

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

Abdelkrim KHELIF

Sujet de Thèse

**PROPRIETES DE VIBRATION ET DE DIFFUSION DE
NANOSTRUCTURES EN SURFACE**

Soutenue le 11 Mars 1998 devant la Commission d'Examen



Membres du Jury :

Président : **J. LEFEBVRE**, Professeur, Université de Lille I
Rapporteurs : **P. DEYMIER**, Professeur, Université de Tucson, Arizona
A. KHATER, Professeur, Université du Mans
P. MASRI, Chargé de recherches, Univ. de Montpellier
Examineurs : **L. DOBRZYNSKI**, Directeur de Recherches, Université de Lille I
A. AKJOUJ, Maître de Conférences, Université de Lille I
Directeur de Thèse : **B. DJAFARI-ROUHANI**, Professeur, Université de Lille I

Remerciements

Ce travail a été réalisé à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, dans le Laboratoire de dynamique et Structure des Matériaux Moléculaires dirigé par Monsieur le Professeur J. Lefebvre auquel j'adresse ma profonde gratitude et mes remerciements pour avoir accepté de faire partie du jury de soutenance de cette thèse et d'en être le président.

J'exprime ma profonde reconnaissance au professeur Bahram Djafari-Rouhani, sous la direction duquel j'ai accompli ce travail. Les discussions avec lui m'ont beaucoup aidé à faire progresser cette thèse. Son attention constante à mon travail et son humanisme m'ont beaucoup encouragé. Ce travail n'aurait pu voir le jour sans son soutien et sa disponibilité. Je lui en suis gré infiniment.

Je remercie également Messieurs P. Deymier, Professeur à l'Université de Tucson (USA) ; A. Khater, Professeur à l'Université du Mans et P. Masri Chargé de Recherches au C.N.R.S. à l'Université de Montpellier pour avoir accepté de juger mon travail et en être les rapporteurs.

Que Messieurs L. Dobrzynski, Directeur de Recherches au C.N.R.S. et A. Akjouj, Maître de conférences à l'Université de Lille 1, trouvent ici l'expression de ma profonde reconnaissance pour les conseils et les encouragements et pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

J'exprime mes sincères remerciements à toute l'Equipe de Dynamique des Interfaces. Que tous ceux qui ont contribué à la réalisation matérielle de ce document, en l'occurrence Mlle D. Danièle pour la frappe d'une partie de ce mémoire, S. Fauquembergue pour les tirages, reçoivent mes vifs remerciements.

Enfin, les travaux numériques de cette thèse ont été réalisés grâce au soutien apporté au laboratoire par Le Conseil Régional Nord-Pas de Calais à travers la filière « simulations numériques de l'axe Matériaux.

Résumé

Dans ce travail, nous étudions les propriétés spectrales (modes localisés, résonances) de nanostructures intégrées sur ou près d'une surface ainsi que la diffusion d'ondes par ces défauts. En utilisant le formalisme de la fonction de Green, nous avons mis au point une méthode numérique exacte pour obtenir les propriétés vibrationnelles (densité d'états, diffusion d'une onde incidente en champ proche ou lointain) associées à un fil ou à une assemblée périodique de fils déposés sur la surface plane d'un substrat. L'avantage de la méthode est de pouvoir envisager à la fois une géométrie arbitraire de la section du fil et de choisir des matériaux différents pour le fil et pour le substrat. Nous avons appliqué cette méthode à l'étude des vibrations acoustiques de polarisation transverse.

Dans le cas d'un seul fil déposé, nous avons déterminé les résonances acoustiques à partir des pics de densités d'états totales et locales. On peut obtenir des résonances très bien définies dont les fréquences dépendent des paramètres relatifs des deux matériaux ainsi que de la géométrie du fil. Dans certains cas, les fréquences de résonance peuvent être reliées aux modes propres du fil isolé (non supporté). Par exemple, dans le cas d'un fil plus dur que le substrat, les résonances résultent d'un élargissement des modes propres discrets du fil isolé. Par ailleurs, les pics de résonance deviennent plus fins et plus intenses lorsqu'on augmente la hauteur du fil déposé (comparée à sa base). Nous avons aussi exploré l'évolution de ces résonances résultant de la présence de deux fils voisins sur une surface.

Un chapitre de ce mémoire est consacré à l'étude de la diffusion d'une onde incidente par un fil déposé. Celle-ci peut être utilisée dans l'évaluation non destructive et l'imagerie de ces objets. En incidence normale ou à faible angle d'incidence, l'amplitude de l'onde diffusée présente une série d'augmentations et de diminutions successives en fonction de la fréquence. Les fréquences pour lesquelles l'amplitude devient minimale correspondent aux modes propres symétriques du fil isolé. En dehors de l'incidence normale, une grande variété de situations peut se produire. Néanmoins, nous avons souligné un comportement assez général dans le cas où la vitesse du son dans le fil est supérieure à celle dans le substrat, à savoir la prédominance de la diffusion en direction de la réflexion spéculaire.

Nous avons aussi examiné les modes localisés et résonnants associés à une assemblée périodique de fils déposés sur un substrat. On a montré qu'il peut exister une ou plusieurs branches de modes de surface en dessous de la bande de volume selon les paramètres élastiques et la géométrie des fils, mais aussi selon la périodicité du système. Par ailleurs, les courbes de dispersion des modes résonnants présentent une faible variation en fonction du vecteur d'onde sauf au voisinage de leurs croisements avec les repliements du bas de la bande de volume dans la zone de Brillouin. Cependant, leurs positions en fréquence sont assez proches de celles de résonances associées à un seul fil adsorbé.

Finalement, notre formalisme pourra être étendu pour aborder d'autres types d'excitations ainsi que des géométries plus complexes (amas, fissure, composite...).

Mots clés :

- * Ondes acoustiques de surface
- * Nanostructures
- * Modes localisés et résonnants
- * Diffusion acoustique
- * Défauts de surface
- * Densités d'états

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE.....5

CHAPITRE I :10

Résonances acoustiques associées à un fil déposé sur un substrat

CHAPITRE II :60

Diffusion des ondes acoustiques par un fil déposé sur un substrat

CHAPITRE III :90

Résonances acoustiques associées à une assemblée périodique de fils supportés

CONCLUSION GENERALE133

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

L'étude des propriétés des surfaces et interfaces et de leurs applications a connu un développement important depuis les années 60, en liaison avec les progrès dans les techniques de réalisation d'ultravide. Ces développements ont été accompagnés par les avancées théoriques et expérimentales dans les méthodes d'investigation des surfaces, en particulier les techniques spectroscopiques basées sur l'interaction de la matière avec les particules extérieures.

Ces études, commencées pour les surfaces parfaites et planes, ont été poursuivies par celles sur les interfaces, les couches et multicouches adsorbées, les super-réseaux... Assez rapidement, on s'est également intéressé aux propriétés des défauts de surfaces idéales, tant à l'échelle atomique (lacunes, marches...) qu'à l'échelle microscopique (rugosité de surface, amas...).

De plus, les progrès récents dans les techniques de microlithographie et de croissance cristalline ont permis de réaliser des structures, artificielles ou auto-organisées, de dimensions microscopiques ou nanoscopiques (en particulier les fils et amas quantiques) ayant des formes et tailles bien caractérisées. Les développements des techniques de microscopie en champ proche permettent de plus en plus de faire une imagerie de ces objets mais aussi de déterminer leurs propriétés fondamentales telles que leurs excitations élémentaires par exemple.

Sur le plan théorique, plusieurs outils de calcul ont été développés afin d'étudier les propriétés d'objets tels que les fils ou amas, d'une part en tenant compte de la forme et de la nature de ces objets, d'autre part en les plaçant non seulement dans un environnement de volume mais aussi dans le voisinage d'une surface ou d'une interface.

C'est dans ce contexte que s'inscrit notre travail : en choisissant le cas des ondes acoustiques, nous nous intéressons à la détermination des propriétés spectrales (modes localisés, résonances) de fils déposés sur la surface d'un substrat, ainsi qu'à l'étude de la diffusion d'ondes par ces inhomogénéités qui peut être utilisée dans l'évaluation non destructives et l'imagerie de ces objets.

Un premier objectif de ce travail sera d'élaborer de nouveaux outils pour cette investigation qui pourront aussi être appliqués à d'autres types d'excitations ou d'autres géométries de matériaux composites. Notre second objectif sera une étude exhaustive des propriétés de vibration et de diffusion des ondes acoustiques pour les fils supportés en fonction de la géométrie des fils et des paramètres physiques (constantes élastiques et densités de masse) des matériaux considérés. Plus précisément, nous aborderons d'une part l'étude des résonances acoustiques associées à un , deux ou une assemblée périodique de fils déposés sur un substrat ; nous analyserons d'autre part la diffusion d'une onde acoustique incidente par un fil en surface en déterminant à la fois les champs proche et lointain. Néanmoins, pour des raisons de simplicité, cette première étude sera limitée au cas d'ondes de polarisation transverse, dont le champ de déplacement comporte une seule composante parallèle à l'axe des fils.

Ces études présentent évidemment un intérêt pour la compréhension des propriétés vibrationnelles de nanostructures en surface, pour l'investigation de modes ou comportements

nouveaux et pour les applications en acoustique telles que la réalisation de transducteurs. Citons en particulier la possibilité de propagation d'une onde localisée à la surface en présence d'une assemblée périodique de fils adsorbés alors que pour la polarisation transverse une telle onde ne peut pas exister à la surface plane d'un substrat. Nos études présentent également un intérêt pour leur application potentielle à d'autres types d'excitations ou d'autres systèmes physiques.

Le formalisme utilisé dans ce travail est celui des fonctions de Green. La connaissance de la fonction de Green pour le fil supporté permet de disposer directement dans ce système complexe des densités d'états locales mais aussi totales, et d'obtenir le champ diffusé pour une onde incidente. On peut ainsi connaître les modes localisés et résonnants du système qui apparaissent comme des pics importants des densités d'états ainsi que leurs répartitions spatiales. De même, la diffusion d'une onde incidente par le fil supporté peut être étudiée à la fois dans le voisinage du fil ou à grande distance. Un autre avantage de la méthode utilisée est de pouvoir envisager une géométrie arbitraire du fil ainsi que d'aborder les cas où le fil est constitué d'un matériau différent de celui du substrat. Sur le plan du calcul, un avantage du formalisme de la fonction de Green réside dans le fait qu'on peut dans une première étape effectuer l'ensemble des calculs dans un espace limité qui est celui des interfaces, la détermination des éléments de la fonction de Green dans l'espace complet pouvant être aisément effectué dans un second temps. Enfin, on peut noter que notre calcul permet aussi d'étudier directement les propriétés du fil dans deux autres géométries qui intéressent les recherches actuelles : celle d'un fil isolé c'est-à-dire non supporté (cette géométrie intervient comme une étape intermédiaire du calcul avant de passer au fil supporté) ; celle d'un fil confiné au sein d'un milieu infini.

Cependant, il existe une contrainte dans cette méthode à savoir la nécessité de connaître au préalable la fonction de Green d'un milieu homogène et celle d'un substrat semi-infini. C'est la raison pour laquelle nous avons limité ce travail au cas des ondes de polarisation transverse car dans ce cas ces ingrédients de base du calcul sont précisément connus analytiquement. Néanmoins, le formalisme reste général et peut être appliqué à d'autres polarisations, voire (comme indiqué ci-dessus) à d'autres excitations et d'autres géométries.

Ce travail est structuré de la façon suivante. Dans le chapitre I, nous présentons d'abord un bref rappel du formalisme de la fonction de Green pour un matériau composite élastique. Ensuite, nous déterminons cette fonction de Green pour un fil isolé de forme arbitraire et pour un fil déposé sur un substrat ; nous en déduisons les densités d'états locales et totales ainsi que les résonances acoustiques associées au fil supporté. Dans le chapitre II nous abordons l'étude de la diffusion d'une onde acoustique par un fil déposé sur la surface plane d'un substrat. Le chapitre III porte sur les modes résonnants et localisés d'une assemblée périodiques de fils déposés sur le substrat.

CHAPITRE I

**Résonances acoustiques associées à un fil déposé sur
un substrat**

SOMMAIRE

I) <u>INTRODUCTION</u>	11
II) <u>ELEMENTS SUR LE FORMALISME DE LA FONCTION DE GREEN D'UN MATERIAU COMPOSITE ELASTIQUE</u>	15
II-1) <u>Fonction de Green de volume d'un milieu homogène infini</u>	15
II-2) <u>Fonction de Green de surface d'un milieu homogène</u>	16
II-3) <u>Fonction de Green d'un matériau composite</u>	18
III) <u>FONCTION DE GREEN D'UN FIL ADSORBE SUR UN SUBSTRAT : CAS DES MODES TRANSVERSES</u>	21
III-1) <u>Milieu infini homogène et isotrope</u>	21
III-2) <u>Fil isolé</u>	23
III-3) <u>Milieu isotrope semi-infini</u>	28
III-4) <u>Fil adsorbé</u>	29
IV) <u>DENSITES D'ETATS ET RESONANCES</u>	31
V) <u>APPLICATION ET DISCUSSION DES RESULTATS</u>	36
V-1) <u>Les résonances acoustiques associées à un fil adsorbé</u>	37
IV-2) <u>Les résonances acoustiques associées à deux fils adsorbés</u>	49
VI) <u>CONCLUSION</u>	52
<u>APPENDICE A</u>	54
<u>BIBLIOGRAPHIE</u>	57

**Résonances acoustiques associées à un fil déposé sur
un substrat**

I) Introduction

L'étude des propriétés vibrationnelles des surfaces et interfaces dans les systèmes discrets (dynamique des cristaux) ou continus (élasticité) a suscité un intérêt théorique et expérimental depuis la fin du 19^{ème} siècle. Les premières études dans le domaine continu, présentant un intérêt en sismologie, sont dues à Lord Rayleigh (1885) [1], Love (1911) [2] et Stonely (1924) [3]. Rayleigh a le premier étudié la propagation des ondes localisées à la surface plane d'un milieu semi-infini ; Love a traité un autre type d'onde de surface qui peut exister en présence d'une couche déposée sur un substrat ; Stonely a étudié l'existence d'ondes pouvant se propager le long de l'interface plane de deux milieux. Ces études ont été étendues à l'échelle atomique depuis les années 60 et 70 [4 , 5].

Il existe aujourd'hui plusieurs méthodes qui ont été développées pour effectuer le calcul des états et propriétés vibrationnels en surface d'un solide : celle que nous utilisons dans ce travail est la méthode de fonction de Green, appliquée d'abord par Lifshitz [6] pour étudier les modes localisés de surface, et qui est devenue depuis les années 70 une technique de référence souvent utilisée dans ce domaine [7-15]. Dans le cadre discret, cette méthode considère qu'un cristal semi-infini est obtenu à partir d'un réseau illimité, par la bisection de deux plans atomiques consécutifs dans le cristal infini. La matrice dynamique est modifiée par la

perturbation \vec{V} qui annule les interactions entre les atomes situés de part et d'autre de ce plan. Cette perturbation est représentée par une matrice dont l'ordre dépend de la portée des interactions. Il en résulte une modification de la fonction réponse \vec{G} du système infini, qui devient pour le cristal semi-infini $\vec{G}_s = (\vec{I} + \vec{G}\vec{V})^{-1}\vec{G}$ [8]. Le formalisme peut, de proche en proche, être appliqué au cas d'une interface entre deux milieux [15], aux couches adsorbées [8,15], ou aux super-réseaux[16-18]. Les mêmes calculs peuvent aussi être effectués dans le cas des milieux continus dont la dynamique est décrite par la théorie de l'élasticité [15,19-22]. La connaissance de la fonction réponse du système final permet d'obtenir toutes les informations sur ce système ; citons comme exemples : les densités d'états totales et locales qui permettent à leur tour de mettre en évidence les modes localisés et résonnants, les déplacements quadratiques moyens des atomes, les propriétés thermodynamiques telles que l'entropie ou la chaleur spécifique, etc....

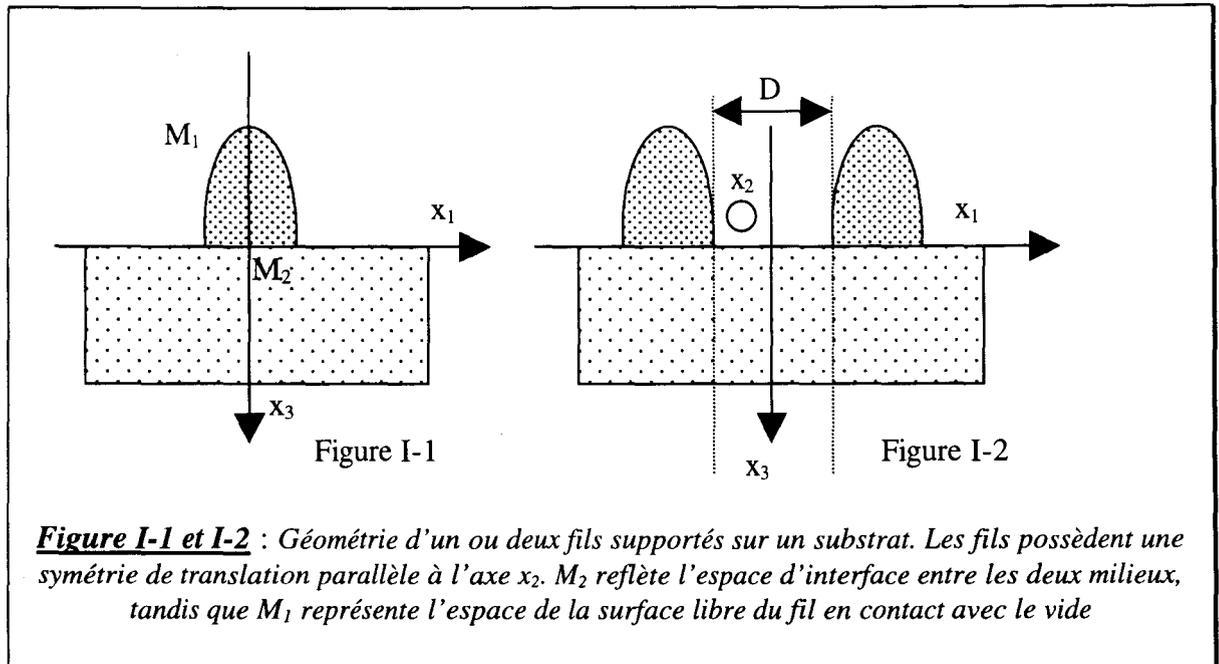
Au-delà de la technique de fonction de Green, citons deux autres méthodes souvent utilisées pour l'étude des propriétés vibrationnelles des surfaces : la méthode de raccordement introduite par Feuchtwang [23] pour étudier l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini a été reprise et développée par d'autres auteurs pour aborder les problèmes dynamiques [24]. Enfin, Allen et al ont introduit en 1971 la méthode de couche [25] (SLAB) qui consiste à diagonaliser numériquement la matrice dynamique d'une couche mince composée d'un nombre fini de plans atomiques. Afin d'assurer l'existence d'une région dite de volume au centre du système, le nombre de plans utilisés pour la modélisation doit être suffisamment grand.

Au-delà des surfaces planes et des milieux lamellaires, on peut noter que toutes les surfaces réelles, quelque soit la technique de réalisation, sont rugueuses à un certain degré. Par

ailleurs, les progrès technologiques réalisés durant les deux dernières décennies dans la croissance ou la microlithographie permettent maintenant de produire des objets superficiels de taille microscopique, tels que des fils ou des crêtes de forme et de nature bien définies sur la surface plane d'un substrat. La présence de telles impuretés ou inhomogénéités à la surface d'un matériau modifie évidemment ses propriétés vibrationnelles [26-29], ainsi que les propriétés associées à d'autres excitations (électromagnétiques[30], électroniques [31] etc...).

Dans ce contexte, l'objet de ce chapitre est d'étudier les propriétés dynamiques (résonance, densité d'états ...) de nanostructures déposées en surface. Plus particulièrement, nous abordons le cas d'un fil de nature et de forme arbitraire adsorbé sur un milieu semi-infini limité par une surface plane (voir Figure I-1), puis nous considérons le cas de deux fils adsorbés séparés par une distance D et dont les vibrations peuvent interagir (voir Figure I-2). Le cas d'un système de fils déposés périodiquement sur la surface d'un substrat sera étudié au chapitre III.

Sur le plan théorique, nous utilisons le formalisme de fonction de Green qui permet en principe d'étudier de façon générale les propriétés vibrationnelles de ces nanostructures. Néanmoins, en pratique, nous avons effectué les calculs numériques et les applications uniquement pour les modes de vibration de polarisation transverse pour lesquels le champ des déplacements élastiques a une seule composante non nulle selon l'axe du fil adsorbé. En effet, dans ce cas, la fonction de Green d'un milieu infini et celle d'un milieu semi-infini avec une surface plane (qui sont les ingrédients de base de notre calcul) sont analytiquement connues.



