ell'} \left[t_1^{-L} (1 - A_1 - B_1) + (C_1 + D_1) \right] \right\}$$

* pour $0 \leq \ell \leq L$ et $\ell' \geq L$:

En interchangeant les indices ℓ et ℓ' dans l'équation ci dessus, nous obtenons la fonction réponse $g(\ell, \ell')$ pour le cas considéré :

$$g(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell-\ell'+1|}}{\beta_1^x t_1^2 - 1} + \frac{m_1}{(\beta_1^x)^2 W (t_1^2 - 1)^2} \left\{ \beta_I \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^{-L} (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} t_1^{\ell-\ell'} \left[t_1^{-L} (1 - A_1 - B_1) + (C_1 + D_1) \right] \right\}$$

* pour $\ell \leq 0$ et $\ell' \geq L$:

$$g(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell-\ell'+1|}}{\beta_1^x t_1^2 - 1} + \frac{m_1}{(\beta_1^x)^2 W (t_1^2 - 1)^2} \left\{ \beta_I t_1^{-\ell+\ell'} \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^{-L} (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} t_1^{-(\ell+\ell')} \left[(1 - A_1 - B_1) + t_1^L (C_1 + D_1) \right] \right\}$$

* pour $\ell \geq L$ et $\ell' \leq 0$:

Pour ce cas les fonctions réponses sont obtenus en interchangeant les indices ℓ et ℓ' dans l'équation ci dessus :

$$g(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell-\ell'+1|}}{\beta_1^x t_1^2 - 1} + \frac{m_1}{(\beta_1^x)^2 W (t_1^2 - 1)^2} \left\{ \beta_I t_1^{-\ell+\ell'} \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^{-L} (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} t_1^{-(\ell+\ell')} \left[(1 - A_1 - B_1) + t_1^L (C_1 + D_1) \right] \right\}$$

* pour $\ell, \ell' \geq L$:

$$g(\ell, \ell') = \frac{m_1 t_1^{|\ell-\ell'+1|}}{\beta_1^x t_1^2 - 1} + \frac{m_1}{(\beta_1^x)^2 W (t_1^2 - 1)^2} \left\{ \beta_I t_1^{\ell-\ell'} \left[(1 - A_2 - B_2) + t_1^{-L} (C_2 + D_2) \right] + \beta_{II} \left[t_1^{-2L} (1 - A_1 - B_1) + t_1^{-L} (C_1 + D_1) \right] \right\}$$

b) Entre les milieux (I) et (II)

Entre les milieux (I) et (II) les éléments matriciels de la fonction réponse sont déterminés en étudiant les cas suivants :

1) $\ell \leq 0$ et $l' \leq \ell' \leq L'$

2) $l' \leq \ell \leq L'$ et $\ell' \leq 0$

3) $0 \leq \ell \leq L$ et $l' \leq \ell' \leq L'$

- 4) $1' \leq \ell \leq L'$ et $0 \leq \ell' \leq L$ 5) $\ell \geq L$ et $1' \leq \ell' \leq L'$ 6) $1' \leq \ell \leq L'$ et $\ell' \geq L$.

* pour $\ell \leq 0$ et $1' \leq \ell' \leq L'$:

$$g(\ell, \ell') = -\frac{m_2}{\beta_1^x \beta_2^x W (t_1^2 - 1)(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \times t_1^{1-\ell} \times \left\{ t_2^\ell + t_2^{2L'-\ell+1} \left[\beta_I(1 - A_2 - B_2) + \beta_{II}(C_1 + D_1) \right] + \left[t_2^{L'+\ell} + t_2^{L'-\ell+1} \left[\beta_{II}(1 - A_1 - B_1) + \beta_I t_1^L (C_2 + D_2) \right] \right] \right\}$$

* pour $1' \leq \ell \leq L'$ et $\ell' \leq 0$:

$$g(\ell, \ell') = -\frac{m_1}{\beta_1^x \beta_2^x W (t_1^2 - 1)(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \times t_1^{1-\ell} \times \left\{ t_2^\ell + t_2^{2L'-\ell+1} \left[\beta_I(1 - A_2 - B_2) + \beta_{II} t_1^L (C_1 + D_1) \right] + \left[t_2^{L'+\ell} + t_2^{L'-\ell+1} \left[\beta_{II}(1 - A_1 - B_1) + \beta_I t_1^L (C_2 + D_2) \right] \right] \right\}$$

* pour $0 \leq \ell \leq L$ et $1' \leq \ell' \leq L'$:

$$g(\ell, \ell') = -\frac{m_2}{\beta_1^x \beta_2^x W (t_1^2 - 1)(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \times t_1^{1+\ell} \times \left\{ t_2^\ell + t_2^{2L'-\ell+1} \left[\beta_I(1 - A_2 - B_2) + \beta_{II}(C_1 + D_1) \right] + \left[t_2^{L'+\ell} + t_2^{L'-\ell+1} \left[\beta_{II}(1 - A_1 - B_1) + \beta_I (C_2 + D_2) \right] \right] \right\}$$

* pour $1' \leq \ell \leq L'$ et $0 \leq \ell' \leq L$:

$$g(\ell, \ell') = -\frac{m_1}{\beta_1^x \beta_2^x W (t_1^2 - 1)(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \times t_1^{1+\ell} \times \left\{ t_2^\ell + t_2^{2L'-\ell+1} \left[\beta_I(1 - A_2 - B_2) + \beta_{II} t_1^L (C_1 + D_1) \right] + \left[t_2^{L'+\ell} + t_2^{L'-\ell+1} \left[\beta_{II}(1 - A_1 - B_1) + \beta_I t_1^L (C_2 + D_2) \right] \right] \right\}$$