La technique de fonction de Green présente plusieurs avantages parmi lesquels nous pouvons citer d'une part la possibilité d'étudier des nanostructures de forme arbitraire et pouvant avoir une nature différente de celle du substrat. D'autre part, sur le plan du calcul, il est possible de travailler d'abord dans un espace beaucoup plus petit que l'espace total, à savoir "l'espace des interfaces" ; les éléments de la fonction de Green dans tout l'espace peuvent être calculés aisément ultérieurement.

La suite de ce chapitre est structurée de la façon suivante : au paragraphe II nous rappelons le formalisme de fonction de Green d'un matériau composite élastique. Nous évaluons ensuite au paragraphe III les fonctions de Green successivement pour un fil isolé de forme arbitraire, pour un substrat semi-infini avec une surface plane et enfin pour un fil adsorbé sur le substrat. Les expressions détaillées de ces fonctions seront données dans l'appendice . Le paragraphe IV comporte les expressions des densités d'états qui se déduisent de la connaissance des fonctions de Green . Enfin, le paragraphe V sera consacré à la présentation d'applications pour l'étude des résonances acoustiques d'un fil ayant une section de forme

parabolique adsorbé sur un substrat. L'effet de deux fils identiques supportés sur un substrat y est aussi examiné .

II) Eléments sur le formalisme de la fonction de Green d'un matériau composite élastique

Nous présentons un rappel de la théorie générale des fonctions de Green d'un matériau composite, après avoir défini auparavant la fonction de Green d'un milieu infini et celle d'un milieu semi-infini ou fini limité par une surface quelconque.

II-1) Fonction de Green de volume d'un milieu homogène infini

Les déplacements U_α , $\alpha = 1, 2, 3$ d'un point d'un matériau élastique tridimensionnel obéissent à l'équation de mouvement :

$$-\rho\omega^2 U_\alpha = \sum_{\beta} \frac{\partial T_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} \quad (I.1)$$

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

$$T_{\alpha\beta} = \sum_{\mu\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \eta_{\mu\nu} \quad (I.2)$$

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

$$\eta_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_\mu}{\partial x_\nu} + \frac{\partial U_\nu}{\partial x_\mu} \right) \quad (I.3)$$

L'équation du mouvement (I.1) devient alors :

$$-\rho\omega^2 U_\alpha = \sum_{\beta\mu\nu} \frac{\partial C_{\alpha\beta\mu\nu}}{\partial x_\beta} \cdot \frac{\partial U_\mu}{\partial x_\nu} + \sum_{\beta\mu\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2 U_\mu}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \quad (I.4)$$

Pour un milieu infini homogène, les $C_{\alpha\beta\mu\nu}$ ne dépendent pas du vecteur position \vec{x} . Dans ce cas, l'équation (I.4) devient :

$$\left[\rho\omega^2\delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \right] U_\mu = 0 \quad (I.5)$$

On peut aussi l'écrire de manière formelle :

$$H_{\alpha\mu}(\vec{x}) U_\mu(\vec{x}) = 0, \quad (I.6)$$

en définissant l'opérateur de volume

$$H_{\alpha\mu}(\vec{x}) = \rho\omega^2\delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \quad (I.7)$$

La fonction de Green de volume de ce milieu sera alors définie par :

$$\sum_{\mu} H_{\alpha\mu}(\vec{x}) G_{\mu\nu}(\vec{x}, \vec{x}') = \delta_{\alpha\nu} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (I.8)$$

II-2) Fonction de Green de surface d'un milieu homogène

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

$$x_3 = f(x_1, x_2) \quad (I.9)$$

Les constantes élastiques deviennent alors :

$$C_{\alpha\beta\mu\nu}(\vec{x}) = \theta[x_3 - f(x_1, x_2)] C_{\alpha\beta\mu\nu} \quad (I.10)$$

où θ est la fonction d'Heaviside, telle que :

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

L'équation (I.4) devient ainsi :

$$\left\{ \theta [x_3 - f(x_1, x_2)] \left[\rho \omega^2 \delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \right] + \sum_{\beta\nu} \frac{\partial C_{\alpha\beta\mu\nu}(\bar{x})}{\partial x_\beta} \frac{\partial}{\partial x_\nu} \right\} U_\nu = 0 \quad (I.11)$$

On peut écrire formellement cette équation de la façon suivante :

$$h_{\alpha\mu}(\bar{x}) U_\mu(\bar{x}) = 0 \quad (I.12)$$

où
$$h_{\alpha\mu}(\bar{x}) = H_{\alpha\mu}(\bar{x}) + V_{\alpha\mu}(\bar{x}) \quad (I.13)$$

On distingue alors l'opérateur de volume (Eq. I.7) :

$$H_{\alpha\mu}(\bar{x}) = \theta [x_3 - f(x_1, x_2)] \left(\rho \omega^2 \delta_{\alpha\mu} + \sum_{\beta\nu} C_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2}{\partial x_\beta \partial x_\nu} \right) \quad (I.14)$$

et l'opérateur de clivage :

$$V_{\alpha\mu}(\bar{x}) = \sum_{\beta\nu} \frac{\partial C_{\alpha\beta\mu\nu}(\bar{x})}{\partial x_\beta} \cdot \frac{\partial}{\partial x_\nu} \quad (I.15)$$

Après dérivation, la partie droite de l'équation (I.15) devient :

$$V_{\alpha\mu}(\bar{x}) = \delta(x_3 - f(x_1, x_2)) \sum_\nu \left[-C_{\alpha 1 \mu \nu} \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_1} - C_{\alpha 2 \mu \nu} \frac{\partial f(x_1, x_2)}{\partial x_2} + C_{\alpha 3 \mu \nu} \right] \frac{\partial}{\partial x_\nu} \quad (I.17)$$

On introduit alors un opérateur réponse de surface \tilde{A} par :

$$A_{\alpha\gamma}(\bar{x}, \bar{x}') = \sum_\mu V_{\alpha\mu}(\bar{x}) G_{\mu\gamma}(\bar{x}, \bar{x}') \quad (I.18)$$

En effet, la connaissance de la fonction de Green \vec{G} d'un milieu infini et de l'opérateur réponse de surface \vec{A} permet d'obtenir la fonction de Green \vec{g}_s d'un milieu semi-infini limité par une surface, à partir de l'équation générale suivante :

$$\vec{g}_s(\vec{I} + \vec{A}) = \vec{G} \quad (I.19)$$

où \vec{I} est la matrice identité.

Il est utile de choisir la notation suivante : D est l'espace de définition du matériau élastique et M est l'espace de la surface libre. Alors, l'équation (I.19) devient [32] :

$$\vec{g}_s(DD) = \vec{G}(DD) - \vec{G}(DM)\vec{\Delta}^{-1}(MM)\vec{A}(MD) \quad (I.20)$$

où la matrice $\vec{\Delta}(MM)$ est définie par :

$$\vec{\Delta}(MM) = \vec{I}(MM) + \vec{A}(MM) \quad (I.21)$$

Une forme particulière de l'équation (I.20), dans l'espace de la surface libre M est :

$\vec{g}_s^{-1}(MM) = \vec{\Delta}(MM)\vec{G}^{-1}(MM) \quad (I.22)$
--

où $\vec{g}_s^{-1}(MM)$ et $\vec{G}^{-1}(MM)$ sont respectivement les inverses des matrices $\vec{g}_s(MM)$ et $\vec{G}(MM)$.

II-3) Fonction de Green d'un matériau composite

Considérons maintenant un système composite défini dans l'espace D et formé de N sous-systèmes définis respectivement dans leurs espaces d'existence D_i $\left(D = \bigcup_i D_i \right) (1 \leq i \leq N)$

voir (figure I-3 a). Ces sous-espaces sont assemblés par leurs domaines d'interfaces $M_i \in D_i$. Chaque sous-système i est en général en interaction avec J autres sous-systèmes. Ainsi, l'espace de l'interface M_i est généralement composé de J sous interfaces M_{ij} ($1 \leq j \leq J$) ; l'ensemble de tous les espaces M_i est appelé espace d'interface M du matériau composite $\left(M = \bigcup_i M_i \right)$.

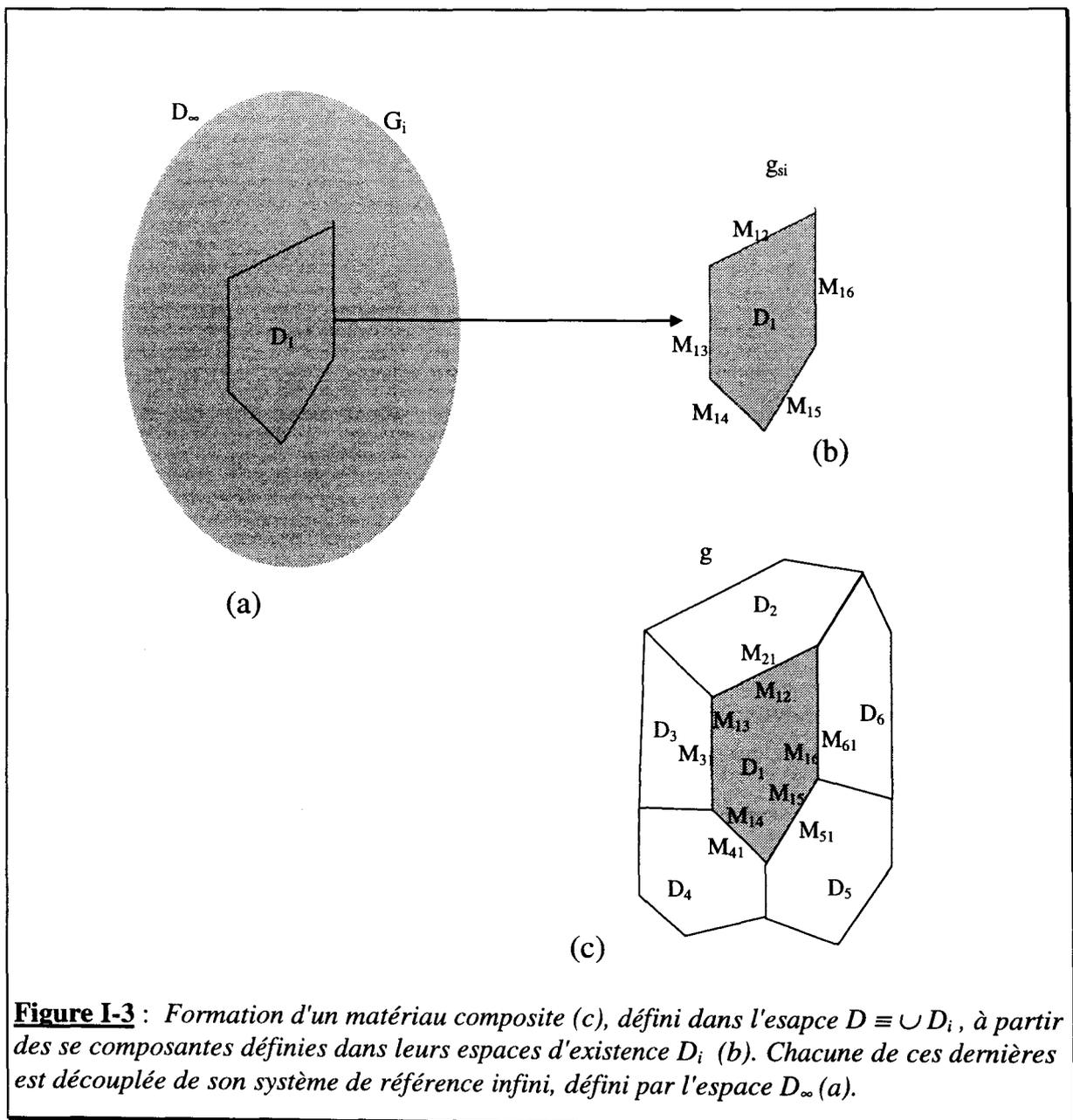


Figure I-3 : Formation d'un matériau composite (c), défini dans l'espace $D \equiv \cup D_i$, à partir des se composantes définies dans leurs espaces d'existence D_i (b). Chacune de ces dernières est découplée de son système de référence infini, défini par l'espace D_∞ (a).

Chaque partie du système, prise indépendamment (avant couplage), aura une fonction de Green \tilde{g}_{si} définie par l'équation (I.22), soit :

$$\tilde{g}_{si}^{-1}(M_i M_i) = \tilde{\Delta}_i(M_i M_i) \tilde{G}_i^{-1}(M_i M_i) \quad (I.23)$$

Avant d'aboutir à la fonction de Green complète du système composite $\tilde{g}(DD)$ on peut d'abord obtenir cette fonction dans l'espace des interfaces M c'est-à-dire $\tilde{g}(MM)$. Ceci se fait par la construction de la matrice $\tilde{g}^{-1}(MM)$ qui s'obtient par une juxtaposition des matrices $\tilde{g}_{si}^{-1}(M_{ij} M_{ij})$ de chaque sous-système de la manière suivante[32] :

$$\tilde{g}^{-1}(M_{ij}, M_{i'j'}) = \vec{0} \quad , \quad M_{i'j'} \notin M_i \quad (I.24a)$$

$$\tilde{g}^{-1}(M_{ij}, M_{ij}) = \tilde{g}_{si}^{-1}(M_{ij}, M_{i'j'}) \quad ; \quad j' \neq j \quad (I.24b)$$

$$\tilde{g}^{-1}(M_{ij}, M_{ij}) = \sum_{ij} \tilde{g}_{si}^{-1}(M_{ij}, M_{i'j'}) \cdot M_{i'j'} \equiv M_{ij} \quad (I.24c)$$

Introduisons alors une matrice $\tilde{T}(MM)$ appelée matrice de diffusion telle que [32] :

$$\tilde{g}(DD) = \tilde{G}(DD) + \tilde{G}(DM) \tilde{T}(MM) \tilde{G}(MD) \quad (I.25)$$

Dans l'espace des interfaces M , cette équation se met sous la forme :

$$\tilde{g}(MM) = \tilde{G}(MM) + \tilde{G}(MM) \tilde{T}(MM) \tilde{G}(MM) \quad (I.26)$$

On peut alors tirer $\tilde{T}(MM)$ de (I.26) et la remplacer dans (I.25). On obtient :

$$\begin{aligned} \tilde{g}(DD) = & \tilde{G}(DD) - \tilde{G}(DM) \tilde{G}^{-1}(MM) \tilde{G}(MD) + \\ & \tilde{G}(DM) \tilde{G}^{-1}(MM) \tilde{g}(MM) \tilde{G}^{-1}(MM) \tilde{G}(MD) \end{aligned} \quad (I.27)$$

L'équation (I.27) fournit les éléments de la fonction de Green du système composite dans l'espace complet, une fois que ses éléments dans l'espace des interfaces $\tilde{g}(\text{MM})$ sont calculés à partir de l'équation (I.24).

III) Fonction de Green d'un fil adsorbé sur un substrat : cas des modes transverses

III-1) Milieu infini homogène et isotrope

Un milieu isotrope est défini [33] par une densité de masse ρ et par deux constantes élastiques indépendantes : C_{11} , C_{12} , avec $C_{44} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}$.

Pour le système final auquel on s'intéressera, c'est-à-dire le fil adsorbé sur le substrat, il existe uniquement une symétrie de translation parallèle à l'axe \bar{x}_2 du fil (voir Fig. I-1). Cela nous permettra de choisir un vecteur d'onde \bar{k}_2 parallèle à l'axe \bar{x}_2 . Dans ce cas, le champ des déplacements U_α , $\alpha = 1, 2, 3$ d'un point du milieu élastique tridimensionnel peut s'écrire :

$$U_\alpha(\bar{x}, t) = U_\alpha(x_1, x_3 | \omega) \exp i(k_2 x_2 - \omega t) \quad (I.28)$$

L'équation du mouvement devient alors :

$$\begin{pmatrix} \rho\omega^2 + C_{11} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + C_{44} \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} - C_{44} k_2^2 & ik_2(C_{44} + C_{12}) \frac{\partial}{\partial x_1} & (C_{44} + C_{12}) \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_3} \\ ik_2(C_{44} + C_{12}) \frac{\partial}{\partial x_1} & \rho\omega^2 - k_2^2 C_{11} + C_{44} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) & ik_2(C_{44} + C_{12}) \frac{\partial}{\partial x_3} \\ (C_{44} + C_{12}) \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_3} & ik_2(C_{44} + C_{12}) \frac{\partial}{\partial x_3} & \rho\omega^2 + C_{11} \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + C_{44} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - k_2^2 C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{pmatrix} = 0 \quad (I.29)$$

Il existe une possibilité de découpler les vibrations transverses polarisées suivant \bar{x}_2 (parallèle au fil) et celles de polarisation sagittale ayant un champ de déplacement dans le plan (\bar{x}_1, \bar{x}_3) . Pour cela, il faut annuler le vecteur d'onde \bar{k}_2 ($\bar{k}_2 = \vec{0}$). Alors, dans ce cas, le champ des déplacements, pour les modes transverses seuls, aura la forme suivante :

$$U(\mathbf{x}, t) = (0, U_2(x_1, x_3 | \omega), 0) \exp(i\omega t) \quad (I.30)$$

et la seule composante du champ des déplacements U_2 doit satisfaire à l'équation du mouvement :

$$C_{44} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \frac{\omega^2}{C_t^2} \right) U_2(x_1, x_3 | \omega) = 0 \quad (I.31)$$

où $C_t = \sqrt{C_{44}/\rho}$ est la vitesse transverse du son dans le matériau.

Ainsi, en partant de l'équation (I.8), on peut écrire la fonction de Green de volume G d'un milieu homogène infini et isotrope, comme solution de l'équation suivante :

$$C_{44} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \frac{\omega^2}{C_t^2} \right) G(x_1, x_3 | x'_1, x'_3) = \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_3 - x'_3) \quad (I.32)$$

où nous avons omis pour simplifier d'écrire explicitement la dépendance en ω de \vec{G} .

La solution pour G est connue analytiquement [34] à l'aide d'une fonction de Hankel comme suit :

$$G(x_1, x_3 | x'_1, x'_3) = -\frac{i}{4C_{44}} H_0^{(1)} \left[\frac{\omega}{C_t} (x_1 - x'_1)^2 + (x_3 - x'_3)^2 \right]^{1/2} \quad (I.33)$$

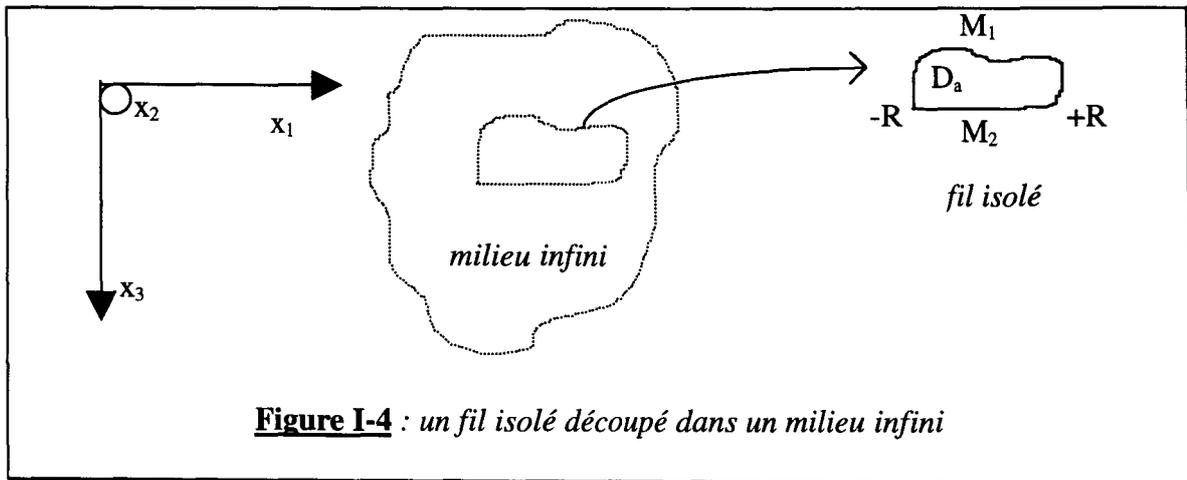
$$\text{où} \quad H_0^{(1)}(z) = J_0(z) + iY_0(z) \quad (I.34)$$

est la fonction de Hankel de première espèce.