* pour $\ell \geq L$ et $1' \leq \ell' \leq L'$:

$$g(\ell, \ell') = -\frac{m_2}{\beta_1^x \beta_2^x W (t_1^2 - 1)(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \times t_1^{1+\ell} \times \left\{ t_2^\ell + t_2^{2L'-\ell+1} \left[\beta_I(1 - A_2 - B_2) + \beta_{II}(C_1 + D_1) \right] + \left[t_2^{L'+\ell} + t_2^{L'-\ell+1} \left[\beta_{II}(1 - A_1 - B_1) + \beta_I t_1^{-L} (C_2 + D_2) \right] \right] \right\}$$

* pour $1' \leq \ell \leq L'$ et $\ell' \geq L$:

$$g(\ell, \ell) = -\frac{m_1}{\beta_1^x \beta_2^x W} \frac{t_1^{1+\ell}}{(t_1^2 - 1)(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \times \\ \left\{ t_2^\ell + t_2^{2L' - \ell + 1} \left[\beta_I (1 - A_2 - B_2) + \beta_{II} t_1^{-L} (C_1 + D_1) \right] + \left[t_2^{L'+\ell} + t_2^{L' - \ell + 1} \right] \left[\beta_{II} (1 - A_1 - B_1) + \beta_I t_1^{-L} (C_2 + D_2) \right] \right\}$$

c) à l'intérieur du milieu (II) :

À l'intérieur du milieu (II) les éléments matriciels de la fonction réponse sont déterminés en étudiant le cas ($1' \leq \ell, \ell' \leq L'$) pour ce cas l'équation (III-5 4) devient :

$$g(\ell, \ell') = g_{s2}(\ell, \ell') - \\ g_{s2}(\ell, 1') \left\{ \Delta^{-1}(1', 0) A(0, \ell') + \Delta^{-1}(1', 1') A(1', \ell') + \Delta^{-1}(1', L') A(L', \ell') + \Delta^{-1}(1', L) A(L, \ell') \right\} - \\ g_{s2}(\ell, L') \left\{ \Delta^{-1}(L', 0) A(0, \ell') + \Delta^{-1}(L', 1') A(1', \ell') + \Delta^{-1}(L', L') A(L', \ell') + \Delta^{-1}(L', L) A(L, \ell') \right\}.$$

En posant :

$$X_\ell(t_2) = \frac{t_2^\ell + t_2^{2L' - \ell + 1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})}, \quad Y_{\ell'}(t_2) = \frac{t_2^{\ell'} + t_2^{2L' - \ell' + 1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})}$$

$$Z_\ell(t_2) = \frac{t_2^{L'+\ell} + t_2^{L' - \ell + 1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})} \quad \text{et} \quad T_{\ell'}(t_2) = \frac{t_2^{L'+\ell'} + t_2^{L' - \ell' + 1}}{(t_2 - 1)(1 - t_2^{2L'})}$$

La fonction réponse à l'intérieur du milieu II est définie par

$$g(\ell, \ell') = g_{s2}(\ell, \ell') + \\ \frac{m_2}{(\beta_2^x)^2} \left\{ X_\ell(t_2) \left[\beta_I Y_{\ell'}(t_2) (1 - A_2 - B_2) + \beta_{II} T_{\ell'}(t_2) (C_1 + D_1) \right] + Z_\ell(t_2) \left[\beta_I Y_{\ell'}(t_2) (C_2 + D_2) + \beta_{II} T_{\ell'}(t_2) (1 - A_1 - B_1) \right] \right\}$$

APPENDICE II

Cet appendice est associé au chapitre IV. Il consiste en un calcul détaillé de la fonction réponse structurale associé à une chaîne infinie d'atomes identiques. En effet, la fonction réponse (fonction de Green) associée à une chaîne infinie d'atomes de masse m_1 dont β_1 est l'interaction entre atomes premiers voisins est :

$$G(\ell - \ell', E) = \frac{m_1 t_1^{|\ell - \ell'| + 1}}{\beta_1 t_1^2 - 1}.$$

La chaîne infinie considérée peut être divisée en des portions égales renfermant chacune N atomes, ainsi nous définissons dans l'espace réel une périodicité qui est traduite dans l'espace réciproque par la fonction réponse structurale associée à la cellule unitaire (chaîne finie de N atomes). Cette fonction réponse structurale s'écrit

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{\beta_1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} G(\ell + nN - \ell', E)$$

Sachant que $\vec{k} \cdot \vec{R}_n = nNa$ et compte tenu de l'expression de $G(\ell - \ell', E)$

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{\beta_1} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} e^{inNka} \frac{t_1^{|\ell - \ell' + nN| + 1}}{t_1^2 - 1},$$

soit

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{\beta_1} \frac{1}{t_1^2 - 1} \left[t_1^{|\ell - \ell'| + 1} + \sum_{n=1}^{+\infty} e^{inNka} t_1^{nN + \ell - \ell' + 1} + \sum_{n=-\infty}^{-1} e^{inNka} t_1^{-nN - \ell + \ell' + 1} \right].$$

En introduisant une nouvelle variable $t_1 = e^{q_1}$ l'expression ci dessus devient,