III-2) Fil isolé

A) Fonction de Green du fil isolé \vec{g}_a

Découpons à l'intérieur d'un milieu élastique infini et isotrope, un fil D_a de forme arbitraire que nous supposons limité par une surface parfaitement libre de contrainte. L'espace M de cette surface libre peut être divisé en deux parties M_1 et M_2 $\{M = M_1 \cup M_2\}$ définies de la façon suivante : M_2 est la partie plane du fil qui, lors de son adsorption, viendra en contact avec le substrat. Cette partie est définie par : $M_2 = \{-R < x_1 < R ; x_3 = 0\}$. M_1 est la partie courbée du fil qui restera en contact avec le vide après l'adsorption du fil sur le substrat, elle est donc définie par : $M_1 = \{-R < x_1 < R ; x_3 = \xi(x_1)\}$ (voir figure I.4).



La fonction de Green du fil isolé $\vec{g}_a(x_1, x_3 | x'_1, x'_3)$, pour les modes transverses, obéit à la même équation (I.32) que celle pour le milieu infini, avec la condition aux limites appropriée. Cette condition, pour une surface ($x_3 = \xi(x_1)$) libre de contrainte, s'exprime comme suit :

$$\left. \frac{\partial}{\partial n_-} U_2(x_1, x_3 | \omega) \right|_{x_3 = \xi(x_1)} = 0 \quad (I.35)$$

où $\frac{\partial}{\partial n_-}$ est la dérivation en tout point le long de la normale à la surface, dirigée du solide vers

le vide. L'expression de cette dérivée est :

$$\frac{\partial}{\partial n_-} = \left[1 + (\xi'(x_1))^2 \right]^{1/2} \left(\xi'(x_1) \frac{\partial}{\partial x_1} - \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \quad (I.36)$$

En utilisant le théorème de Green [27,28,34] et la condition aux limites donnée précédemment, on peut obtenir une équation intégrale pour la fonction de Green \tilde{g}_a du fil isolé.

Dans ce but, nous multiplions l'équation (I.32) de \tilde{G} par \tilde{g}_a et l'équation équivalente à (I.32) de \tilde{g}_a par \tilde{G} . Puis, nous soustrayons ces équations et les intégrons sur les variables de position qui parcourent les bords M du fil isolé D_a . On obtient alors :

$$\begin{aligned} & g_a(x_1, x_3 | x'_1, x'_3) + \int_{-R}^{+R} dx''_1 A_a^{(M1)}(x_1, x_3 | x''_1, \xi(x''_1)) g_a(x''_1, \xi(x''_1) | x'_1, x'_3) + \\ & \int_{-R}^{+R} dx''_1 A_a^{(M2)}(x_1, x_3 | x''_1, 0) g_a(x''_1, 0 | x'_1, x'_3) = G(x_1, x_3 | x'_1, x'_3) \quad (I.37) \end{aligned}$$

$\vec{x} = (x_1, x_3)$, $\vec{x}' = (x'_1, x'_3)$ représentent deux vecteurs bidimensionnels qui appartiennent au volume du fil D_a . Par contre, les vecteurs $\vec{x}'' = (x''_1, \xi(x''_1))$ ou $(x''_1, 0)$ qui sont les variables d'intégration appartiennent à la surface libre de contrainte M du fil.

Les opérateurs réponses de surface $\tilde{A}_a^{(M1)}$ et $\tilde{A}_a^{(M2)}$, associés respectivement à la surface courbée M_1 et à la surface plane M_2 , ont la forme suivante :

$$A_a^{(M1)}(x_1, x_3 | x''_1, x''_3) = C^{(a)}_{44} \left(-\xi'(x''_1) \frac{\partial}{\partial x''_1} + \frac{\partial}{\partial x''_3} \right) G(x_1, x_3 | x''_1, x''_3) \Bigg|_{x''_3 = \xi(x''_1)} \quad (I.38)$$

pour $\bar{x}'' \in M_1$, et

$$A_a^{(M2)}(x_1, x_3 | x''_1, x''_3) = C^{(a)}_{44} \left(-\frac{\partial}{\partial x''_3} \right) G(x_1, x_3 | x''_1, x''_3) \Bigg|_{x''_3 = 0} \quad (I.39)$$

pour $\bar{x}'' \in M_2$.

Plutôt que d'utiliser l'équation (I.37) de $\tilde{g}_a(D_a D_a)$, nous pouvons en premier lieu nous limiter à l'équation intégrale de $\tilde{g}_a(MM)$ dans l'espace des interfaces. Nous prenons alors $x_3 = \xi(x_1) + \epsilon$ pour la surface M_1 et $x_3 = -\epsilon$ pour la surface M_2 avec ϵ un nombre infinitésimal positif.

Dans le but de résoudre numériquement cette équation intégrale de $\tilde{g}_a(MM)$, nous devons la transformer en une équation matricielle. Pour ce faire, nous introduisons une discrétisation le long de x_1 , c'est-à-dire nous prenons $2N$ points équidistants de Δx sur le segment $[-R, R]$. Cela conduit à définir les milieux X_n de ces intervalles élémentaires de la façon suivante :

$$\left. \begin{array}{l} X_n = (n + 1/2) \Delta x \\ \text{où } n = -N, -N + 1, \dots, N - 1 \\ \text{et } \Delta x = \frac{R}{N} \end{array} \right\} \quad (I.40)$$

Finalement, la surface plane M_2 et la surface courbée M_1 sont divisées en petites portions, que nous symbolisons par : (X_n, i) où $i = 1$ pour M_1 et $i = 2$ pour M_2 et n prenant les valeurs de $-N, -N + 1, \dots, N - 1$.

En effectuant une intégration des deux membres de l'équation (I.37) sur la variable x'_1 à l'intérieur de l'intervalle élémentaire autour du point (X_m, i) , on aboutit à l'équation discrète suivante :

$$g_a(ni | mj) + \sum_{k=1}^2 \sum_{l=-N}^{N-1} A_a(ni | lk) g_a(lk | mj) = G(ni | mj). \quad (I.41)$$

Les éléments discrets des opérateurs \vec{G} , \vec{g}_a et \vec{A}_a de l'équation précédente, sont exprimés par leurs valeurs moyennes sur les intervalles Δx , comme suit :

i) pour $\vec{x}' \in M_1$

$$G(ni | m1) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_m - \frac{\Delta x}{2}}^{x_m + \frac{\Delta x}{2}} dx'_1 [1 + (\xi'(x'_1))^2]^{1/2} G(X_n, i | x'_1, 1), \quad (I.42)$$

ii) pour $\vec{x}' \in M_2$

$$G(ni | m2) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_m - \frac{\Delta x}{2}}^{x_m + \frac{\Delta x}{2}} dx'_1 G(X_n, i | x'_1, 2). \quad (I.43)$$

Dans ces calculs, il faut soigneusement tenir compte des singularités de la fonction de Green \vec{G} et de ses dérivées (éléments de \vec{A}_a) lorsque le vecteur \vec{x} tend vers \vec{x}' . Pour cette raison, il a fallu différencier les calculs des éléments diagonaux et non-diagonaux de ces fonctions. Les éléments des matrices $\vec{G}(MM)$ et $\vec{A}_a(MM)$ sont évalués analytiquement au premier ordre en Δx ; leurs expressions sont données dans l'Appendice A.

Après cette discrétisation, les matrices $\vec{G}(MM)$ et $\vec{g}_a(MM)$ auront respectivement comme éléments $G(ni|mj)$ et $g_a(ni|mj)$. L'équation (I.41) peut s'écrire formellement comme une équation matricielle de la manière suivante :

$$\vec{\Delta}_a(MM)\vec{g}_a(MM) = \vec{G}(MM) \quad (I.44)$$

où les éléments de $\vec{\Delta}_a(MM)$ sont définis par :

$$\Delta_a(ni|mj) = \delta_{nm}\delta_{ij} + A_a(ni|mj) \quad (I.45)$$

Une fois qu'on connaît les éléments de la matrice \vec{g}_a dans l'espace M, l'équation (I.20) ou (I.27) permettent de calculer les éléments de \vec{g}_a dans tous l'espace D_a .

B) Modes de résonance du fil isolé

Considérons le fil isolé précédent. Les éléments de sa fonction de Green $\vec{g}_a(MM)$ dans l'espace des interfaces sont obtenus au moyen de l'équation (I.44).

Les modes propres (fréquences propres) du fil isolé, avec sa surface M libre de contrainte, sont donnés par :

$$\det[\vec{g}_a(MM)]^{-1} = 0 \quad (I.46)$$

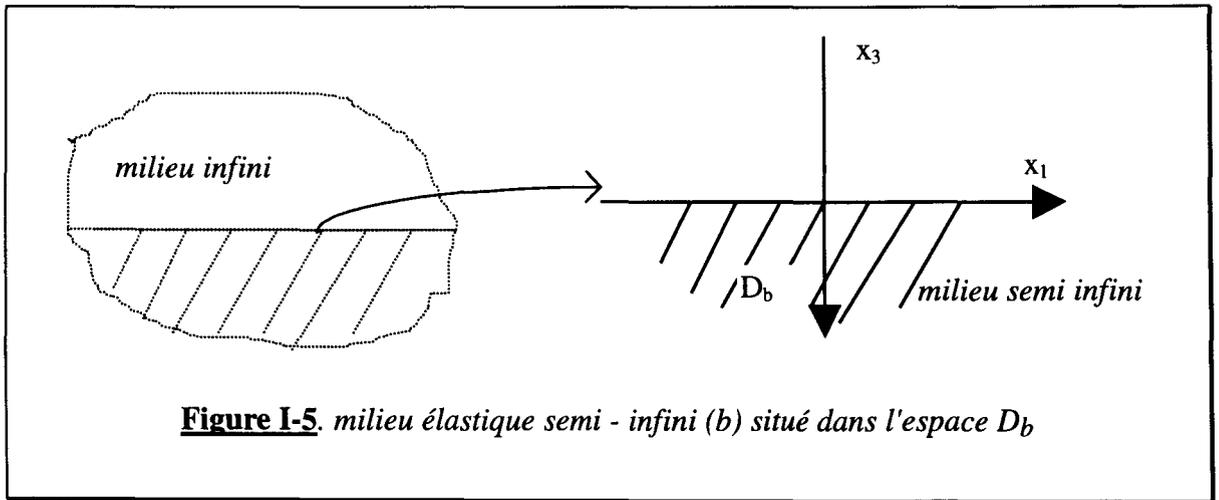
Sachant que le fil constitue un objet fini dans le plan (x_1, x_3) , ses modes propres sont discrets bien qu'en nombre infini .

Notons enfin que la troncature de la matrice $\vec{g}_a(M_i M_j)$ ($i = 1$ ou 2), pour les points situés respectivement le long de M_1 ou de M_2 va être utilisée lors de l'évaluation des densités d'états du système final fil-substrat (voir paragraphe III-4).

III-3) Milieu isotrope semi-infini

Considérons un milieu isotrope (b), semi-infini, limité par la surface plane $x_3 = 0$ (figure (I.5)).

La fonction de Green \vec{g}_b de ce milieu peut être calculée à partir de l'équation (I.19) qui fait intervenir la fonction de Green \vec{G}_b du milieu (b) infini et l'opérateur réponse \vec{A}_b (équation



(I.18)). Ce dernier fait appel à l'opérateur de clivage \vec{V}_b (équation (I.15)) qui pour les vibrations de polarisation transverse, s'écrit :

$$V_b(x_3) = C_{44}^{(b)} \frac{\partial}{\partial x_3} \quad (I.47)$$

où $C_{44}^{(b)}$ est la constante élastique du milieu isotrope (b).

On obtient alors l'opérateur de réponse \vec{A}_b :

$$\tilde{A}_b(x_1, x_3 | x_1'', x_3'') = -C_{44}^{(b)} \frac{\partial}{\partial x_3} G_b(x_1, x_3 | x_1'', x_3'') \Big|_{x_3''=0} \quad (I.48)$$

La substitution de \tilde{G}_b par son expression (Eq. I.33) et l'utilisation de l'équation (I.19), nous permettent finalement d'écrire l'expression de la fonction de Green \tilde{g}_b du milieu isotrope semi-infini comme [34]:

$$\begin{aligned} g_b(x_1, x_3 | x_1', x_3') = & -\frac{i}{4C_{44}^{(b)}} H_0^{(1)} \left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} ((x_1 - x_1')^2 + (x_3 - x_3')^2)^{1/2} \right) \\ & - \frac{i}{4C_{44}^{(b)}} H_0^{(1)} \left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} ((x_1 - x_1')^2 + (x_3 + x_3')^2)^{1/2} \right) \end{aligned} \quad (I.49)$$

Pour le besoin du calcul numérique, il est nécessaire d'effectuer, comme dans le paragraphe précédent, une discrétisation des variables et des équations mises en jeu. Les éléments de la fonction de Green \tilde{g}_b sont évalués par des moyennes sur les intervalles Δx de la même manière que ceux de \tilde{g}_a . Les expressions de ces éléments de \tilde{g}_b sont données dans l'Appendice A.

III-4) Fil adsorbé

Pour déterminer la fonction de Green du fil adsorbé sur un substrat, on applique le théorème de Green pour \tilde{g}_a et \tilde{g}_d de la même manière que nous l'avons appliqué précédemment à \tilde{G}_a et \tilde{g}_a . Nous multiplions l'équation équivalente à (I.32) de \tilde{g}_d par \tilde{g}_a et celle de \tilde{g}_a par \tilde{g}_d . Ensuite, nous soustrayons ces équations et intégrons sur le volume du fil

adsorbé ; en utilisant le théorème de Green et les conditions aux limites adéquates, on obtient alors les expressions suivantes :

$$g_d(x_1, x_3 \mid x'_1, x'_3) - g_a(x_1, x_3 \mid x'_1, x'_3) = - \int_{-R}^{+R} dx''_1 g_a(x_1, x_3 \mid x''_1, x''_3=0) \left(C_{44}^{(a)} \frac{\partial}{\partial x''_3} g_d(x''_1, x''_3 \mid x'_1, x'_3) \Big|_{x''_3=0} \right) . \quad (I.50)$$

pour (x_1, x_3) et (x'_1, x'_3) appartenant tous les deux au fil, et :

$$g_d(x_1, x_3 \mid x'_1, x'_3) = \int_{-R}^{+R} dx''_1 g_b(x_1, x_3 \mid x''_1, x''_3=0) \left(C_{44}^{(b)} \frac{\partial}{\partial x''_3} g_d(x''_1, x''_3 \mid x'_1, x'_3) \Big|_{x''_3=0} \right) . \quad (I.51)$$

pour (x_1, x_3) appartenant au substrat et (x'_1, x'_3) appartenant au fil.

En discrétisant les équations ((I.50) et (I.51)) de la même manière qu'auparavant et en éliminant la dérivée de \vec{g}_d entre ces deux équations, on obtient formellement l'équation matricielle [28] :

$$[\vec{g}_d(M_2M_2)]^{-1} = [\vec{g}_a(M_2M_2)]^{-1} + [\vec{g}_b(M_2M_2)]^{-1} \quad (I.52)$$

Notons finalement que ce résultat est le même que celui mentionné dans l'équation (I.24) dans le cadre de la théorie générale des fonctions de Green pour un matériau composite élastique.

IV) Densités d'états et résonances

A partir de la connaissance de la fonction réponse du fil déposé sur le substrat, il est très aisé de calculer la densité d'états locale en un point (x_1, x_3) du matériau. En effet, celle-ci est donnée par :

$$n(x_1, x_3, \omega) = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2\rho(x_1, x_3) \omega}{\pi} \operatorname{Im} g_d(x_1, x_3 ; x_1, x_3 | \omega + i\varepsilon) \quad (I.53)$$

où $\operatorname{Im} g_d(x_1, x_3 ; x_1, x_3 | \omega + i\varepsilon)$ signifie la partie imaginaire de l'élément diagonal de la fonction de Green \tilde{g}_d au point (x_1, x_3) pour une fréquence $(\omega + i\varepsilon)$ et une densité de masse $\rho(x_1, x_3)$ en ce point.

La densité d'états totale $n_d(\omega)$ pour un fil adsorbé sur le substrat semi-infini s'obtient à partir de la trace de la partie imaginaire de \tilde{g}_d , soit :

$$n_d(\omega) = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2\omega}{\pi} \operatorname{Tr} \left[\rho(x_1, x_3) \operatorname{Im} g_d(x_1, x_3 ; x_1, x_3 | \omega + i\varepsilon) \right] \quad (I.54)$$

Nous allons montrer dans la suite qu'il n'est pas nécessaire d'effectuer cette opération de trace (c'est-à-dire une intégration sur l'espace complet D du fil et du substrat), mais qu'il est possible d'obtenir la densité d'états totale à l'aide d'une expression compacte faisant intervenir la fonction de Green $\tilde{g}_d(M_2 M_2)$ dans l'espace de l'interface fil-substrat. Soustrayons d'abord de cette densité $n_d(\omega)$ la densité $n_r(\omega)$ du système de référence constitué par le fil isolé et le substrat pris indépendamment ($n_r(\omega) = n_a(\omega) + n_b(\omega)$); on obtient alors :

$$\Delta n(\omega) = n_d(\omega) - n_r(\omega) = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{2\omega}{\pi} \operatorname{Tr} \left[\rho(x_1, x_3) \left\{ \operatorname{Im} g_d(x_1, x_3 ; x_1, x_3 | \omega + i\varepsilon) - \operatorname{Im} g_r(x_1, x_3 ; x_1, x_3 | \omega + i\varepsilon) \right\} \right]. \quad (I.55)$$

où \tilde{g}_r est la fonction de Green du système de référence qui a la forme matricielle suivante :

$$\tilde{g}_r(DD) = \begin{pmatrix} \tilde{g}_a(D_a D_a) & 0 \\ 0 & \tilde{g}_b(D_b D_b) \end{pmatrix} \quad (I.56)$$

où $D = D_a \cup D_b$ est l'ensemble de l'espace du fil adsorbé plus le substrat. L'utilisation de l'équation (I.27) avec \tilde{g}_r nous permet d'écrire \tilde{g}_d sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \tilde{g}_d(DD) = & \tilde{g}_r(D, D) - \tilde{g}_r(DM_2) \tilde{g}_r^{-1}(M_2 M_2) \tilde{g}_r(M_2 D) + \\ & \tilde{g}_r(D, M_2) \tilde{g}_r^{-1}(M_2 M_2) \tilde{g}_d(M_2 M_2) \tilde{g}_r^{-1}(M_2 M_2) \tilde{g}_r(M_2 D) \end{aligned} \quad (I.57)$$

L'équation (I.55) peut s'écrire après simplification comme suit :

$$\begin{aligned} n_d(\omega) - n_r(\omega) = & \frac{2\omega}{\pi} \text{Im Tr} \left[- \tilde{g}_r(DM_2) \tilde{g}_r^{-1}(M_2 M_2) \tilde{g}_r(M_2 D) \right. \\ & \left. + \tilde{g}_d(DM_2) \tilde{g}_d^{-1}(M_2 M_2) \tilde{g}_d(M_2 D) \right] \end{aligned} \quad (I.58)$$

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

$$\begin{aligned} n_d(\omega) - n_r(\omega) = & \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \left\{ - \text{Tr} \left[\tilde{g}_r(M_2 D) \tilde{g}_r(DM_2) \tilde{g}_r^{-1}(M_2 M_2) \right] \right. \\ & \left. + \text{Tr} \left[\tilde{g}_d(M_2 D) \tilde{g}_d(DM_2) \tilde{g}_d^{-1}(M_2 M_2) \right] \right\} \end{aligned} \quad (I.59)$$

On peut alors utiliser les deux propriétés suivantes :

$$\tilde{g}(MD) \tilde{g}(DM) = - \frac{d\tilde{g}(MM)}{d(\rho\omega^2)} \quad (I.60)$$

et

$$\text{Tr} \left(\left[\tilde{g}(MM) \right]^{-1} \frac{d\tilde{g}(MM)}{d(\rho\omega^2)} \right) = \frac{d(\ln \det(\tilde{g}(MM)))}{d(\rho\omega^2)} \quad (I.61)$$

afin d'écrire l'équation (I.59) de la manière suivante :

$$\Delta n_d(\omega) = n_d(\omega) - n_r(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{d}{d\omega} \left[\ell n \det \left(\frac{\tilde{g}_d(MM)}{\tilde{g}_r(MM)} \right) \right] \quad (I.62)$$

Maintenant, nous pouvons exprimer la variation de la densité d'états totale $\Delta n_d(\omega)$ qui représente la différence entre la densité du fil adsorbé et celui du système de référence. Pour ce faire, nous écrivons l'équation (I.62) d'une façon équivalente, soit :

$$\Delta n_d(\omega) = n_d(\omega) - n_b(\omega) - n_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \operatorname{Arg} \det \left(\frac{\tilde{g}_d(M_2M_2)}{\tilde{g}_a(M_2M_2)\tilde{g}_b(M_2M_2)} \right) \quad (I.63)$$

Le remplacement, dans cette équation, de la fonction de Green $\tilde{g}_d(M_2M_2)$ par son expression (équation (I.52)) en fonction de $\tilde{g}_a(M_2M_2)$ et $\tilde{g}_b(M_2M_2)$, conduit à :

$$\Delta n_d(\omega) = n_d(\omega) - n_b(\omega) - n_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \operatorname{Arg} \det \left[\tilde{g}_a(M_2M_2) + \tilde{g}_b(M_2M_2) \right] \quad (I.64a)$$

ou encore

$$\Delta n_d(\omega) = n_d(\omega) - n_b(\omega) - n_a(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \left\{ \operatorname{Arg} \det \left[\tilde{g}_a(M_2M_2)^{-1} + \tilde{g}_b(M_2M_2)^{-1} \right] - \operatorname{Arg} \det \left(\tilde{g}_a(M_2M_2)^{-1} \right) - \operatorname{Arg} \det \left(\tilde{g}_b(M_2M_2)^{-1} \right) \right\} \quad (I.64b)$$

Soulignons que toutes ces expressions équivalentes (I.63), (I.64a) et (I.64b) donnant la variation de la densité d'états totale font intervenir uniquement les éléments d'interface M_2 des différentes fonctions de Green. Ceci permet de faire le calcul numérique sur le domaine restreint M_2 .