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{2\beta_1 e^{q_1} \text{sh}(q_1)} \left[e^{q_1(1+|\ell-\ell'|)} + \sum_{n=1}^{+\infty} e^{inNka} e^{q_1(nN+\ell-\ell'+1)} + \sum_{n=-\infty}^{-1} e^{inNka} e^{q_1(-nN-\ell+\ell'+1)} \right],$$

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{2\beta_1 \text{sh}(q_1)} \left[e^{q_1|\ell-\ell'|} + \sum_{n=1}^{+\infty} e^{inNka} e^{q_1(nN+\ell-\ell')} + \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-inNka} e^{q_1(nN-\ell+\ell')} \right],$$

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{2\beta_1 \text{sh}(q_1)} \left[e^{q_1|\ell-\ell'|} + e^{q_1(\ell-\ell')} \sum_{n=1}^{+\infty} e^{nN(q_1+ika)} + e^{q_1(-\ell+\ell')} \sum_{n=1}^{+\infty} e^{nN(q_1-ika)} \right],$$

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{2\beta_1 \text{sh}(q_1)} \left[e^{q_1|\ell-\ell'|} - e^{q_1(\ell-\ell')} - e^{q_1(-\ell+\ell')} + e^{q_1(\ell-\ell')} \sum_{n=0}^{+\infty} e^{nN(q_1+ika)} + e^{q_1(-\ell+\ell')} \sum_{n=0}^{+\infty} e^{nN(q_1-ika)} \right],$$

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{2\beta_1 \text{sh}(q_1)} \left[-e^{-q_1|\ell-\ell'|} + \frac{e^{q_1(\ell-\ell')}}{1 - e^{N(q_1+ika)}} + \frac{e^{q_1(-\ell+\ell')}}{1 - e^{N(q_1-ika)}} \right],$$

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{2\beta_1 \text{sh}(q_1)} \frac{\left\{ -e^{-q_1|\ell-\ell'|} \left(1 - e^{N(q_1+ika)} \right) \left(1 - e^{N(q_1-ika)} \right) + e^{q_1(\ell-\ell')} \left(1 - e^{N(q_1-ika)} \right) + e^{q_1(-\ell+\ell')} \left(1 - e^{N(q_1+ika)} \right) \right\}}{1 - e^{2Nq_1} \left(e^{iNka} + e^{-iNka} \right) + e^{2Nka}}$$

Ainsi,

Pour $\ell \geq \ell'$ la fonction réponse structurale est définie par :

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{2\beta_1 \text{sh}(q_1)} \frac{\text{sh}(\ell - N - \ell') - e^{-inka} \text{sh}q_1(\ell - \ell')}{\text{ch}(Nq_1) - \cos(Nka)}.$$

Pour $\ell \leq \ell'$ la fonction réponse structurale s'écrit sous l'expression ci dessous :

$$G_k(\ell - \ell', E) = \frac{m_1}{2\beta_1 \text{sh}(q_1)} \frac{\text{sh}(-\ell - N + \ell') - e^{inka} \text{sh}q_1(-\ell + \ell')}{\text{ch}(Nq_1) - \cos(Nka)}.$$

Appendice III

Cet appendice associé au chapitre V consiste en un calcul détaillé de la matrice dynamique et de la matrice d'énergie d'un cristal infini de structure cubique centrée, ainsi que celles d'un cristal semi-infini avec une surface libre.

III.1- Energie potentielle de N atomes identiques dans un cristal

L'énergie potentielle totale d'un cristal constitué de N atomes identiques interagissant entre eux par paire, avec des forces centrales est

$$\phi = \phi_0 + \sum_{\ell, \alpha} \phi_{\alpha}(\ell) u_{\alpha}(\ell) + \frac{1}{2} \sum_{\ell, \alpha} \sum_{\ell', \beta} \phi_{\alpha, \beta}(\ell, \ell') u_{\alpha}(\ell) u_{\beta}(\ell') + \dots, \quad (\text{III-1-1})$$

avec

$$\phi_{\alpha}(\ell) = \left. \frac{\partial \phi}{\partial u_{\alpha}(\ell)} \right|_{u_{\alpha}=0} \quad \text{et} \quad \phi_{\alpha\beta}(\ell\ell') = \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial u_{\alpha}(\ell) \partial u_{\beta}(\ell')} \right|_{u_{\alpha}=0, u_{\beta}=0} = \phi_{\beta\alpha}(\ell'\ell)$$

$u_{\alpha}(\ell)$ est la composante du déplacement de l'atome (ℓ) suivant l'une des trois directions de l'espace. Comme les forces sont centrales l'énergie potentielle du cristal ne dépend que de la distance $r(\ell\ell')$ séparant l'atome (ℓ) de l'atome (ℓ').

En effet,

soient $\vec{X}(\ell) = \sum_{\alpha=1}^3 \ell_{\alpha} \vec{a}_{\alpha}$ le vecteur position de l'atome (ℓ) dans le cristal monoatomique et $\vec{u}(\ell) = \sum_{\alpha=1}^3 u_{\alpha}(\ell) \vec{a}_{\alpha}$ son vecteur déplacement. Le vecteur joignant les atomes (ℓ) et (ℓ') est

$$\vec{r}(\ell\ell') = [\vec{X}(\ell') - \vec{X}(\ell)] + [\vec{u}(\ell') - \vec{u}(\ell)], \quad (\text{III-1-2})$$

ainsi, la distance séparant les deux atomes est donnée par la relation

$$r(\ell\ell') = \left[\sum_{\alpha=1}^3 (X_{\alpha}(\ell\ell') + u_{\alpha}(\ell\ell'))^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{III-1-3})$$

où

$$X_{\alpha}(\ell\ell') = X_{\alpha}(\ell') - X_{\alpha}(\ell) \text{ et } u_{\alpha}(\ell\ell') = u_{\alpha}(\ell') - u_{\alpha}(\ell).$$

Un atome (ℓ) du cristal est donc soumis à une force dont la composante suivant l'une des trois directions de l'espace est

$$F_{\alpha}(\ell) = -\frac{\partial \phi}{\partial u_{\alpha}(\ell)},$$

compte tenu de l'expression de l'énergie potentielle donnée par l'équation (III-1-1)

$$F_{\alpha}(\ell) = -\phi_{\alpha}(\ell) - \sum_{\ell', \beta} \phi_{\alpha\beta}(\ell\ell') u_{\beta}(\ell')$$

En considérant un cristal infini, à l'équilibre, un atome n'est soumis à aucune force ($\phi_{\alpha}(\ell) = 0$), ce qui nous permet d'écrire l'équation du mouvement d'un atome (ℓ) suivant une direction de l'espace comme suit:

$$M\ddot{u}_{\alpha}(\ell) = -\sum_{\ell', \beta} \phi_{\alpha\beta}(\ell\ell') u_{\beta}(\ell') \quad (\text{III-1-4})$$

* Calcul des $\phi_\alpha(\ell)$ et des $\phi_{\alpha\beta}(\ell\ell')$

Du fait que les forces sont centrales, l'énergie potentielle du cristal ne dépend que la distance $r=r(\ell\ell')$, par suite les $\phi_\alpha(\ell)$ et les $\phi_{\alpha\beta}(\ell\ell')$ seront définies par

$$\phi_\alpha(\ell) = \frac{\partial\phi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial u_\alpha(\ell)} = -X_\alpha(\ell\ell') D\phi(r), \quad (\text{III-1-5})$$

5)

alors que pour $\ell \neq \ell'$

$$\phi_{\alpha\beta}(\ell\ell') = \frac{\partial}{\partial u_\beta(\ell')} \left(\frac{\partial\phi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial u_\alpha(\ell)} \right) = -X_\alpha(\ell\ell') X_\beta(\ell\ell') D^2\phi(r) - \delta_{\alpha\beta} D\phi(r), \quad (\text{III-1-6})$$

où

$$\underline{D\phi(r)} = \frac{\phi'(r)}{r} \quad \text{et} \quad D^2\phi(r) = \frac{\phi''(r)}{r^2} - \frac{\phi'(r)}{r^3}.$$

Pour $\ell = \ell'$ la condition d'invariance par translation nous permet d'écrire

$$\phi_{\alpha\beta}(\ell\ell) = -\sum_{\ell \neq \ell'} \phi_{\alpha\beta}(\ell\ell') \quad (\text{III-1-7})$$

III.2- Cas d'un cristal infini de structure cubique centrée

Dans ce qui suit nous considérerons un cristal infini de structure cubique centrée constitué d'atomes identiques interagissant entre eux par paire, avec des forces centrales.

$d_1 = a \frac{\sqrt{3}}{2}$ et $d_2 = a$ (paramètre du réseau) sont respectivement les distances entre atomes

premiers et seconds voisins. Sachant qu'un atome est entouré de huit atomes premiers voisins et six seconds voisins, en se limitant aux interactions entre atomes premiers et second voisins l'énergie potentielle du cristal à l'équilibre est

$$\phi(a) = \frac{N}{2} \left[8\phi\left(a \frac{\sqrt{3}}{2}\right) + 6\phi(a) \right] \quad (\text{III-2-1})$$

N est le nombre d'atomes du cristal, $\varphi\left(a\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$ et $\varphi(a)$ sont respectivement les constantes de force du premier et seconds ordre entre atomes premiers et seconds voisins, l'équation ci dessus nous permet d'écrire la condition d'équilibre $\frac{\partial\phi(a)}{\partial a} = 0$ pour le cristal sous l'expression

$$-\frac{\varphi\left(a\frac{\sqrt{3}}{2}\right)}{a\frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{\varphi(a)}{a} = \lambda \quad (\text{III-2-2})$$

III.2.1- Calcul des constantes de forces $\phi_{\alpha\beta}(\ell\ell')$

Les constantes de force $\phi_{\alpha\beta}(\ell\ell')$ sont définies à partir de l'équation (III-1-6). Comme le cristal considéré est de structure cubique centrée, nous choisissons comme origine du trièdre directe $(O, \bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ l'atome placé au centre d'une maille élémentaire, cet atome est entouré de huit atomes premiers voisins dont les coordonnées sont (ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3) , avec $\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1$ et de six seconds voisins dont les coordonnées sont $(\ell_1, 0, 0)$, $(0, \ell_2, 0)$ et $(0, 0, \ell_3)$, avec dans ce cas $\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 2$.