En pratique, il s'avère plus intéressant de considérer la variation de la densité d'états entre le système final (substrat + fil supporté) et le substrat seul $\Delta n(\omega) = n_d(\omega) - n_b(\omega)$, au lieu de la variation $\Delta n_d(\omega)$ car ceci permet d'éliminer les modes discrets du fil isolé. Or, $\Delta n(\omega)$ peut

être donné par le membre de droite de l'équation (I.64b), dans lequel les modes discrets associés aux valeurs propres du fil isolé (solution de l'équation $\det[\tilde{\mathbf{g}}_a(\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2)]^{-1} = 0$) seront éliminés. Elle s'exprime alors par :

$$\Delta n(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \left\{ \text{Arg det}[\tilde{\mathbf{g}}_a(\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2)^{-1} + \tilde{\mathbf{g}}_b(\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2)^{-1}] - \text{Arg det}(\tilde{\mathbf{g}}_b(\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2)^{-1}) \right\} \quad (I.64c)$$

Comme nous l'avons vu auparavant, le fil isolé est fini dans le plan (x_1, x_3) ce qui conduit à ce que la quantité $\text{Arg det}[\tilde{\mathbf{g}}_a(\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2)]^{-1}$ soit toujours égale à zéro module π . La différence entre cette quantité et le membre de droite de l'équation (I.64b) a pour effet d'éliminer dans l'équation (I.64c) les pics deltas associés aux solutions de $\det[\tilde{\mathbf{g}}_a(\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2)]^{-1} = 0$. Cependant, cette élimination introduit de nouvelles fonctions deltas correspondant aux solutions de $\det[\tilde{\mathbf{g}}_a(\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2)] = 0$ [28].

En pratique, pour effectuer le calcul numérique, nous utilisons simultanément les équations (I.64b) et (I.64c) afin d'évaluer $\Delta n(\omega)$. Rappelons que l'équation (I.64c) comporte les pics deltas provenant des solutions de $\det[\tilde{\mathbf{g}}_a(\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2)] = 0$. Ces pics créent, lors de la résolution, des instabilités numériques (divergences des résultats) qui peuvent être éliminées en comparant les résultats de l'équation (I.64c) à ceux de l'équation (I.64b) qui eux même comportent d'autres instabilités numériques provenant des solutions de $\det[\tilde{\mathbf{g}}_a(\mathbf{M}_2\mathbf{M}_2)]^{-1} = 0$. En effet, du fait que les instabilités respectives des équations (I.64c) et (I.64b) se produisent à des fréquences différentes, cette comparaison permet de s'en affranchir et par conséquent de calculer d'une manière fiable $\Delta n(\omega)$. La discussion des applications numériques de ces résultats

sera présentée au paragraphe V. Auparavant, nous discutons brièvement quelques cas limites des équations (I.64).

Considérons d'abord le cas limite où la constante élastique du substrat $C_{44}^{(b)}$ tend vers zéro. Ceci correspond au cas d'un substrat constitué d'un matériau très mou par rapport à celui du fil. Il en résulte que les éléments de la matrice $(\tilde{g}_b^{-1}(M_2M_2))$, et en conséquence le membre de droite de l'équation (I.64b) tendent aussi vers zéro. Le sens physique de cette limite est que les modes propres du fil isolé avec une surface libre de contrainte ne sont pas perturbés par le substrat. Nous trouvons donc pour le fil adsorbé une situation très proche de celle du fil isolé entouré du vide.

Dans le second cas limite, nous supposons que la constante élastique $C_{44}^{(b)}$ tend vers l'infini (∞). Il s'agit ici d'un substrat très dur par rapport au fil. Par conséquent, les éléments de la matrice $(\tilde{g}_b(M_2M_2))$ qui interviennent dans le membre de droite de l'équation (I.64a) tendent vers zéro. Il en résulte que le membre de droite de l'équation (I.64a) se réduit donc à

$$\Delta n_d(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{d}{d\omega} \left\{ \text{Arg det} \left[\tilde{g}_a(M_2M_2) \right] \right\} \quad ((I.65))$$

Physiquement, dans ce cas limite, la surface plane M_2 du fil qui est en contact avec le substrat devient rigidement bloquée (gelée), tandis que sa surface courbée M_1 reste libre de contrainte. Dans ce qui suit, on se référera à ces conditions par "conditions aux limites mixtes". Cependant, l'expression donnée par l'équation (I.65) correspond à la différence de densité d'états entre deux fils isolés, l'un avec des conditions aux limites mixtes et l'autre avec des surfaces libres de contrainte. Rappelons que pour ce dernier fil $\Delta n_d(\omega)$ tend vers zéro. Il en

résulte aussi que les valeurs propres du fil avec des conditions aux limites mixtes sont solutions de :

$$\det \left[\tilde{g}_a(M_2 M_2) \right] = 0 \quad (I.66)$$

V) Application et discussion des résultats

Ce paragraphe contient quelques illustrations des densités d'états totales et locales et résonances associées lorsqu'un fil d'un matériau (a) est déposé sur un substrat (b). Le fil est limité par une surface plane M_2 de base $2R$ et une surface courbée M_1 dont la section est supposée être une parabole de hauteur A (voir Fig. I-1). Par conséquent, la fonction $\xi(x_1)$ (équation (I.35)) a la forme suivante:

$$\xi(x_1) = -A \left[1 - \left(\frac{x_1}{R} \right)^2 \right] \quad \text{pour } x_1 \in [-R, R]$$

Nous avons considéré différents paramètres relatifs pour les deux matériaux (a) et (b) afin de modéliser les situations où le matériau (a) est plus ou moins dur ou plus ou moins dense par rapport au matériau (b). Les données sont représentées dans le tableau I.

$C_{44}(a)/C_{44}(b)$	$\rho(a)/\rho(b)$	$C_t(a)/C_t(b)$
1	1	1
4	1	2
0,25	1	0,5
1	4	0,5
1	0,25	2

Tableau I : Les rapports des paramètres élastiques des différents types de matériaux considérés

D'autre part, en modifiant le rapport A/R , on peut modéliser une variation de la forme de la section du fil.

Comme nous l'avons mentionné au paragraphe (III-2A), la discrétisation des équations intégrales se fait par la division de l'intervalle $[-R, R]$ en $2N$ parties égales. Dans nos applications, nous avons pris $N = 100$ afin d'assurer une bonne convergence du calcul numérique. D'autre part, du fait de la symétrie du système par rapport à l'axe x_3 de la parabole, les quantités physiques représentées peuvent être distinguées par leur caractère symétrique ou antisymétrique.

V-1) Les résonances acoustiques associées à un fil adsorbé

A l'aide d'un traitement numérique des expressions analytiques présentées au paragraphe (III-4), nous calculons d'abord les modes discrets du fil isolé avec différentes conditions aux limites sur ses surfaces, puis nous nous intéressons aux résonances des densités d'états lorsque le fil est adsorbé sur un substrat constitué d'un matériau qui peut être différent de celui du fil.

A) Modes discrets du fil isolé

Les fréquences propres du fil isolé sont les pôles de la fonction de Green \tilde{g}_a ; elles dépendent des conditions aux limites qu'on impose sur les surfaces du fil. Ces fréquences sont discrètes du fait que le système est de taille finie dans le plan (x_1, x_3) bien qu'elles soient en nombre infini,

Dans le cas où la surface entière du fil ($M = \{M_1 M_2\}$) est libre de contrainte, les fréquences propres sont déterminées à partir de l'équation $\det(\tilde{g}_a(M_2 M_2))^{-1} = 0$, alors que

dans le cas où la surface plane M_2 du fil est supposée rigidement bloquée et sa surface courbée M_1 est libre de contrainte, les fréquences propres sont solutions de l'équation $\det[\tilde{g}_a(M_2M_2)] = 0$ (voir équation (I.66)).

Dans ces deux cas, les premières fréquences propres du fil isolé sont données dans le tableau ci-dessous. Ici et dans toute la suite, les fréquences sont données sous forme réduite :

$$\Omega = \frac{\omega R}{C_t^{(a)}}$$

M ₁ et M ₂ libres de contrainte $\det[\tilde{g}_a(M_2M_2)]^{-1} = 0$		M ₁ libre de contrainte et M ₂ rigidement bloquée $\det[\tilde{g}_a(M_2M_2)] = 0$	
Les fréquences des modes symétriques	Les fréquences des modes antisymétriques	Les fréquences des modes symétriques	Les fréquences des modes antisymétriques
1.70	1.90	0.95	2.65
3.20	3.25	2.50	3.95
3.65	4.55	3.95	6.15
4.75	5.30	4.45	6.60
5.10	5.90	5.80	

La connaissance de ces fréquences propres est évidemment utile pour l'étude de l'objet isolé, mais ici nous nous en servons surtout pour une interprétation de certains résultats dans le cas où le fil est adsorbé sur un substrat.

B) Les résonances associées à un fil adsorbé

Les quantités physiques qu'on peut directement déduire des fonctions de Green du fil adsorbé sont les densités d'états totales et locales dont nous pouvons étudier l'évolution en

fonction de la fréquence. En ce qui concerne la densité d'état totale, nous soustrayons de celle-ci la densité d'état du substrat semi-infini et représentons donc la quantité $\Delta n(\omega) = n_d(\omega) - n_b(\omega)$ que nous appellerons variation de densité d'état totale.

On suppose d'abord que le fil et le substrat sont de même nature. Alors, le fil modélise, par exemple, le cas d'une rugosité de surface.

Nous présentons sur la figure (I.6) la variation de la densité d'état totale $\Delta n(\omega)$ en même temps que les moyennes de la densité d'état locale sur l'interface fil-substrat et sur la surface libre du fil adsorbé. Les contributions des modes symétriques et antisymétriques sont séparées. Cette figure (I.6) montre l'existence de modes résonnants qui apparaissent comme des pics importants dans les densités d'états totales et locales. Dans le cas considéré, les différents types de densités d'états ont qualitativement les mêmes pics, même si ceux-ci peuvent avoir des intensités ou profils différents. Nous remarquons aussi l'augmentation progressive du fond de la densité totale en fonction de la fréquence réduite Ω . Ceci est dû au fait que faire croître la fréquence réduite $\Omega = \frac{\omega R}{C_t^{(a)}}$ pour un fil donné est équivalent à garder la fréquence ω constante et à augmenter la taille latérale R du fil. Nous retrouvons ainsi la densité d'état d'un objet à deux dimensions qui augmente en fonction de sa taille.

On peut souligner l'existence d'une résonance de basse fréquence à caractère symétrique issue du mode statique ($\omega = 0$) du fil isolé. Les autres pics de résonance ont leurs

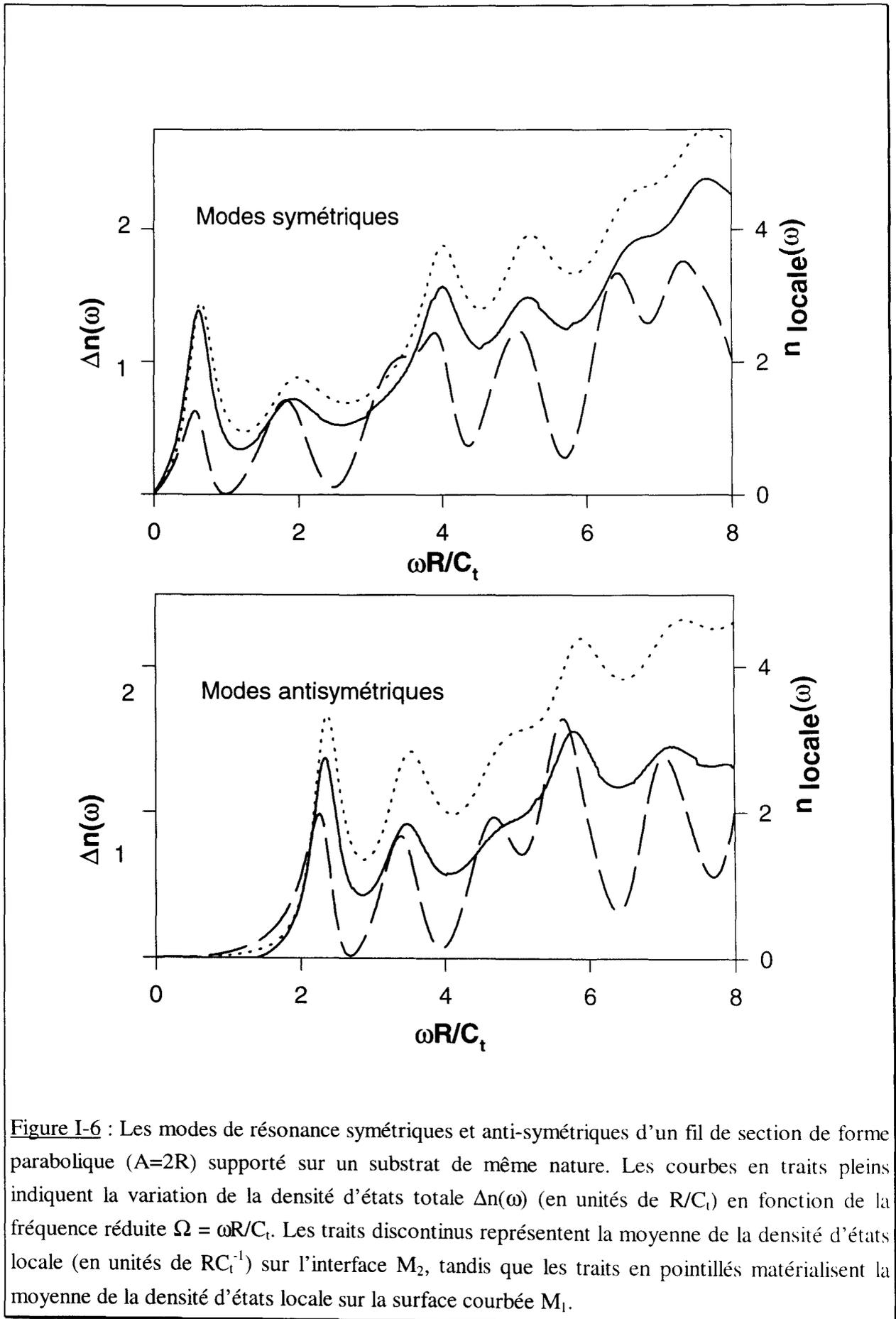


Figure I-6 : Les modes de résonance symétriques et anti-symétriques d'un fil de section de forme parabolique ($A=2R$) supporté sur un substrat de même nature. Les courbes en traits pleins indiquent la variation de la densité d'états totale $\Delta n(\omega)$ (en unités de R/C_t) en fonction de la fréquence réduite $\Omega = \omega R/C_t$. Les traits discontinus représentent la moyenne de la densité d'états locale (en unités de RC_t^{-1}) sur l'interface M_2 , tandis que les traits en pointillés matérialisent la moyenne de la densité d'états locale sur la surface courbée M_1 .

positions assez proches des fréquences propres discrètes d'un fil isolé ayant toutes ses surfaces libres de contraintes.

Cette dernière correspondance est encore davantage visible quand le rapport des constantes élastiques du fil et du substrat $\left(\frac{C_{44}^{(a)}}{C_{44}^{(b)}}\right)$ est supérieur à un (Figure I-7). En effet,

augmenter le rapport des constantes élastiques, signifie que le matériau du substrat devient mou par rapport à celui du fil ; par conséquent les modes du fil seul sont relativement peu perturbés par la présence du substrat. De plus, lorsque le rapport des constantes élastiques

$\frac{C_{44}^{(a)}}{C_{44}^{(b)}}$ devient important, les pics de résonance deviennent plus fins. Cet effet corrobore

l'interprétation précédente selon laquelle les résonances résultent, dans ce cas, simplement de l'élargissement des modes discrets du fil isolé. La finesse des pics permet de déterminer avec précision les positions des modes résonnants et d'observer que leurs positions sont très proches des valeurs des fréquences propres du fil isolé ayant ses surfaces libres de contraintes.

Notons finalement que sur les exemples des figures (I-6) et (I-7) la courbe de variations de la densité d'état totale $\Delta n(\omega)$ présente qualitativement la même allure que les courbes donnant les moyennes des densités d'état locales sur l'interface M_2 fil - substrat et sur la surface courbée M_1 .

Considérons maintenant le cas opposé où le matériau du substrat est très dur par rapport à celui du fil, c'est-à-dire lorsque le rapport des constantes élastiques $\frac{C_{44}^{(a)}}{C_{44}^{(b)}}$ est très inférieur à un (figure I-8). Les positions des pics de résonance dans $\Delta n(\omega)$ sont alors assez

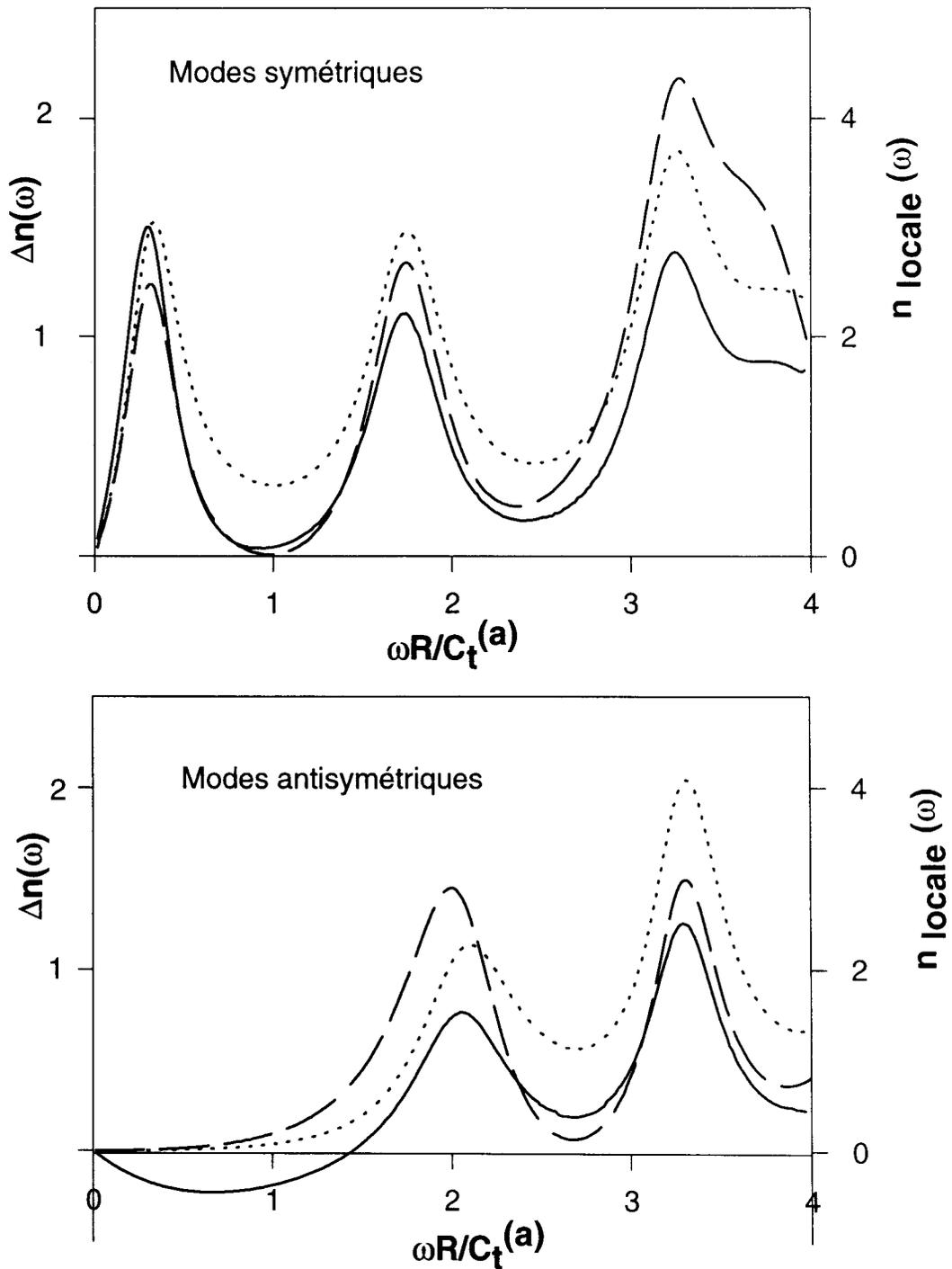


Figure I-7 :Même légende que sur la figure I-6 sauf qu'ici, les paramètres physiques des deux matériaux constituant le système sont : $C_t^{(a)}/C_t^{(b)} = 2$; $C_{44}^{(a)}/C_{44}^{(b)} = 4$; $\rho^{(a)}/\rho^{(b)} = 1$

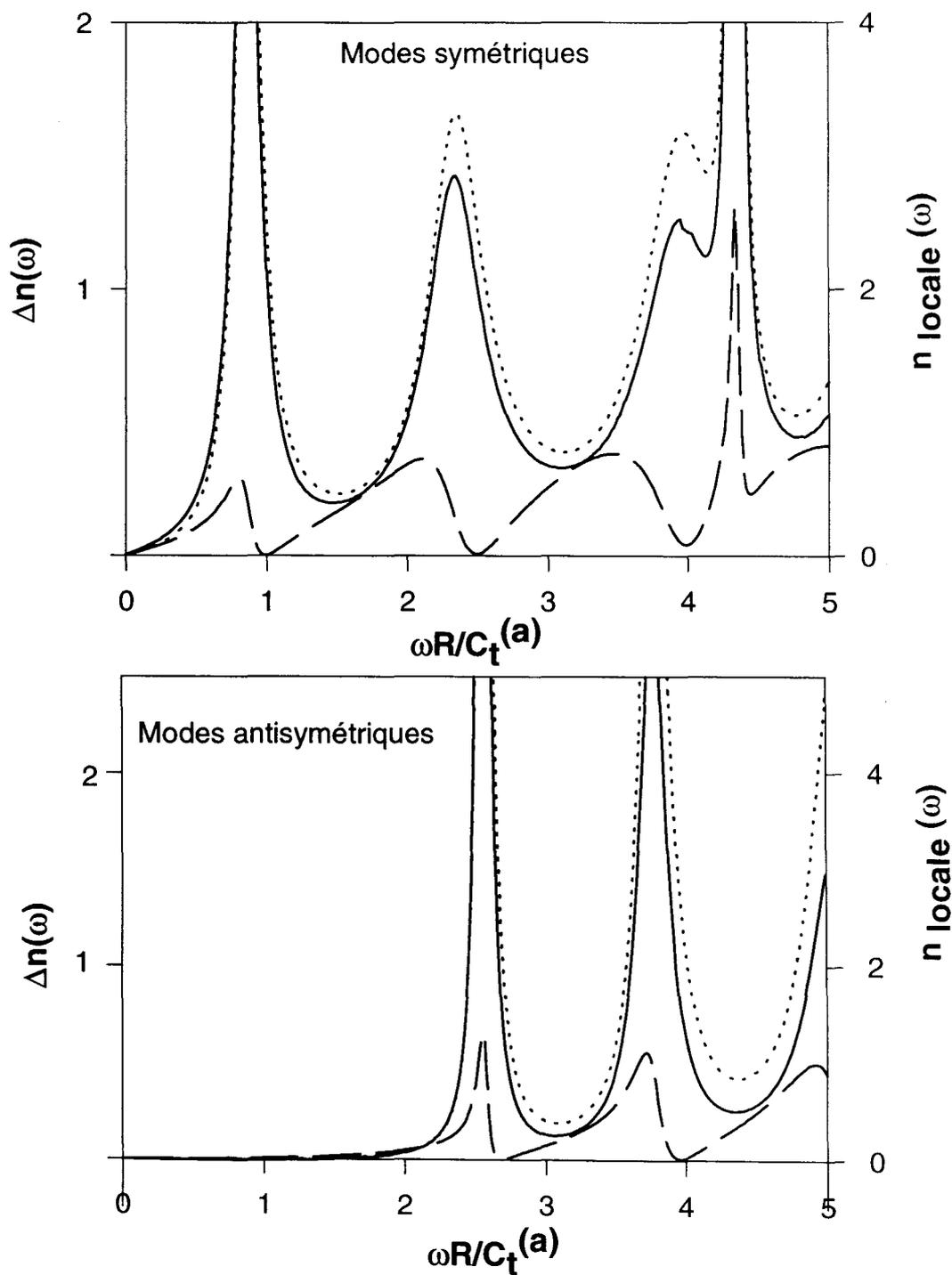


Figure I-8 :Même chose que sur la figure I-6 et 7, mais ici les paramètres physiques des deux matériaux sont : $C_t^{(a)}/C_t^{(b)} = 0.5$; $C_{44}^{(a)}/C_{44}^{(b)} = 0.25$; $\rho^{(a)}/\rho^{(b)} = 1$

proches des fréquences propres d'un fil isolé avec les conditions aux limites mixtes, c'est-à-dire avec sa surface courbée libre de contrainte et sa surface plane M_2 gelée. Ceci corrobore l'idée que dans ce cas le fil supporté a sa surface courbée libre de contrainte, tandis que sa surface plane est presque rigidement bloquée du fait que $C_{44}^{(b)} \gg C_{44}^{(a)}$. On constate aussi que dans ce cas les courbes de $\Delta n(\omega)$ ont la même allure que celles des densités locales sur la surface courbée. Par contre, les courbes montrant les densités d'états locales sur l'interface sont moins intenses et présentent une allure assez différente avec parfois des résonances à l'endroit des anti-résonances dans $\Delta n(\omega)$ et vice-versa.

Sur la figure (I-9), on illustre les mêmes quantités qu'auparavant (figure I-7 et I-8) sauf qu'ici le matériau constituant le fil a une densité de masse plus élevée que celle du matériau du substrat et donc la vitesse transverse du son dans le substrat est supérieure à celle dans le fil. Les courbes de ces densités d'états montrent encore l'existence de modes résonnants bien définis en fonction de la fréquence réduite Ω , mais leurs positions n'ont pas de relation directe avec les modes propres du fil isolé. Notons aussi que dans ce cas, les trois densités d'états présentées sur les figures ont des allures semblables.

Enfin la figure (I-10) décrit des résultats similaires lorsque le matériau du fil est de faible densité par rapport à celui du substrat et donc la vitesse transverse du son dans le fil est plus importante que celle du substrat. Les pics de résonance des densités d'états totales sont plus larges et leurs positions moins précises. On observe aussi que l'allure de la moyenne de la densité d'états locale sur l'interface fil-substrat est différente, voire opposée, à celle des deux autres densités.

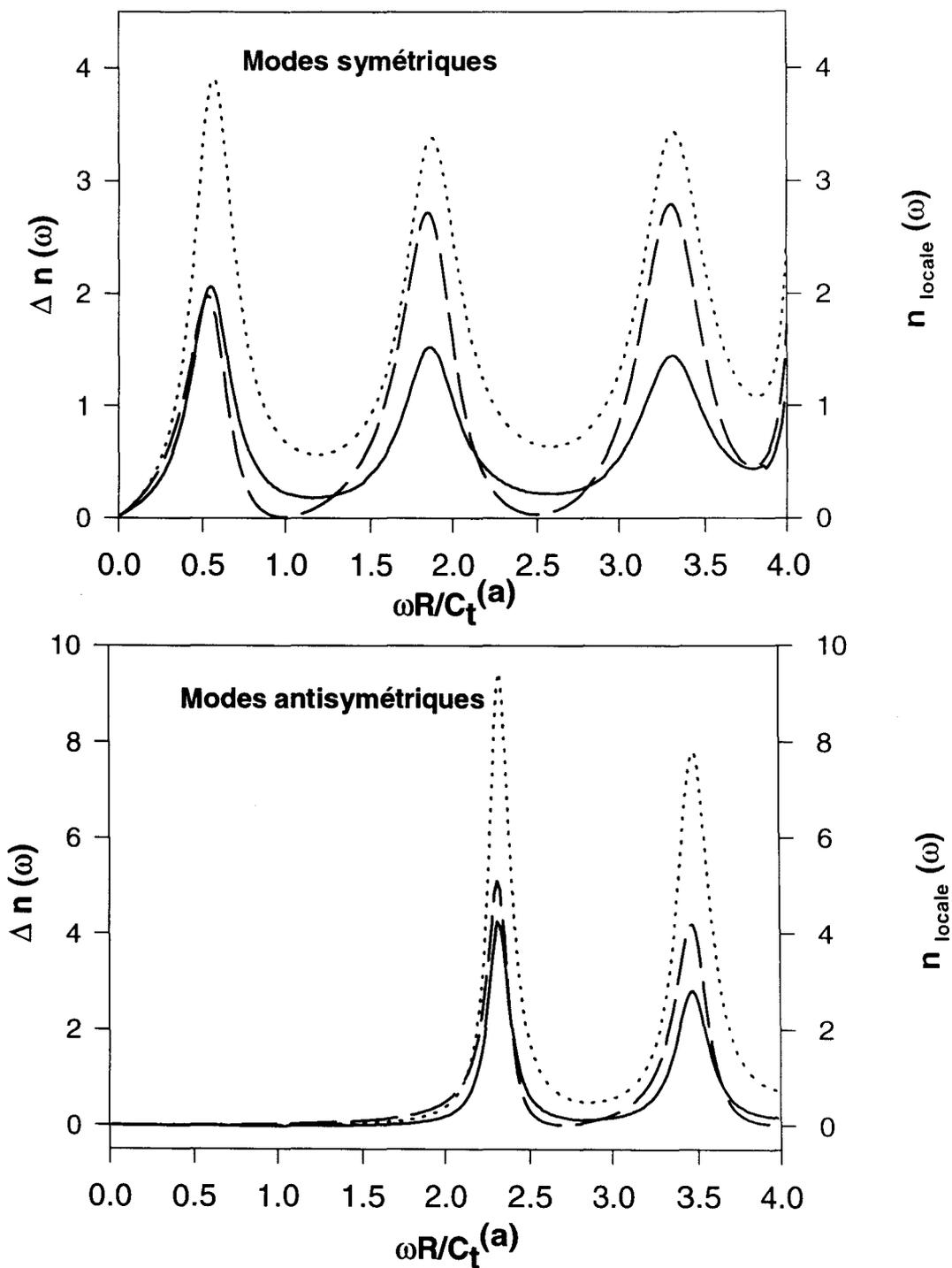


Figure I-9 :Même chose que sur la figure I-8, sauf qu'ici les paramètres physiques des deux matériaux sont : $C_t^{(a)}/C_t^{(b)} = 0.5$; $C_{44}^{(a)}/C_{44}^{(b)} = 1$; $\rho^{(a)}/\rho^{(b)} = 4$

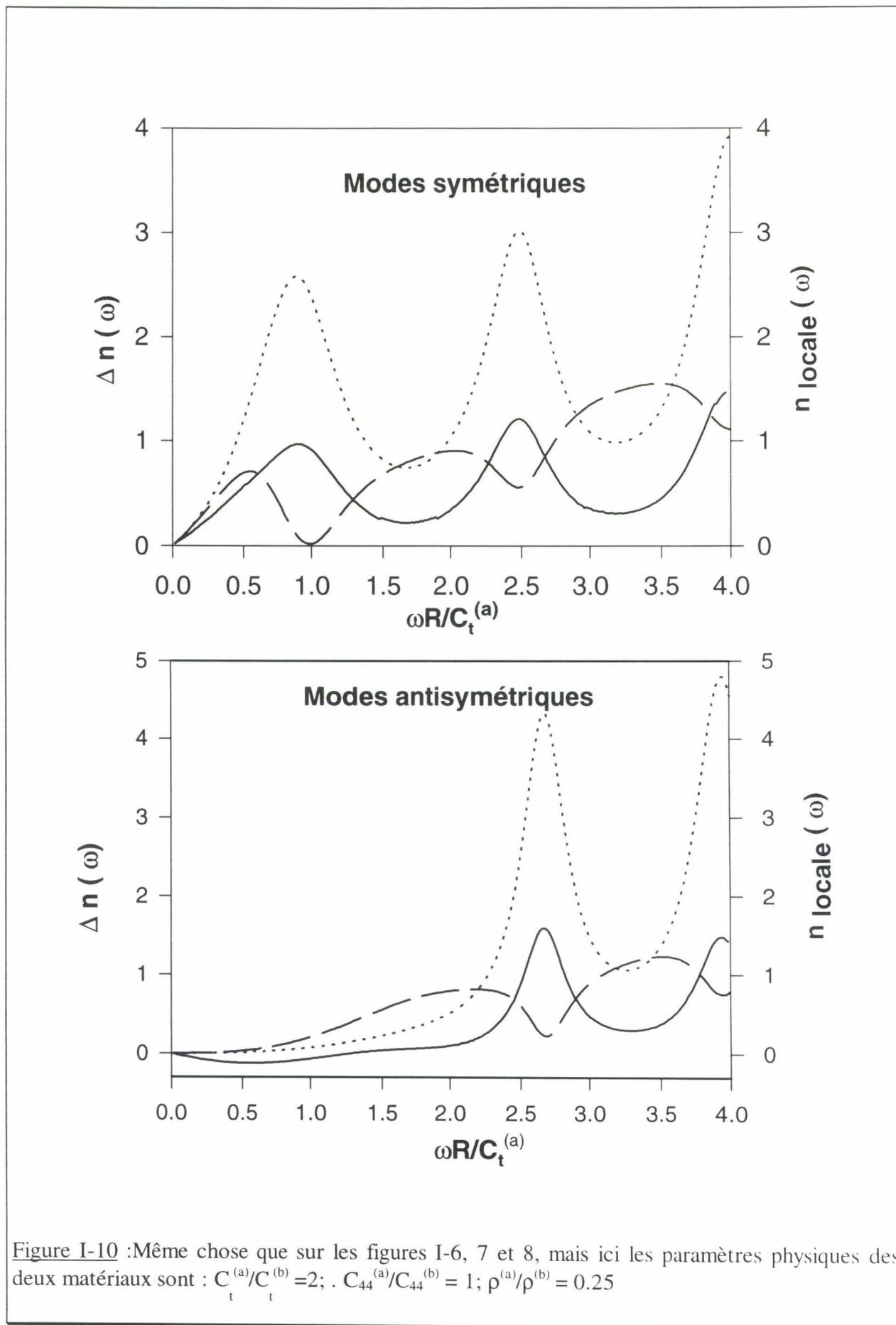


Figure I-10 :Même chose que sur les figures I-6, 7 et 8, mais ici les paramètres physiques des deux matériaux sont : $C_t^{(a)}/C_t^{(b)}=2$; $C_{44}^{(a)}/C_{44}^{(b)}=1$; $\rho^{(a)}/\rho^{(b)}=0.25$

A partir de l'ensemble des résultats précédents, on peut souligner que dans tous les cas traités, les courbes donnant la moyenne de densité d'états locale sur la surface courbée et celle de la variation de la densité d'états totale ont la même allure, et en particulier les mêmes pics de résonances. Par contre, la courbe reflétant la moyenne de densité d'états locale sur l'interface a un comportement différent selon que le matériau du fil est plus ou moins dur ou plus ou moins dense par rapport à celui du substrat . On peut aussi remarquer que dans cette discussion le paramètre qui apparaît significatif pour classer l'allure des densités d'états est le

rapport des impédances acoustiques ($Z = \sqrt{\frac{C_{44}^{(a)} \rho^{(a)}}{C_{44}^{(b)} \rho^{(b)}}}$) des deux matériaux. En effet, lorsque

ce rapport est supérieur à un ($Z > 1$) la variation de la densité d'état totale, ainsi que les moyennes de la densité d'état locale sur l'interface fil-substrat et sur la surface courbée du fil, présentent des allures semblables (voir figures I-6, I-7 et I-9). Par contre, lorsque le rapport des impédances acoustiques est inférieur à un ($Z < 1$), la courbe de la moyenne de la densité d'état locale sur l'interface M_2 présente une allure assez différente, voire une inversion entre les positions des résonances et anti-résonances par rapport à celles de la courbe $\Delta n(\omega)$ (voir figures I-8 et I-10).

Enfin, nous avons étudié l'effet de la forme du fil sur les résonances acoustiques en utilisant comme paramètre la hauteur du fil adsorbé comparée à sa base. En supposant le fil et le substrat de même nature, la figure (I-11) donne les courbes de densités d'états pour une hauteur plus élevée $A = 4R$. Par rapport au cas $A = 2R$ (figure I-6) nous pouvons remarquer les changements suivants :

- d'une part les pics de résonance deviennent plus fins et plus intenses surtout à basse fréquence ;

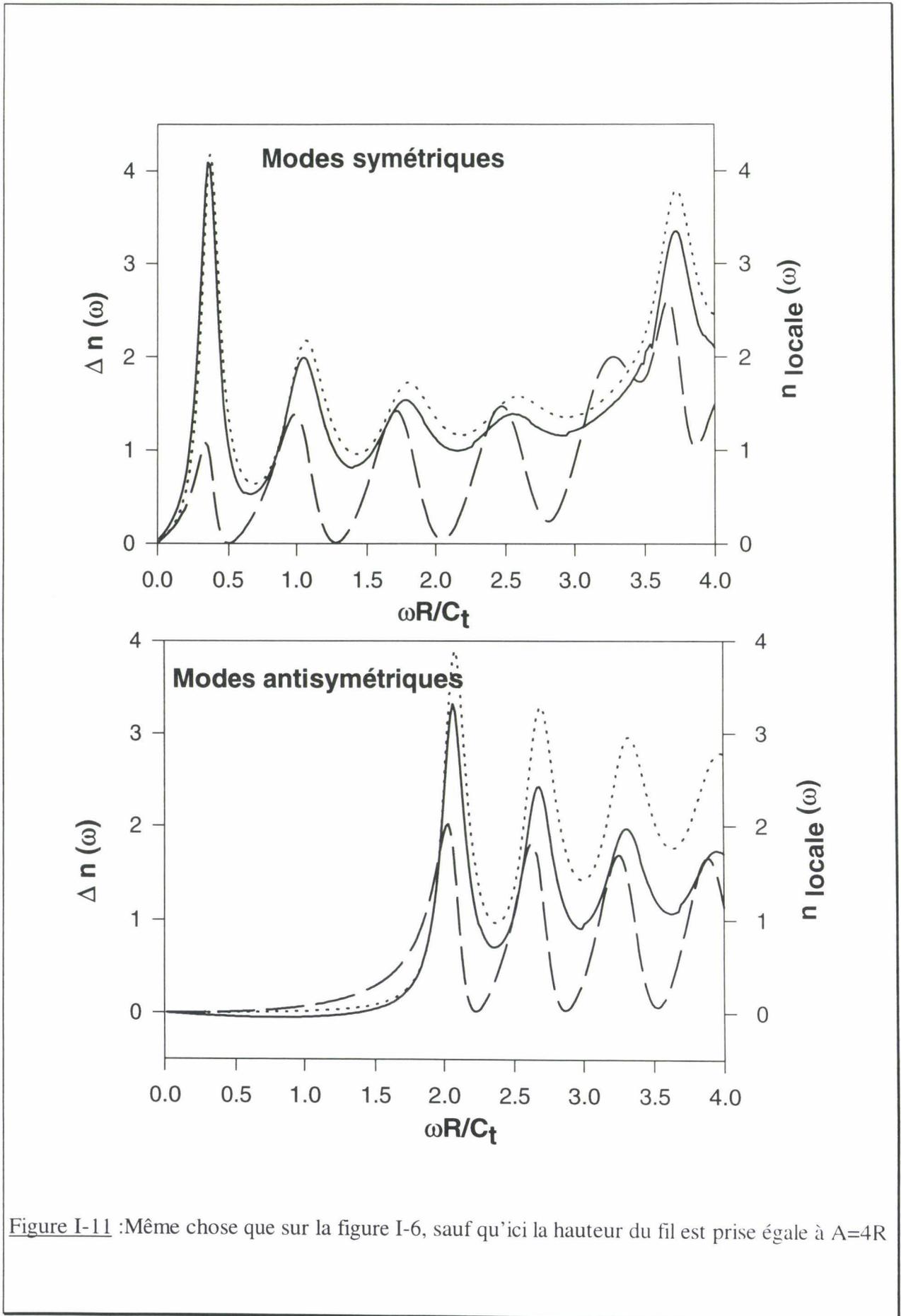


Figure I-11 :Même chose que sur la figure I-6, sauf qu'ici la hauteur du fil est prise égale à $A=4R$

- d'autre part l'espacement entre les pics successifs se réduit, autrement dit on observe une augmentation du nombre de pics sur un même domaine de fréquence. Ceci est en relation avec le fait que les modes discrets du fil isolé deviennent de plus en plus confinés quand la hauteur du fil augmente.