* Constantes de force entre l'atome $(0,0,0)$ et ses premiers voisins

En posant $\beta_1 = \phi''(d_1)$ et en tenant compte de l'équation (III-2-2), les constantes de force entre l'atome (000) et ses premiers voisins sont données par les expressions suivantes

$$\phi_{\alpha\alpha}(000, \ell_1\ell_2\ell_3) = -\frac{1}{3}(\beta_1 - 2\lambda), \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (\text{III-2-3})$$

$$\phi_{12}(000, \ell_1\ell_2\ell_3) = \phi_{21}(000, \ell_1\ell_2\ell_3) = -\frac{\ell_1\ell_2}{3}(\beta_1 + \lambda) \quad (\text{III-2-4})$$

$$\phi_{13}(000, l_1 l_2 l_3) = \phi_{31}(000, l_1 l_2 l_3) = -\frac{l_1 l_3}{3}(\beta_1 + \lambda) \quad (\text{III-2-5})$$

$$\phi_{23}(000, l_1 l_2 l_3) = \phi_{32}(000, l_1 l_2 l_3) = -\frac{l_2 l_3}{3}(\beta_1 + \lambda) \quad (\text{III-2-6})$$

*** Constantes de force entre l'atome (0,0,0) et ses seconds voisins**

En posant $\beta_2 = \phi''(d_2)$ et en tenant compte de l'équation (III-2-2), les constantes de force entre l'atome (000) et ses premiers voisins sont données par les expressions suivantes

$$\phi_{\alpha\beta}(000, l_1 00) = \phi_{\alpha\beta}(000, 0l_2 0) = \phi_{\alpha\beta}(000, 00l_3) = 0, \text{ pour } \alpha \neq \beta \quad (\text{III-2-7})$$

$$\phi_{11}(000, l_1 00) = \phi_{22}(000, 0l_2 0) = \phi_{33}(000, 00l_3) = -\beta_2 \quad (\text{III-2-8})$$

$$\phi_{22}(000, l_1 00) = \phi_{33}(000, l_1 00) = -\lambda \quad (\text{III-2-9})$$

$$\phi_{11}(000, 0l_2 0) = \phi_{33}(000, 0l_2 0) = -\lambda \quad (\text{III-2-10})$$

$$\phi_{22}(000, 00l_3) = \phi_{33}(000, 00l_3) = -\lambda \quad (\text{III-2-11})$$

III.2.2- Equations du mouvement de l'atome (0,0,0) et expression de la matrice dynamique $\tilde{D}(k, \omega)$

Le mouvement d'un atome (ℓ) du cristal est régi par l'équation

$$M\ddot{u}_\alpha(\ell) = -\sum_{\ell', \beta} \phi_{\alpha\beta}(\ell\ell') u_\beta(\ell'),$$

ainsi compte tenu des équations (III-2-3) à (III-2-11) le mouvement de l'atome (0,0,0) suivant l'axe (1) est régi par l'équation

$$M\ddot{u}_1(000) = -\frac{(\beta_1 - 2\lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1} [u_1(\ell_1 \ell_2 \ell_3) - u_1(000)] - \frac{(\beta_1 + \lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1} [\ell_1 \ell_2 u_2(\ell_1 \ell_2 \ell_3) + \ell_1 \ell_3 u_3(\ell_1 \ell_2 \ell_3)] - \beta_2 \sum_{\ell_1 = \pm 2} [u_1(\ell_1 00) - u_1(000)] - \lambda \sum_{\ell_2, \ell_3 = \pm 2} [u_1(0\ell_2 0) + u_1(00\ell_3) - 2u_1(000)]. \quad (\text{III-2-12})$$

Par permutation des indices 1, 2 et 3, nous obtenons les équations du mouvement de l'atome (0,0,0) suivant les axes (2) et (3).

$$M\ddot{u}_2(000) = -\frac{(\beta_1 - 2\lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1} [u_2(\ell_1 \ell_2 \ell_3) - u_2(000)] - \frac{(\beta_1 + \lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1} [\ell_1 \ell_2 u_1(\ell_1 \ell_2 \ell_3) + \ell_2 \ell_3 u_3(\ell_1 \ell_2 \ell_3)] - \beta_2 \sum_{\ell_2 = \pm 2} [u_2(0\ell_2 0) - u_2(000)] - \lambda \sum_{\ell_1, \ell_3 = \pm 2} [u_2(\ell_1 00) + u_2(00\ell_3) - 2u_2(000)]. \quad (\text{III-2-13})$$

$$M\ddot{u}_3(000) = -\frac{(\beta_1 - 2\lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1} [u_3(\ell_1 \ell_2 \ell_3) - u_3(000)] - \frac{(\beta_1 + \lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1} [\ell_1 \ell_3 u_1(\ell_1 \ell_2 \ell_3) + \ell_2 \ell_3 u_2(\ell_1 \ell_2 \ell_3)] - \beta_2 \sum_{\ell_3 = \pm 2} [u_3(00\ell_3) - u_3(000)] - \lambda \sum_{\ell_1, \ell_2 = \pm 2} [u_3(\ell_1 00) + u_3(0\ell_2 0) - 2u_3(000)]. \quad (\text{III-2-14})$$

En considérant que les vecteurs déplacement suivant les trois axes s'écrivent

$$u_\alpha(\ell_1 \ell_2 \ell_3) = U_\alpha(k, \omega) e^{-i\omega t} e^{j(\ell_1 k_1 + \ell_2 k_2 + \ell_3 k_3) \frac{a}{2}}, \quad \alpha = 1, 2, \quad (\text{III-2-15})$$

$$u_3(\ell_1 \ell_2 \ell_3) = -j U_3(k, \omega) e^{-i\omega t} e^{j(\ell_1 k_1 + \ell_2 k_2 + \ell_3 k_3) \frac{a}{2}}.$$