IV-2) Les résonances acoustiques associées à deux fils adsorbés

Dans ce paragraphe, nous étudions les résonances acoustiques pour les modes de polarisation transverse dans le cas de deux fils adsorbés dont les vibrations peuvent interagir. Les deux fils sont séparés par une distance D (voir figure I-2)

La figure (I.12) donne la variation de la densité d'état totale due à l'adsorption de deux fils identiques sur un substrat. Les fils sont de même nature que le substrat et leur hauteur est prise égale à $2R$. On observe sur la figure (I.12) que la variation de la densité d'état totale présente des changements sensibles en fonction de la distance D , en particulier à basses fréquences. Parmi les changements les plus importants, on peut mentionner l'apparition d'un nouveau pic de résonance autour de $\Omega \simeq 1$ pour certaines valeurs de D , aussi bien pour les modes symétriques que pour les modes antisymétriques. Ce nouveau pic de résonance reflète l'interaction entre les deux fils à travers le substrat. On remarque aussi que la variation des intensités de résonance en fonction de D est non monotone.

Finalement, sur la figure (I-13), on représente les courbes de la densité d'états locale intégrée sur l'interface $M2$ pour différentes valeurs du rapport D/R . On constate que les intensités ont un comportement oscillatoire en fonction du rapport D/R , à la fois pour les modes symétriques et antisymétriques, montrant ainsi un échange qui s'opère entre l'importance des modes symétriques et antisymétriques lorsqu'on varie D/R . Par contre, ce comportement n'apparaît pas dans la variation de densité d'états totale [35].

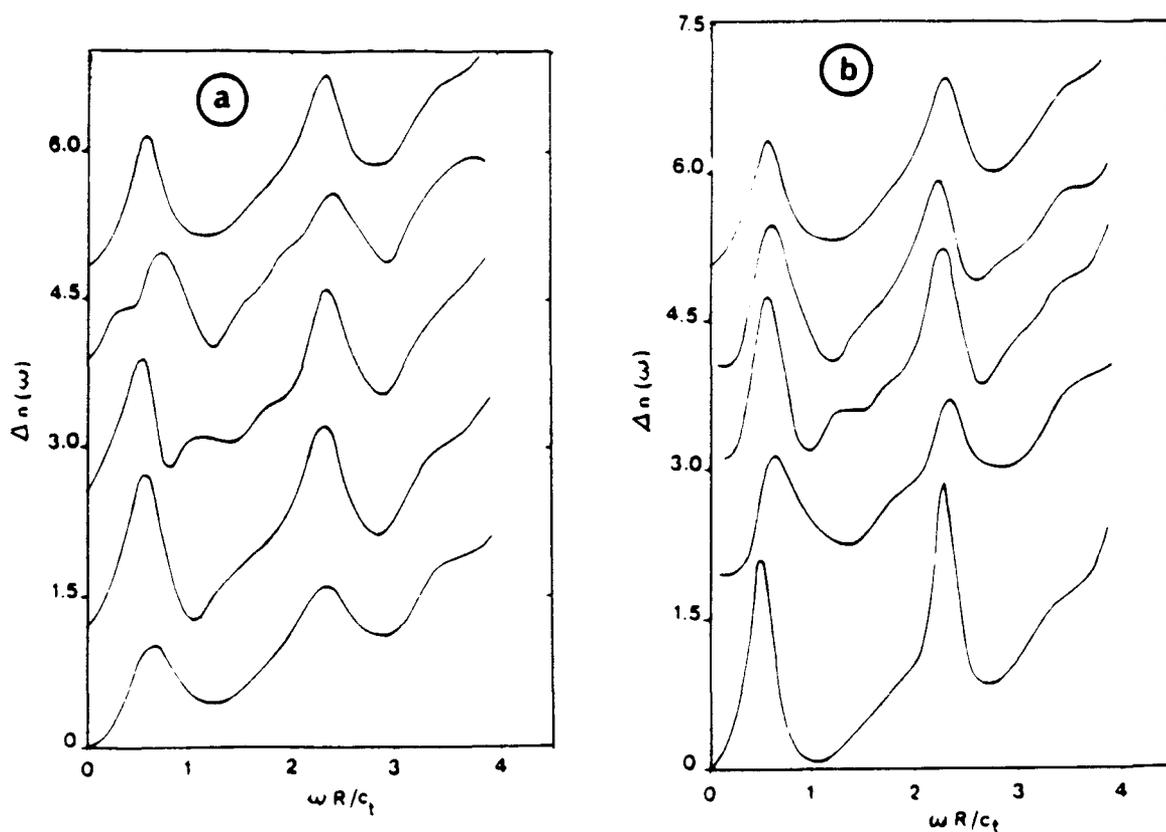


Figure I-12 : (a) Variation de la densité d'états totale pour les modes symétriques associés à l'adsorption de deux fils identiques, séparés de D , sur la surface plane d'un substrat. Les matériaux sont de même nature, tandis que les différentes courbes successives correspondent de bas en haut à des valeurs de $D/R = 0, 3, 5, 7$ et ∞ .

(b) idem que (a), mais pour les modes antisymétriques

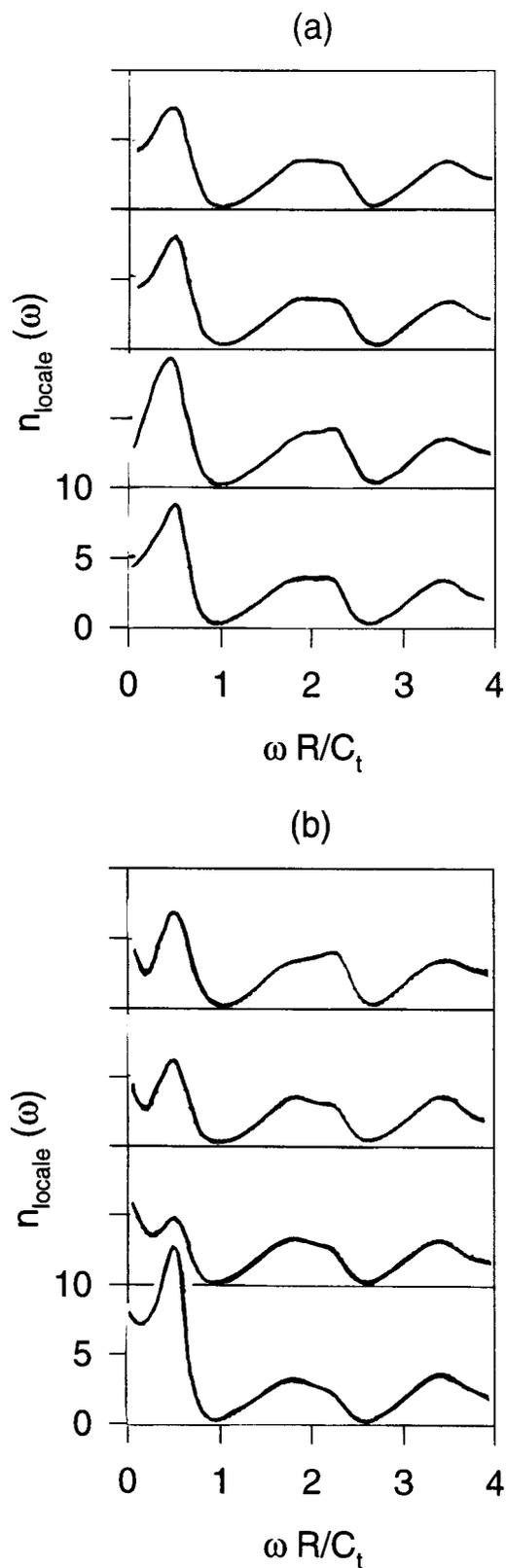


Figure I-13 : Même légende que sur la figure I-12, mais pour les densités d'états locales intégrées sur l'espace d'interface M_2 et les rapports suivants du bas en haut de D/R : 0, 3, 5, 7.

VI) Conclusion

En utilisant le formalisme de la fonction de Green, nous avons présenté une méthode qui permet de calculer ces fonctions réponses pour un fil isolé de forme arbitraire ainsi que pour un tel fil supporté par un substrat. L'étude a été faite pour des vibrations de polarisation transverse. Cette méthode passe par une discrétisation de l'espace des interfaces qui nous a permis de transformer les équations intégrales, issues du théorème de Green, en équations matricielles.

Cette méthode a été appliquée pour étudier les résonances de polarisation transverse associées à un fil de forme parabolique adsorbé sur un substrat. L'étude révèle que l'allure des résonances qui apparaissent comme des pics dans les densités d'états, ainsi que leurs positions dépendent fortement des paramètres physiques relatifs des deux matériaux. Cependant, nous avons dégagé des comportements typiques de ces résonances en fonction de la nature des matériaux. En effet, lorsque le fil est de même nature que le substrat ou plus dur, les positions des pics de résonances correspondent assez bien aux fréquences propres du fil isolé ayant ses surfaces M_1 et M_2 libres de contrainte. Il en résulte dans ce cas que le fil supporté n'est pas très perturbé par le substrat. Dans le cas opposé où le fil est plus mou que le substrat, les positions des pics de résonances correspondent plutôt aux fréquences propres du fil isolé ayant sa surface courbée libre de contrainte mais sa surface plane gelée. D'autre part, lorsque le matériau du fil est plus dense que celui du substrat, les pics de résonance sont encore très bien définis ce qui n'est plus tout à fait le cas lorsque le fil est moins dense que le substrat.

Un autre comportement peut aussi être souligné en relation avec le rapport des impédances acoustiques des deux matériaux. En effet, lorsque ce rapport est supérieur à un, toutes les courbes de densités d'états représentées ($\Delta n(\omega)$), la moyenne de la densité d'état

locale sur l'interface M_2 et la moyenne de la densité d'état locale sur la surface M_1) ont la même allure. Par contre lorsque le rapport des impédances acoustiques est inférieur à un les courbes donnant la moyenne de la densité d'état locale sur l'interface M_2 présentent des allures assez différentes, voire une inversion entre les positions des résonances et anti-résonances par rapport à celles des autres densités d'états.

Nous avons exploré aussi l'évolution de ces résonances résultant de la présence de deux fils identiques adsorbés sur un substrat et nous avons mis en évidence un déplacement et une déformation des pics de résonances en raison de l'interaction entre les deux fils supportés.

Cette théorie sera étendue, au chapitre III au cas d'un ensemble de fils adsorbés périodiquement sur le substrat selon l'axe x_1 . Dans ce cas, nous introduirons un vecteur d'onde k_1 parallèle à l'axe x_1 , qui sera limité à la première zone de Brillouin correspondant à cette périodicité et nous étudierons ensuite les densités d'états de ces nanostructures en fonction de la fréquence et du vecteur d'onde.

APPENDICE A

En vue de donner les éléments de la fonctions de Green du fil supporté dans l'espace des interfaces, nous introduisons d'abord les notations suivantes :

$$\xi(m) = \xi(x_m), \quad \xi'(m) = \left. \frac{\partial \xi(x_1)}{\partial x_1} \right|_{x_1=x_m}, \quad \xi''(m) = \left. \frac{\partial^2 \xi(x_1)}{\partial x_1^2} \right|_{x_1=x_m}$$

et $\text{Log } \gamma = 0.5772156649\dots$ (nombre d'Euler).

a) Le fil isolé

Les éléments de surface de la fonction de Green G de volume sont:

- entre deux points appartenant à la surface M_1 :

$$G(n1 | m1) = -\frac{i}{4C_{44}} [1 + (\xi'(m))^2]^{1/2} \times \\ \times H_0^{(1)} \left\{ \frac{\omega}{C_t} [(x_n - x_m)^2 + (\xi(n) - \xi(m))^2]^{1/2} \right\}, \quad n \neq m; \quad (A1)$$

$$G(n1 | n1) = -\frac{1}{4\pi C_{44}} [1 + (\xi'(n))^2]^{1/2} \times \\ \times \left\{ i\pi + 2 - 2\text{Log} \left[\frac{\gamma}{4} \Delta x \frac{\omega}{C_t} (1 + (\xi'(n))^2)^{1/2} \right] \right\}; \quad (A2)$$

- entre deux points appartenant à la surface M_2

$$G(n2 | m2) = -\frac{i}{4C_{44}} H_0^{(1)} \left\{ \frac{\omega}{C_t} |x_n - x_m| \right\}, \quad n \neq m; \quad (A3)$$

$$G(n2 | n2) = -\frac{1}{4\pi C_{44}} \left\{ i\pi + 2 - 2\text{Log} \left[\frac{\gamma}{4} \Delta x \frac{\omega}{C_t} \right] \right\}; \quad (A4)$$

- entre deux points appartenant l'un à la surface M_1 et l'autre à la surface M_2 :

$$G(n1 | m2) = -\frac{i}{4C_{44}} H_0^{(1)} \left\{ \frac{\omega}{c_t} \left[(x_n - x_m)^2 + (\xi(n))^2 \right]^{1/2} \right\} ; \quad (A5)$$

$$G(n2 | m1) = -\frac{i}{4C_{44}} \left[1 + (\xi'(m))^2 \right]^{1/2} \times \\ \times H_0^{(1)} \left\{ \frac{\omega}{C_t} \left[(x_n - x_m)^2 + (\xi(m))^2 \right]^{1/2} \right\} . \quad (A6)$$

Les éléments de la matrice $\Delta_a(MM)$ définis par équation (I.45) sont donnés par :

- entre deux points de la surface M_1

$$\Delta_a(n1 | m1) = -\frac{i \Delta x \omega}{4C_t} \frac{[-\xi'(m)(x_n - x_m) + (\xi(n) - \xi(m))]}{[(x_n - x_m)^2 + (\xi(n) - \xi(m))^2]^{1/2}} \times \\ H_1^{(1)} \left\{ \frac{\omega}{C_t} \left[(x_n - x_m)^2 + (\xi(n) - \xi(m))^2 \right]^{1/2} \right\} , \quad m \neq n , \quad (A7)$$

où

$$H_1^{(1)}(z) = J_1(z) + i Y_1(z) ; \quad (A8)$$

$$\Delta_a(n1 | n1) = \frac{1}{2} - \frac{\Delta x}{4\pi} \frac{\xi''(n)}{1 + (\xi'(n))^2} ; \quad (A9)$$

- entre deux points de la surface M_2

$$\Delta_a(n2 | m2) = 0 , \quad m \neq n ; \quad (A10)$$

$$\Delta_a(n2 | n2) = \frac{1}{2} ; \quad (A11)$$

- entre deux points appartenant l'un à la surface M_1 et l'autre à la surface M_2

$$\Delta_a(n1 | m2) = \frac{i \Delta x \omega}{4C_t} \frac{\xi(n)}{[(x_n - x_m)^2 + (\xi(n))^2]^{1/2}} \times$$

$$H_1^{(1)} \left\{ \frac{\omega}{C_t} \left[(x_n - x_m)^2 + (\xi(n))^2 \right]^{1/2} \right\} ; \quad (A12)$$

$$\Delta_a(n2 | m1) = - \frac{i \Delta x \omega}{4C_t} \frac{[-\xi'(m)(x_n - x_m) - \xi(m)]}{[(x_n - x_m)^2 + (\xi(m))^2]^{1/2}} \times$$

$$H_1^{(1)} \left\{ \frac{\omega}{C_t} \left[(x_n - x_m)^2 + (\xi(m))^2 \right]^{1/2} \right\} . \quad (A13)$$

b) Le substrat semi infini

A partir de l'équation (I.49), les éléments le long de M_2 ($-R < x_1 < R$, $x_3=0$) de la fonction de Green \tilde{g}_b , sont :

$$g_b(n2 | m2) = - \frac{i}{2C_{44}} H_0^{(1)} \left(\frac{\omega}{C_t} |x_n - x_m| \right) , \quad n = m ; (A14)$$

$$g_b(n2 | n2) = - \frac{1}{2\pi C_{44}} \left(i\pi + 2 - 2 \text{Log} \left[\frac{\gamma}{4} \frac{\Delta x \omega}{C_t} \right] \right) . (A15)$$

Bibliographie

- [1] Lord Rayleigh, Proc. Lond. Math. Soc. 17, 4 (1885)
- [2] A. E. H. Love, Some problems of Geodynamics (Cambridge Univ. Press, London, 1911)
- [3] R. Stoneley, Proc. Roy. Soc. London A106, 416 (1924)
- [4] A. A. Maradudin, R. F. Wallis et L. Dobrzynski, Handbook of surfaces and interfaces, Vol. 3 (Garland, New York 1980)
- [5] M. G. Cottam et A. A. Maradudin, Surface Excitations (Modern Problems in Condensed Matter Sciences 9), Amsterdam : North-Holland 1986
- [6] I. M. Lifshitz et L. N. Rosenzweig, Zh. Ekperim. i Teor. Fiz., 18, 1012 (1948)
I. M. Lifshitz, Nuovo Cimento Suppl. 3, 732 (1956)
- [7] A. A. Maradudin et R. F. Wallis, Phys. Rev. 148, A962 (1966)
- [8] L. Dobrzynski, Annales de Physique (1969)
- [9] A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G. H. Weiss et Ipatova, Theory of lattice dynamics in the harmonic approximation, Academic press, New York and London (1971)
- [10] G. Armand, Phys. Rev. B14, 2218 (1976)
- [11] F. Garcia-Moliner, Ann. Phys. (Paris) 2, 179 (1977)
- [12] B. Djafari-Rouhani, P. Masri, L. Dobrzynski, Phys. Rev. B15, 5690 (1977)
P. Masri et B. Djafari-Rouhani, Journal de Physique, 45, C5 (1984)
- [13] R. E. Allen. Surf. Sci. 76, 91 (1978)
- [14] A. Akjouj, B. Sylla et L. Dobrzynski, Annales de Physique, 18, 363(1993)
- [15] B. Djafari Rouhani, Thèse d'état, Orsay, (1978)
B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, P. Masri, Annales de Physique 6, 259 (1981)

- [16] B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, O. Hardouin Duparc, J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena 30, 119 (1983)
- [17] L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani, O. Hardouin Duyarc, Phys. Rev. B 29, 3138 (1984)
- [18] J. Sapriel, B. Djafari-Rouhani, Surface Science Reports 10, 189 (1989)
- [19] A. A. Maradudin, in Nonequilibrium Phonon Dynamics, ed. W. Born (Plenum, New York, 1985), P. 359
- [20] B. Djafari Rouhani et L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 14, 2296 (1976)
- [21] B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, O. Hardouin Duparc, R. E. Camley, A. A. Maradudin, Phys. Rev. B28, 1711 (1983).
- [22] El H. El Boudouti, Thèse de Doctorat de l'Université de LilleI (1994)
- [23] T. E. Feuchtwang, Phys. Rev. Vol 53, 3 (1967)
- [24] J. Szeftel. A. Khater, F. Mila, S. d'Addato et N. Auby, J. Phys. C : Solid State Phys. 21(1988)
- [25] R. E. Allen, G. P. Alldredge et F. W. deWette. Phys. Rev. B. Vol 4 (1971), 1648
- [26] A.A. Maradudin, P. Ryan et A.R. McGurn, Phys. Rev. B.38, 3068 (1988).
- [27] B. Djafari-Rouhani et A. A. Maradudin, Solid; State. Commu. 73, 173 (1990)
- [28] B. Djafari-Rouhani et L. Dobrzynski, J. Phys. Condes. Matter. 5, 8177 (1993)
- [29] A. Khater, O. Rafil, Y. Labaye et Y. Penneç, Solid State Commun. 87, 53 (1993) ; Y. Penneç et A. Khater, Surface Science Letters, 348, L82 (1996).
- [30] J.S. Nkoma, Solid State Commun, 78, 525 (1991).
- [31] Ch. Kunze, Phys. Rev. B 48, 14338 (1993).
- [32] L. Dobrzynski Surf. Sci. Rept. 11, 139 (1990); Surf. Sci. 180, 489 (1987)

- [33] E. Dieulesaint et D. Royer, Ondes élastiques dans les solides; application au traitement de signal (Masson, Paris, 1974)
- [34] P.M. Morse and H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics, Vol I, Mc Graw Hill, New York (1953).
- J. E. Inglesfield, J. Phys. C, 4, L4 (1971)
- [35] B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, et A. Khelif, Prog. Surf. Sci. 48, 301 (1995)

CHAPITRE II

Diffusion des ondes acoustiques par un fil déposé

sur un substrat

SOMMAIRE

I) <u>INTRODUCTION</u>	62
II) <u>LA THEORIE DE LA DIFFUSION ACOUSTIQUE PAR UN FIL SUPPORTE</u>	64
III) <u>DIFFUSION D'UNE ONDE PLANE PAR LE FIL SUPPORTE</u>	67
III-1) <u>Incidence normale</u>	68
III-2) <u>Incidence oblique</u>	78
IV) <u>CONCLUSION</u>	86
<u>BIBLIOGRAPHIE</u>	88

**Diffusion des ondes acoustiques par un fil déposé
sur un substrat**

I) Introduction

Les progrès récents dans les techniques de fabrication des nanostructures telles que la croissance par épitaxie par jets moléculaire, la cinétique de croissance et autostructuration, la microlithographie... ont permis de réaliser des micro ou des nano défauts de nature et de forme bien définies sur des surfaces solides. En parallèle, les techniques d'investigation de la géométrie et des propriétés physiques de ces nanostructures telles que les microscopies à effet tunnel (S.T.M.) et à force atomique (A.F.M) ainsi que la microscopie optique en champ proche ont également progressé.

Des travaux récents ont porté sur la recherche des propriétés spectrales et de réponse de telles hétérostructures ainsi que sur leur imagerie. Parmi les sujets actuels qui présentent un intérêt à la fois fondamental et appliqué, nous pouvons mentionner l'étude de la diffusion des ondes acoustiques par un élément résonateur unique [1- 4], ainsi que par des surfaces solides ondulées périodiquement ou quasi-périodiquement [5], l'effet que produit une surface irrégulière sur le système de transport quantique [6], la spectroscopie optique d'une surface à l'échelle nanométrique [7, 8]. De même les spectres d'excitations vibrationnelles [9-12],

électromagnétiques [13] ou électroniques [6] du substrat sont modifiées par la présence d'une hétérogénéité en surface.

Sur le plan théorique, la méthode des fonctions de Green [14] est bien adaptée à l'étude des propriétés spectrales et de diffusion de tels défauts de surface. Dans le chapitre précédent, nous avons élaboré une méthode de calcul numérique exacte [11] pour déterminer les fonctions de Green d'un ou de deux fils adsorbés sur un substrat. Les densités d'états déduites de ces fonctions nous ont permis d'étudier les résonances acoustiques associées à ces nanostructures et leurs comportements en fonction des paramètres physiques et géométriques des deux matériaux.

L'objet de ce chapitre est d'utiliser ce formalisme, afin d'étudier la diffusion d'une onde acoustique incidente par un fil adsorbé sur la surface plane d'un substrat. Ce formalisme nous permet de calculer l'onde diffusée aussi bien en champ proche qu'en champ lointain [15, 16].

Il est intéressant de montrer à travers plusieurs illustrations que le champ de diffusion d'une surface inhomogène est bien sûr fortement dépendant de la forme de l'objet diffusant, mais aussi des paramètres élastiques relatifs du substrat et du fil supporté, ainsi que de la fréquence de l'onde incidente et de l'angle d'incidence. A partir de ces exemples, nous essaierons également de dégager quelques tendances générales.

La suite de ce chapitre est structurée de la façon suivante. Dans une première partie, nous présentons un aperçu de la théorie de diffusion où nous développons l'expression générale de l'onde diffusée en tout point ainsi que son comportement asymptotique en champ lointain. La deuxième partie contient des analyses et discussions du comportement du champ diffusé en fonction des paramètres physiques des matériaux, la forme du fil étant choisie parabolique.

Nous examinerons le diagramme de diffusion en fonction de la fréquence, d'abord en incidence normale, puis pour différentes incidences obliques.

II) La théorie de la diffusion acoustique par un fil supporté

Dans le chapitre I, nous avons vu qu'il est possible et utile de définir à partir des équations (I-25) et (I-26), la matrice de diffusion $\tilde{T}(M_2M_2)$ sous la forme suivante :

$$\tilde{T}(M_2M_2) = \left[\tilde{g}_r^{-1}(M_2M_2) \tilde{g}_d(M_2M_2) - \tilde{I}(M_2M_2) \right] \tilde{g}_r^{-1}(M_2M_2) \quad (\text{II-1})$$

M_2 : est l'espace d'interface entre les deux milieux.

$\tilde{g}_d(M_2M_2)$: est la fonction du Green du fil supporté sur l'interface M_2 ,

$\tilde{g}_r(M_2M_2)$: est la fonction du Green du système de référence sur l'interface M_2 .

En effet, cette matrice de diffusion (définie dans l'équation (II-1)) suffit à résoudre le problème de la diffusion d'une onde par une surface rugueuse. Soit $|U(D)\rangle$ le champ des déplacements d'une fonction d'onde dans l'espace entier D pour le système de référence qui est, dans notre cas, le substrat semi-infini possédant une surface plane et libre de contrainte. Le champ des déplacements total en présence du fil supporté, devient [11, 17] :

$$|u(D)\rangle = |U(D)\rangle + \tilde{g}_r(DM_2) \tilde{T}(M_2M_2) |U(M_2)\rangle \quad (\text{II-2})$$

ce qui peut être écrit de manière formelle :

$$|u(D)\rangle = |U(D)\rangle + |U^{(s)}(D)\rangle \quad (\text{II-3 a})$$

avec :

$$|U^{(s)}(D)\rangle = \bar{g}_r(DM_2)\vec{T}(M_2M_2)|U(M_2)\rangle \quad (\text{II-3 b})$$

La partie $|U^{(s)}(D)\rangle$ représente donc le champ diffusé par le défaut superficiel. Pour être plus précis, prenons le cas d'une onde incidente plane de fréquence ω et arrivant sur la surface avec un angle d'incidence θ_i . Le champ des déplacements incident $|U^{(i)}(D)\rangle$ s'écrit alors,

$$U^{(i)}(x_1, x_3|\omega) = \frac{W}{2} \exp\left[\frac{i\omega}{C_t^{(b)}}(x_1 \sin \theta_i - x_3 \cos \theta_i)\right] \quad (\text{II-4})$$

où $\frac{W}{2}$ est l'amplitude de l'onde.

Si le substrat était seul (non perturbé par le fil), le champ des déplacements $|U(D)\rangle$ de notre système de référence s'écrirait sous la forme suivante : $|U(D)\rangle = |U^{(i)}(D)\rangle + |U^{(r)}(D)\rangle$, c'est-à-dire :

$$U(x_1, x_3|\omega) = \frac{W}{2} \left\{ \exp\left[\frac{i\omega}{C_t^{(b)}}(x_1 \sin \theta_i - x_3 \cos \theta_i)\right] + \exp\left[\frac{i\omega}{C_t^{(b)}}(x_1 \sin \theta_i + x_3 \cos \theta_i)\right] \right\} \quad (\text{II-5})$$

où le second terme de cette expression donne l'onde réfléchie ($|U^{(r)}(D)\rangle$) par la surface plane parfaite. Rappelons qu'en présence du fil adsorbé, le champ de déplacement total ($|u(D)\rangle$) est donné par l'équation (II.3) où $|U^{(s)}D\rangle$ représente maintenant la partie diffusée du champ.

Nous pouvons ainsi calculer le champ de diffusion $U^{(s)}(x_1, x_3|\omega)$ en n'importe quel point d'observation (x_1, x_3) , que ce soit dans un régime de champ proche ou de champ lointain. Cela

est possible à partir de la connaissance de la fonction de Green de référence (dans notre cas, $\tilde{g}_r = \tilde{g}_b$, puisque nous allons analyser le champ de diffusion à l'intérieur du substrat) et la matrice de diffusion $\tilde{T}(M_2 M_2)$ qui nécessite uniquement la connaissance de la fonction de Green du fil supporté $\tilde{g}_d(M_2 M_2)$ dans l'espace M_2 de l'interface fil-substrat.

En particulier, dans un régime de champ lointain, il est possible de remplacer la fonction de Green du substrat par sa forme asymptotique. Rappelons que la fonction de référence \tilde{g}_r , égale à celle du substrat \tilde{g}_b , a une expression analytique à l'aide d'une fonction de Hankel, comme suit [18, 19] :

$$g_r(x_1 x_3 | \omega) = g_b(x_1 x_3 | \omega) = \frac{-1}{4C_t^{(b)}} \left\{ H_0^{(1)} \left[\frac{\omega}{C_t^{(b)}} \left((x_1 - x'_1)^2 + (x_3 - x'_3)^2 \right)^{1/2} \right] + H_0^{(1)} \left[\frac{\omega}{C_t^{(b)}} \left((x_1 - x'_1)^2 + (x_3 + x'_3)^2 \right)^{1/2} \right] \right\} \quad (\text{II-6})$$

On peut alors utiliser la forme asymptotique de la fonction de Hankel pour les grands arguments z [20] :

$$H_0^{(1)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp(i(z - \pi/4)) \quad (\text{II-7})$$

avec $z = \left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} \left((x_1 - x'_1)^2 + (x_3 - x'_3)^2 \right)^{1/2} \right)$ pour le premier terme de l'équation (II-6) et

$z = \left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} \left((x_1 - x'_1)^2 + (x_3 + x'_3)^2 \right)^{1/2} \right)$ pour le second.

L'équation (II-3 b) alors conduit à l'expression suivante du champ de diffusion $|U^{(s)}\rangle$ en régime de champ lointain :

$$U^{(s)}(r, \theta | \omega) = \frac{-i}{2C_{44}} \sqrt{\frac{2C_t^{(b)}}{\pi \omega r}} \exp\left(i\left(\frac{\pi r}{C_t^{(b)}} - \pi/4\right)\right) \times \sum_{k, \ell} \left(\frac{-i\omega}{C_t^{(b)}} x_k \sin\theta\right) T(x_k, x_\ell) \exp\left(\frac{i\omega}{C_t^{(b)}} x_\ell \sin\theta_i\right) \quad (\text{II-8})$$

où x_k et x_ℓ sont des points discrets qui varient le long de l'interface M_2 . (r, θ) sont les coordonnées polaires du point d'observation (x_1, x_3) , c'est-à-dire :

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= r \cos \theta \\ x_3 &= r \sin \theta \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-9})$$

III) Diffusion d'une onde plane par le fil supporté

Dans ce paragraphe, nous présentons quelques applications de la théorie de diffusion d'une onde plane par le fil adsorbé. L'onde incidente a une fréquence ω et un angle d'incidence θ_i (voir Figure II-1).

Dans ce qui suit, nous allons discuter l'allure et le comportement de l'onde diffusée en fonction de la fréquence ω et de l'angle d'incidence θ_i pour différentes valeurs des paramètres élastiques des matériaux constituants ($a = \text{fil}$ et $b = \text{substrat}$). La section du fil dans le plan (x_1, x_3) est choisie de forme parabolique et dans la plupart des exemples présentés la hauteur du fil A est prise égale à $2R$. Néanmoins, en faisant varier A , on peut modéliser l'effet de la forme du fil sur les résultats. La fréquence est présentée sous la forme réduite $\Omega = \frac{\omega R}{C_t^{(a)}}$ comme dans le chapitre précédent.

Dans un premier temps, nous étudions en détail le cas d'une onde tombant en incidence normale sur la surface ($\theta_i = 0$), puis nous généraliserons l'étude pour une incidence oblique.

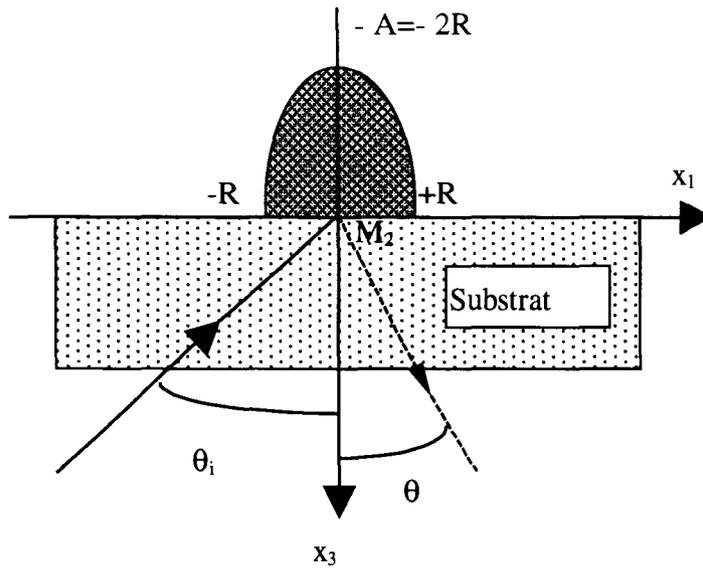


Figure II-1 : Géométrie de la diffusion d'une onde de volume par un fil adsorbé sur un substrat. La flèche en trait plein (\longrightarrow) matérialise une onde incidente avec un angle θ_i , tandis que la flèche en trait discontinu (\dashrightarrow) réfère à une onde diffusée avec un angle θ . M_2 est l'espace d'interface fil-substrat.

III-1) Incidence normale

Afin d'avoir une première idée de la dépendance de l'onde diffusée avec la fréquence, choisissons d'abord le point d'observation $(x_1, x_3) = (r, \theta)$ le long de l'axe x_3 , c'est à dire lorsque $x_1 = 0$ ou encore $\theta = 0$. L'onde diffusée dans un champ lointain et dans la direction de l'axe x_3 s'exprime de la façon suivante :

$$U^{(s)}(r, \theta = 0 | \omega) = -\frac{i}{2C_{44}^{(b)}} \sqrt{\frac{2C_t^{(b)}}{\pi \omega r}} \exp \left[i \left(\frac{\omega r}{C_t^{(b)}} - \frac{\pi}{4} \right) \right] \sum_{k, \ell} T(x_k, x_\ell) \quad (\text{II-11})$$

Les sommes sur k et ℓ dans l'équation précédente portent sur les points de l'espace d'interface M_2 .

Nous constatons tout d'abord que la dépendance du module de l'onde diffusée avec la fréquence s'exprime par la quantité $S = \left| \sum_{k,\ell} T(x_k, x_\ell) \right|$. Nous avons représenté cette quantité sur la figure (II-2.) en fonction de la fréquence ω , et ceci, pour différentes valeurs des paramètres élastiques des matériaux (a) et (b). Nous remarquons qu'en raison de la symétrie de la situation considérée dans ce cas, seuls les modes symétriques participent à la diffusion.

Le comportement de la quantité S (ou $|U^{(s)}|$) est caractérisé par une série d'augmentations et de diminutions successives : aux fréquences où se produisent les minima, la quantité S devient très petite ou presque nulle. Les positions des minima se confondent en réalité avec les fréquences particulières ($\Omega \simeq 1,75 ; 3,25 ; 4,65 ; 6,15 \dots$), qui sont les fréquences propres symétriques du fil isolé (sans support) ayant des surfaces libres de contrainte. Une explication de ce comportement est le fait que, pour ces fréquences, la condition aux limites à la surface plane du substrat n'est pas perturbée par la présence du fil supporté.

Sur cette figure (II-2), deux comportements typiques peuvent être distingués en relation avec les paramètres physiques des matériaux et plus précisément en fonction du rapport des

impédances acoustiques $(Z = \sqrt{\frac{C_{44}^{(a)} \rho_a}{C_{44}^{(b)} \rho_b}})$. La première situation est celle où $Z > 1$ qui se

produit soit lorsque le fil est constitué d'un matériau très dur par rapport à celui du substrat (c'est-à-dire $C_{44}^{(a)} \gg C_{44}^{(b)}$, Figure (II-2a)), soit lorsque la densité de masse du fil est beaucoup

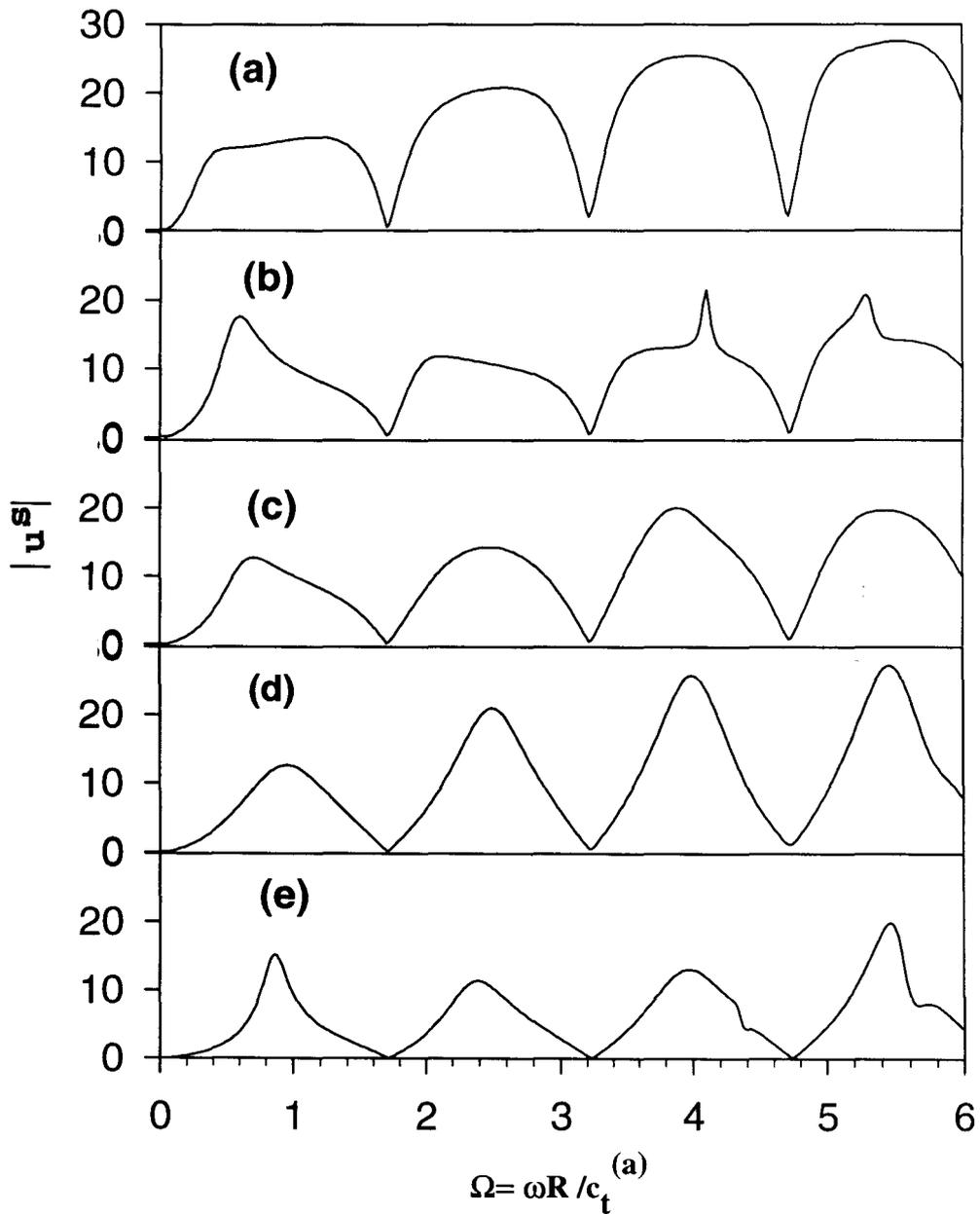


Figure II-2 : Variations de l'amplitude de l'onde diffusée, en champ lointain, le long de l'axe x_3 en fonction de la fréquence réduite Ω . L'onde incidente est normale à la surface du substrat ($\theta_i=0$). Nous avons considéré différentes combinaisons des paramètres élastiques $\alpha=C_{44}^{(a)}/C_{44}^{(b)}$ et $\beta = \rho^{(a)} / \rho^{(b)}$: (a) $\alpha = 4$, $\beta = 1$; (b) $\alpha = 1$, $\beta = 4$; (c) $\alpha = 1$, $\beta = 1$; (d) $\alpha = 1$, $\beta = 1/4$; (e) $\alpha=1/4$, $\beta = 1$.

plus élevée que celle du substrat (c'est-à-dire $\rho_{(a)} \gg \rho_{(b)}$, Figure II-2b). Dans ces deux cas, l'amplitude de l'onde diffusée comporte des chutes assez brutales (aiguës) aux voisinages des fréquences des minima. Entre ces fréquences, l'amplitude prend l'allure de plateaux, à quelques exceptions près dans la figure (II-2b). Dans cette courbe, on constate l'apparition de pics aigus à des fréquences précises ($\Omega = 4,25 ; 5,30 \dots$) qui correspondent aux résonances très intenses dans les densités d'états du fil supporté. Ceci montre que le champ de diffusion est aussi influencé par les résonances du fil supporté.