En introduisant ces expressions dans les équations (III-2-12), (III-2-13) et (III-2-14) nous obtenons la matrice dynamique $\ddot{D}(k, \omega)$ définie par

$$D(k, \omega) = \ddot{D}(k) - I\omega^2.$$

L'expression matricielle de la matrice dynamique $\tilde{D}(k, \omega)$ est

$$D(k, \omega) = \begin{bmatrix} \Lambda_1(1-C_1C_2C_3) + \Lambda_2(1-C_1) + \Lambda_3(2-C_2-C_3) - \omega^2 & (\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1S_2C_3 & i(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1C_2S_3 \\ (\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1S_2C_3 & \Lambda_1(1-C_1C_2C_3) + \Lambda_2(1-C_2) + \Lambda_3(2-C_1-C_3) - \omega^2 & i(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)C_1S_2S_3 \\ -i(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1C_2S_3 & -i(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)C_1S_2S_3 & -i \begin{bmatrix} \Lambda_1(1-C_1C_2C_3) + \Lambda_2(1-C_3) + \Lambda_3(2-C_1-C_3) - \omega^2 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad (\text{III-2-16})$$

où

$$C_\alpha = \cos\left(\frac{k_\alpha a}{2}\right), \quad S_\alpha = \sin\left(\frac{k_\alpha a}{2}\right), \quad C'_\alpha = \cos(k_\alpha a), \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

$$\Lambda_1 = \frac{8\beta_1 - 16\lambda}{3M}, \quad \Lambda_2 = \frac{2\beta_2}{M}, \quad \Lambda_3 = \frac{2\lambda}{M}$$

III.2.3- Matrice d'énergie $\tilde{H}_0(k_1, k_2, \ell_3, \ell'_3, \omega)$ associée au cristal infini

Pour étudier les surfaces planes et interface perpendiculaire à la direction cristallographique (001), il est nécessaire d'introduire la matrice d'énergie $\tilde{H}_0(k_1, k_2, \ell_3, \ell'_3, \omega)$ transformée de Fourier de la matrice dynamique $\tilde{D}(k, \omega)$. En effet, la matrice d'énergie dans sa forme explicite $\tilde{H}_0(k_{//}, \Delta\ell_3, \omega)$ est déduite de la matrice dynamique à partir de la relation

$$D_{ij}(k, \omega) = D_{ij}(k_{//}, k_3, \omega) = \sum_{\Delta\ell_3=-2}^2 H_{0ij}(k_{//}, \Delta\ell_3, \omega) e^{j \frac{ak_3 \Delta\ell_3}{2}} \quad (\text{III-2-10})$$

Il vient alors que

$$D_{ij}(k, \omega) = H_{oij}(k_{//}, -2, \omega)e^{-jk_3a} + H_{oij}(k_{//}, -1, \omega)e^{-j\frac{k_3a}{2}} + H_{oij}(k_{//}, 0, \omega) + H_{oij}(k_{//}, 1, \omega)e^{j\frac{k_3a}{2}} + H_{oij}(k_{//}, 2, \omega)e^{jk_3a}$$

En prenant $i, j=1, 2, 3$ et en identifiant chaque élément de la matrice $\underline{\underline{D}}(k, \omega)$ au deuxième membre de l'égalité ci dessus nous trouvons :

$$H_{011}(k_{//}, -2, \omega) = H_{011}(k_{//}, 2, \omega) = H_{022}(k_{//}, -2, \omega) = H_{022}(k_{//}, 2, \omega) = -\frac{\Lambda_3}{2},$$

$$H_{012}(k_{//}, -2, \omega) = H_{012}(k_{//}, 2, \omega) = H_{012}(k_{//}, 0, \omega) = 0,$$

$$H_{021}(k_{//}, -2, \omega) = H_{021}(k_{//}, 2, \omega) = H_{021}(k_{//}, 0, \omega) = 0,$$

$$H_{013}(k_{//}, -2, \omega) = H_{013}(k_{//}, 2, \omega) = H_{013}(k_{//}, 0, \omega) = 0,$$

$$H_{031}(k_{//}, -2, \omega) = H_{031}(k_{//}, 2, \omega) = H_{031}(k_{//}, 0, \omega) = 0,$$

$$H_{011}(k_{//}, 0, \omega) = \Lambda_1 + \Lambda_2(1 - C_1') + \Lambda_3(2 - C_2') - \omega^2,$$

$$H_{022}(k_{//}, 0, \omega) = \Lambda_1 + \Lambda_2(1 - C_2') + \Lambda_3(2 - C_1') - \omega^2,$$

$$H_{011}(k_{//}, 0, \omega) = \Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3(2 - C_1' - C_2') - \omega^2,$$

$$H_{022}(k_{//}, -1, \omega) = H_{022}(k_{//}, 1, \omega) = -\frac{\Lambda_1 C_1 C_2}{2},$$

$$H_{033}(k_{//}, -1, \omega) = H_{033}(k_{//}, 1, \omega) = -\frac{\Lambda_1 C_1 C_2}{2},$$

$$H_{012}(k_{//}, -1, \omega) = H_{012}(k_{//}, 1, \omega) = H_{021}(k_{//}, -1, \omega) = H_{021}(k_{//}, 1, \omega) = \frac{(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1S_2}{2},$$

$$H_{013}(k_{//}, -1, \omega) = -H_{013}(k_{//}, 1, \omega) = -\frac{(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1C_2}{2},$$

$$H_{031}(k_{//}, -1, \omega) = -H_{031}(k_{//}, 1, \omega) = -\frac{(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)S_1C_2}{2},$$

$$H_{023}(k_{//}, -1, \omega) = -H_{023}(k_{//}, 1, \omega) = H_{032}(k_{//}, -1, \omega) = -H_{032}(k_{//}, 1, \omega) = -\frac{(\Lambda_1 + 4\Lambda_3)C_1S_2}{2},$$

$$H_{033}(k_{//}, 2, \omega) = H_{012}(k_{//}, -2, \omega) = -\frac{\Lambda_2}{2}.$$

III.3- Cas d'un cristal semi-infini de structure cubique centrée

Considérons le cristal infini de structure cubique centrée, en procédant par un clivage entre les plans atomiques $\ell_3 = 0$ et $\ell_3 = 1$, nous obtenons deux cristaux semi-infinis présentant une surface libre (001) en $\ell_3 = 0$ et $\ell_3 = 1$. Un atome du plan $\ell_3 = 1$ sera donc entouré de quatre atome premiers voisins et de cinq atome second voisins et en tenant compte des équations (III-2-3) et (III-2-4) ses équations du mouvement suivant les trois directions de l'espace sont telle que

$$M\ddot{u}_1(000) = -\frac{(\beta_1 - 2\lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2 = \pm 1} [u_1(\ell_1 \ell_2 1) - u_1(000)] - \frac{(\beta_1 + \lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1} [\ell_1 \ell_2 u_2(\ell_1 \ell_2 1) + \ell_1 u_3(\ell_1 \ell_2 1)] - \beta_2 \sum_{\ell_1 = \pm 2} [u_1(\ell_1 00) - u_1(000)] - \lambda \left\{ [u_1(002) - u_1(000)] + \sum_{\ell_2 = \pm 2} [u_1(0 \ell_2 0) - u_1(000)] \right\}. \quad (\text{III-3-1})$$

Par permutation des indices 1, 2 et 3, nous obtenons les équations du mouvement de l'atome (0,0,0) suivant les axes (2) et (3).

$$M\ddot{u}_2(000) = -\frac{(\beta_1 - 2\lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2 = \pm 1} [u_2(\ell_1 \ell_2 1) - u_2(000)] - \frac{(\beta_1 + \lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2 = \pm 1} [\ell_1 \ell_2 u_1(\ell_1 \ell_2 1) + \ell_2 u_3(\ell_1 \ell_2 1)] -$$

$$\beta_2 \sum_{\ell_2 = \pm 2} [u_2(0 \ell_2 0) - u_2(000)] - \lambda \left\{ [u_2(002) - u_2(000)] + \sum_{\ell_1 = \pm 2} [u_2(\ell_1 00) - u_2(000)] \right\}. \quad (\text{III-3-2})$$

$$M\ddot{u}_3(000) = -\frac{(\beta_1 - 2\lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1} [u_3(\ell_1 \ell_2 \ell_3) - u_3(000)] - \frac{(\beta_1 + \lambda)}{3} \sum_{\ell_1, \ell_2, \ell_3 = \pm 1} [\ell_1 \ell_3 u_1(\ell_1 \ell_2 \ell_3) + \ell_2 \ell_3 u_2(\ell_1 \ell_2 \ell_3)] -$$

$$\beta_2 \sum_{\ell_3 = \pm 2} [u_3(00 \ell_3) - u_3(000)] - \lambda \left\{ [u_2(002) - u_2(000)] + \sum_{\ell_1 = \pm 2} [u_3(\ell_1 00) - u_3(000)] \right\}. \quad (\text{III-3-3})$$

En introduisant les expressions des composantes du vecteur déplacement des atomes (équation III-2-16) dans les équations du mouvement ci dessus, nous obtenons la matrice dynamique $\vec{d}(k, \omega)$ s'écrivant par

$$\vec{d}(k, \omega) = \begin{bmatrix} \frac{\Lambda_1}{2} \left(1 - C_1 C_2 e^{j \frac{k_3 a}{2}} \right) + \Lambda_2 (1 - C_1) + & \left(\frac{\Lambda_1}{2} + 2\Lambda_3 \right) S_1 S_2 e^{j \frac{k_3 a}{2}} & \left(\frac{\Lambda_1}{2} + 2\Lambda_3 \right) S_1 C_2 e^{j \frac{k_3 a}{2}} \\ \frac{\Lambda_3}{2} (3 - 2C_2 - e^{j k_3 a}) - \omega^2 & & \\ \left(\frac{\Lambda_1}{2} + 2\Lambda_3 \right) S_1 S_2 e^{j \frac{k_3 a}{2}} & \frac{\Lambda_1}{2} \left(1 - C_1 C_2 e^{j \frac{k_3 a}{2}} \right) + \Lambda_2 (1 - C_2) + & \left(\frac{\Lambda_1}{2} + 2\Lambda_3 \right) C_1 S_2 e^{j \frac{k_3 a}{2}} \\ & \Lambda_3 (3 - 2C_1 - e^{j k_3 a}) - \omega^2 & \\ - \left(\frac{\Lambda_1}{2} + 2\Lambda_3 \right) S_1 C_2 e^{j \frac{k_3 a}{2}} & - \left(\frac{\Lambda_1}{2} + 2\Lambda_3 \right) C_1 S_2 e^{j \frac{k_3 a}{2}} & \frac{\Lambda_1}{2} \left(1 - C_1 C_2 e^{-j \frac{k_3 a}{2}} \right) + \frac{\Lambda_2}{2} (1 - e^{j k_3 a}) + \\ & & \Lambda_3 (2 - C_1 - C_2) - \omega^2 \end{bmatrix} \quad (\text{III-3-4})$$

où

$$C_\alpha = \cos\left(\frac{k_i a}{2}\right), \quad S_\alpha = \sin\left(\frac{k_i a}{2}\right), \quad C'_\alpha = \cos(k_i a), \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

$$\Lambda_1 = \frac{8\beta_1 - 16\lambda}{3M}, \quad \Lambda_2 = \frac{2\beta_2}{M}, \quad \Lambda_3 = \frac{2\lambda}{M}$$

la matrice d'énergie \tilde{h}_0 associée au cristal semi-infini est déduite de la matrice dynamique à partir de la formule ci dessus

$$d_{ij}(k, \omega) = \sum_{\Delta \ell_3 = -2}^2 h_{0ij}(k_{//}, \Delta \ell_3, \omega) e^{j \frac{ak_3 \Delta \ell_3}{2}}, \Delta \ell_3 = \ell'_3 - \ell_3 \text{ avec } \ell_3 = 1 \quad (\text{III-3-5})$$

Il vient alors que

$$d_{ij}(k, \omega) = h_{0ij}(k_{//}, 1, -1, \omega) e^{-j \frac{k_3 a}{2}} + h_{0ij}(k_{//}, 1, 0, \omega) e^{-j \frac{k_3 a}{2}} + h_{0ij}(k_{//}, 1, 1, \omega) + h_{0ij}(k_{//}, 1, 2, \omega) e^{j \frac{k_3 a}{2}} + h_{0ij}(k_{//}, 1, 3, \omega) e^{jk_3 a}$$

Compte tenu des expressions des éléments de la matrice dynamique $\tilde{d}(k, \omega)$ nous déduisons que

$$\begin{aligned} h_{0ij}(k_{//}, 1, -1, \omega) &= h_{0ij}(k_{//}, 1, 0, \omega) = 0 \quad \forall i, j = 1, 2, 3 \\ h_{0ij}(k_{//}, 1, \ell'_3, \omega) &= H_{0ij}(k_{//}, 1, \ell'_3, \omega) = 0 \quad \forall i \neq j \text{ pour } \ell'_3 = 1, 2, 3 \\ h_{011}(k_{//}, 1, 1, \omega) &= \frac{\Lambda_1}{2} + \Lambda_2(1 - C'_1) + \Lambda_3\left(\frac{3}{2} - C'_2\right) - \omega^2 \\ h_{022}(k_{//}, 1, 1, \omega) &= \frac{\Lambda_1}{2} + \Lambda_2(1 - C'_2) + \Lambda_3\left(\frac{3}{2} - C'_1\right) - \omega^2 \\ h_{033}(k_{//}, 1, 1, \omega) &= \frac{\Lambda_1}{2} + \frac{\Lambda_2}{2} + \Lambda_3(2 - C'_1 - C'_2) - \omega^2 \end{aligned} \quad (\text{III-3-6})$$

En procédant de la même manière pour un atome se trouvant dans le plan atomique $\ell_3 = 2$, nous aboutissons à :

$$\begin{aligned} h_{0ij}(k_{//}, 2, 0, \omega) &= \quad \forall i, j \\ h_{0ij}(k_{//}, 2, \ell'_3, \omega) &= H_{0ij}(k_{//}, 1, \ell'_3, \omega) = 0 \quad \forall i \neq j \text{ pour } \ell'_3 = 2, 3, 4 \\ h_{011}(k_{//}, 2, 2, \omega) &= \Lambda_1 + \Lambda_2(1 - C'_1) + \Lambda_3\left(\frac{3}{2} - C'_2\right) - \omega^2 \\ h_{022}(k_{//}, 2, 2, \omega) &= \Lambda_1 + \Lambda_2(1 - C'_2) + \Lambda_3\left(\frac{3}{2} - C'_1\right) - \omega^2 \\ h_{033}(k_{//}, 1, 1, \omega) &= \Lambda_1 + \frac{\Lambda_2}{2} + \Lambda_3(2 - C'_1 - C'_2) - \omega^2 \end{aligned}$$

III-3-7)

Sachant que l'opérateur de clivage $\vec{V}_0(k_{//}, \ell_3, \ell'_3)$ est défini par la relation

$$\vec{V}_0(k_{//}, \ell_3, \ell'_3) = \vec{h}_0(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) - \vec{H}_0(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega), \quad (\text{III-3-8})$$

nous déduisons que la perturbation introduite par la création de la surface propre au plan $\ell_3 = 1$ est traduite par la définition ci dessous de l'opérateur de clivage

$$V_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3) = -H_{0ij}(k_{//}, \ell_3, \ell'_3, \omega) \text{ pour } \ell_3 = 1, 2 \text{ et } \ell'_3 = -1, 0 \forall i, j = 1, 2, 3$$

$$V_{011}(k_{//}, 1, 1) = V_{022}(k_{//}, 1, 1) = -\frac{\Lambda_1 + \Lambda_3}{2}$$

$$V_{033}(k_{//}, 1, 1) = -\frac{\Lambda_1 + \Lambda_2}{2}$$

$$V_{011}(k_{//}, 2, 2) = V_{022}(k_{//}, 2, 2) = -\frac{\Lambda_3}{2}$$

$$V_{033}(k_{//}, 2, 2) = -\frac{\Lambda_2}{2}$$

(III-3-9)