Dans le cas opposé où $Z < 1$, c'est-à-dire quand le fil est très mou par rapport au substrat ($C_{44}^{(a)} \ll C_{44}^{(b)}$; Figure II-2e), ou bien lorsque sa densité de masse est très faible par rapport à celle du substrat ($\rho^{(a)} \ll \rho^{(b)}$; Figure (II-2d)), nous remarquons que les augmentations et diminutions successives de l'amplitude $|U^{(s)}|$ en fonction de ω se produisent de façon plutôt régulière. Enfin, il y a le cas intermédiaire où le fil et le substrat sont constitués du même matériau (figure II-2c).

Sur la figure (II-2) les valeurs de cette impédance relative sont respectivement $Z = 2$ (Figure II-2a et b) ; $Z = 1$ (Figure II-2c) et $Z = 0,5$ (Figures II-2d et e).

Il est à noter que dans la figure II-2 l'amplitude de l'onde diffusée a été calculée dans l'approximation asymptotique en utilisant l'expression II-8. Dans les figures qui vont suivre les calculs de l'onde diffusée sont faits de façon exacte à partir de l'équation (II-3b).

Maintenant, nous allons analyser plus en détail l'amplitude de l'onde diffusée en fonction de l'angle θ du point d'observation. En premier lieu, on peut remarquer que même si l'angle d'observation θ est différent de zéro, l'amplitude de l'onde diffusée $|U^{(s)}|$ présente des augmentations et diminutions successives en fonction de ω . Ce résultat est illustré sur la figure (II-3) pour des matériaux de même nature.

En second lieu, sur la figure (II-4) nous présentons la distribution angulaire du champ diffusé ($|U^{(s)}|$ en fonction de l'angle d'observation θ) uniquement aux fréquences où le phénomène de diffusion devient important, à savoir $\Omega = 1 ; 4 ; 5,5$ etc... La distance r du point d'observation par rapport à l'origine est prise égale à $4R$, ce qui nous place dans le cadre du champ proche. Cette figure (II-4) montre que, pour des fréquences croissantes, la distribution angulaire du champ diffusé peut présenter typiquement deux allures selon la vitesse relative du

son dans les deux constituants $\left(\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}} = \sqrt{\frac{C_{44}^{(a)}/\rho_a}{C_{44}^{(b)}/\rho_b}}\right)$. Quand le rapport $\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}}$ est supérieur à un (Figures II-4a et b), l'angle d'ouverture du champ diffusé autour de $\theta = 0$ se rétrécit pour les fréquences croissantes, tandis que de nouvelles petites oscillations apparaissent sur les côtés.

Dans le cas opposé où le rapport $\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}}$ est inférieur à un (Figures II-4c et d), la distribution angulaire reste large et présente parfois des oscillations dont les amplitudes restent du même ordre de grandeur pour différentes valeurs de la fréquence.

Sur la figure (II-5), nous avons aussi présenté des résultats similaires à ceux de la figure (II-4) pour les paramètres physiques de quelques systèmes réels, à savoir :

Si / GaAs ; GaAs / Si ; W / Al et Al / W

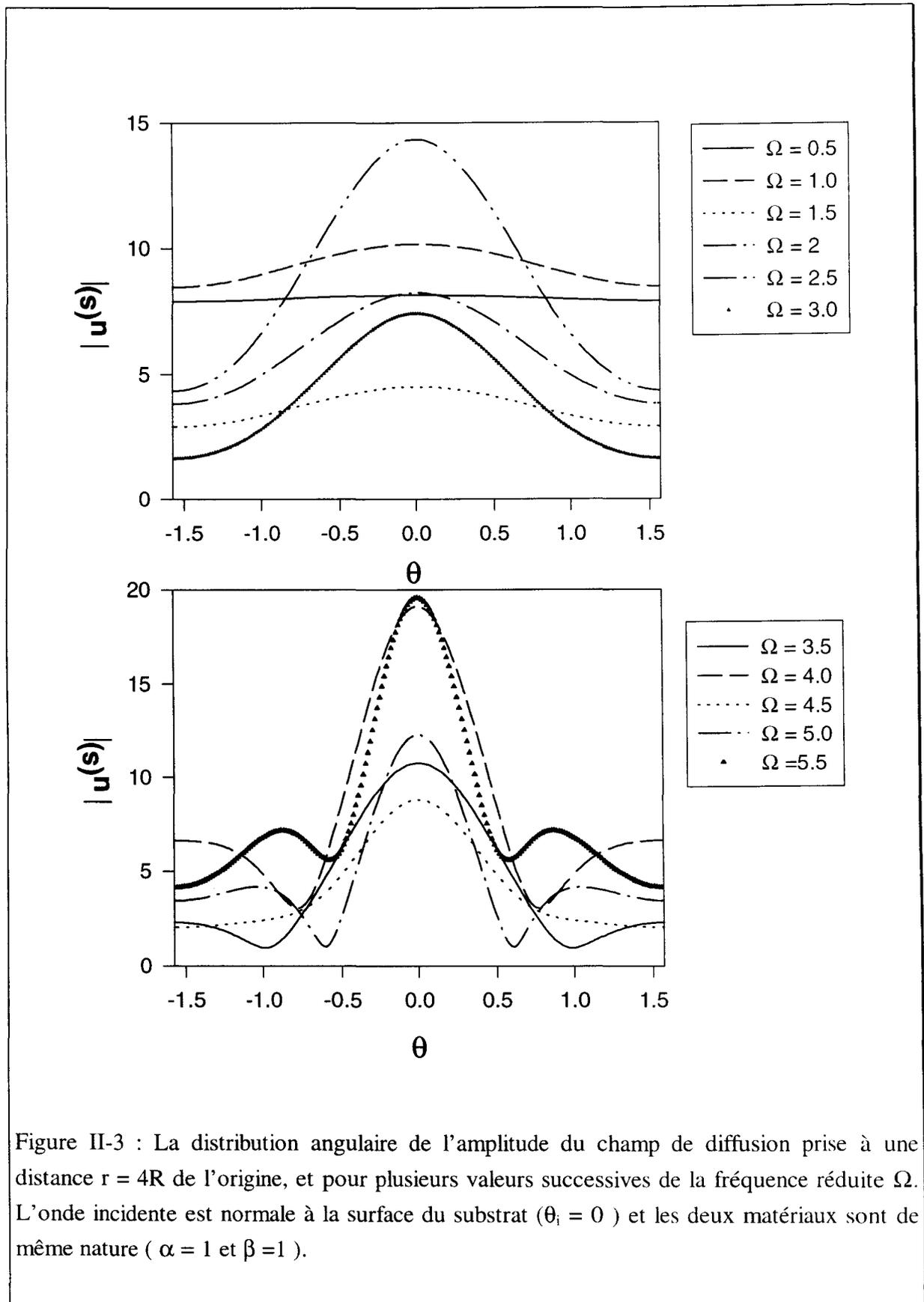


Figure II-3 : La distribution angulaire de l'amplitude du champ de diffusion prise à une distance $r = 4R$ de l'origine, et pour plusieurs valeurs successives de la fréquence réduite Ω . L'onde incidente est normale à la surface du substrat ($\theta_i = 0$) et les deux matériaux sont de même nature ($\alpha = 1$ et $\beta = 1$).

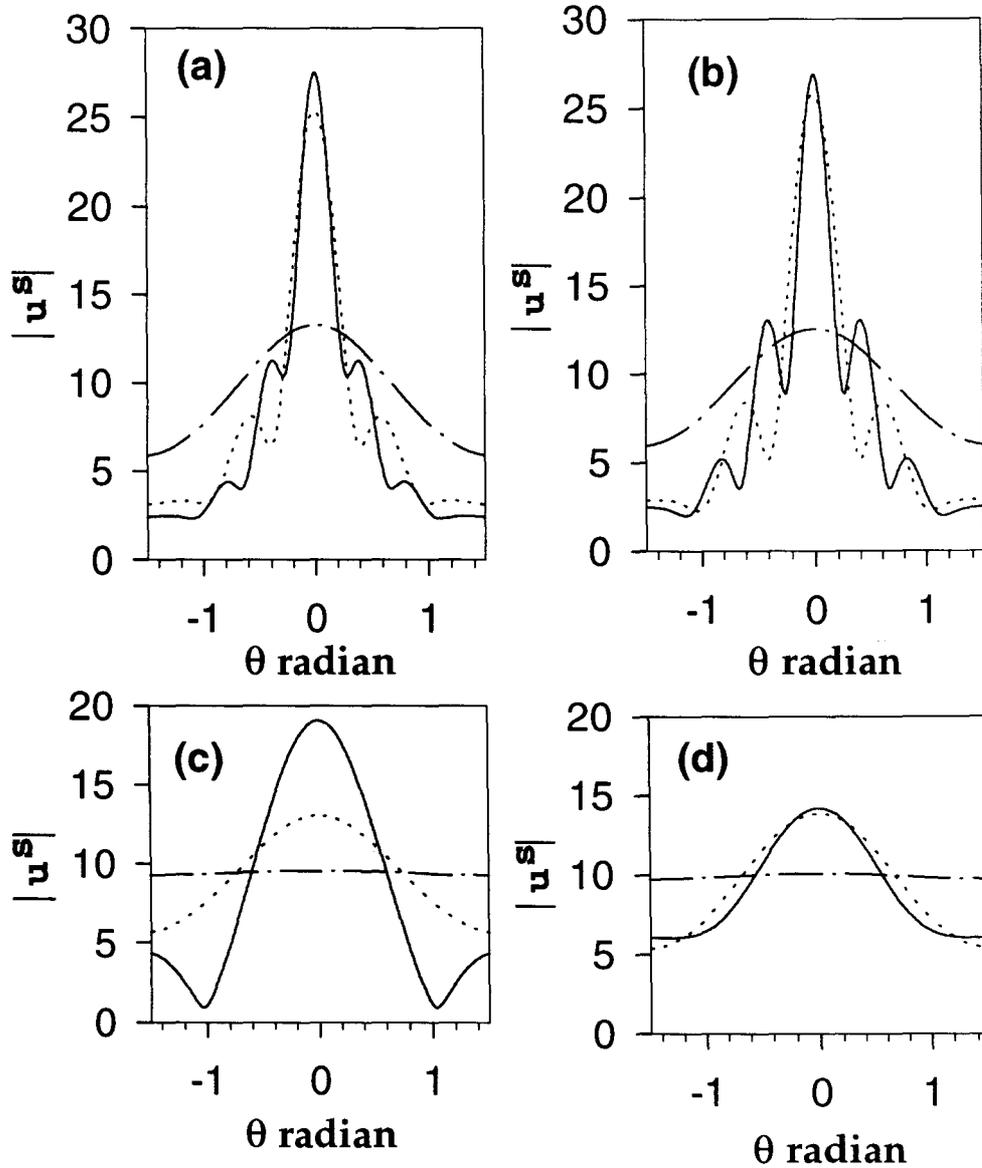


Figure II-4 : La distribution angulaire de l'amplitude du champ de diffusion prise à une distance $r = 4R$ de l'origine, et pour plusieurs fréquences : $\Omega = 1$ (traits discontinus), $\Omega = 4$ (pointillés), $\Omega = 5.5$ (traits continus). Les différents paramètres élastiques sont : (a) $\alpha=4$, $\beta=1$; (b) $\alpha=1$, $\beta=1/4$; (c) $\alpha=1/4$, $\beta=1$; (d) $\alpha=1$, $\beta=1/4$ où $\alpha=C_{44}^{(a)}/C_{44}^{(b)}$ et $\beta = \rho^{(a)} / \rho^{(b)}$.

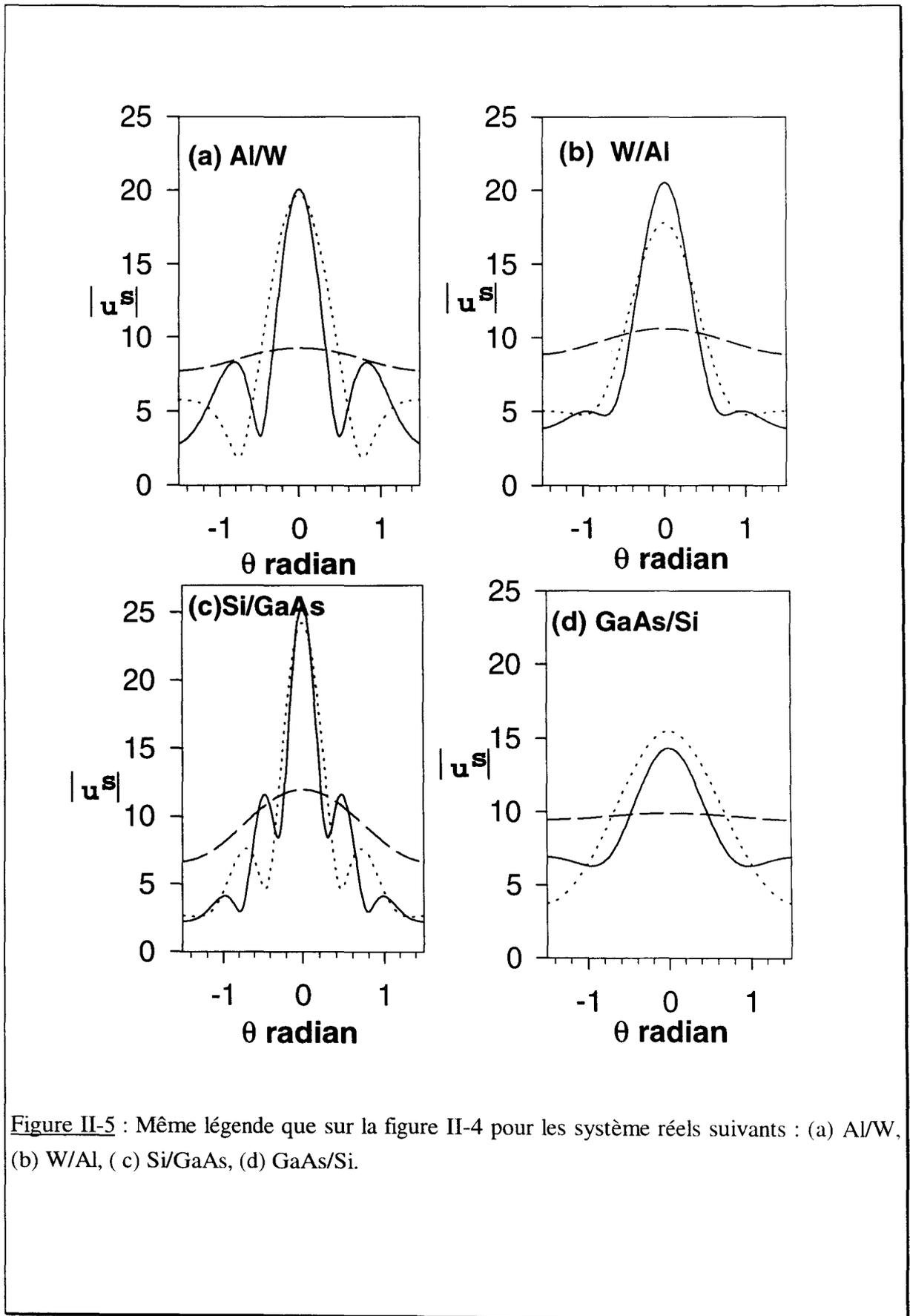


Figure II-5 : Même légende que sur la figure II-4 pour les système réels suivants : (a) Al/W, (b) W/Al, (c) Si/GaAs, (d) GaAs/Si.

Les paramètres élastiques de ces matériaux, sont répertoriés dans le tableau I.

	C_t (m/s)	ρ (kg/m ³)
W	2860	19300
Al	3110	2700
GaAs	3342	5316.9
Si	5845	2330

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

Les comportements observés sur les figures (II-5a) et (II-5c) voire (II-5b) (où le rapport $\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}}$ est plus grand ou proche de un) présentent une ressemblance avec ceux rencontrés dans les figures (II-4a) et (II-4b). Par ailleurs, dans le cas de GaAs/Si (figure (II-5d)) où le rapport $\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}}$ est plus faible que un) les comportements des courbes de diffusion sont qualitativement similaires à ceux des figures (II-4c) et (II-4d).

Bien que nous ayons centré notre discussion sur le comportement de l'amplitude de l'onde diffusée, il est intéressant de noter que la phase de cette onde subit également d'importantes modifications en fonction de l'angle du point d'observation θ . Ceci est illustré sur la figure II-6 pour différentes valeurs de la fréquence ω en liaison avec les amplitudes présentées sur la figure (II-4).

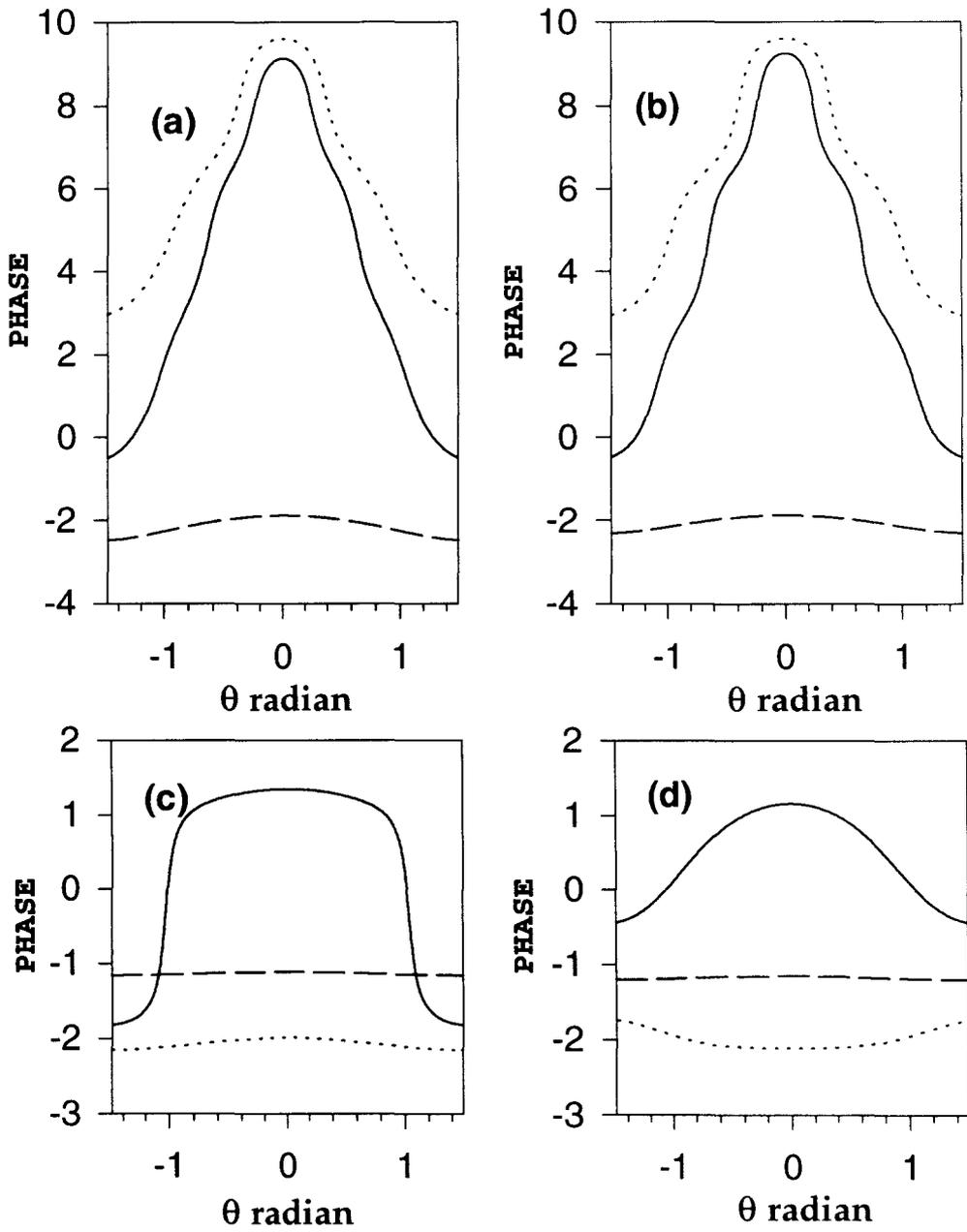


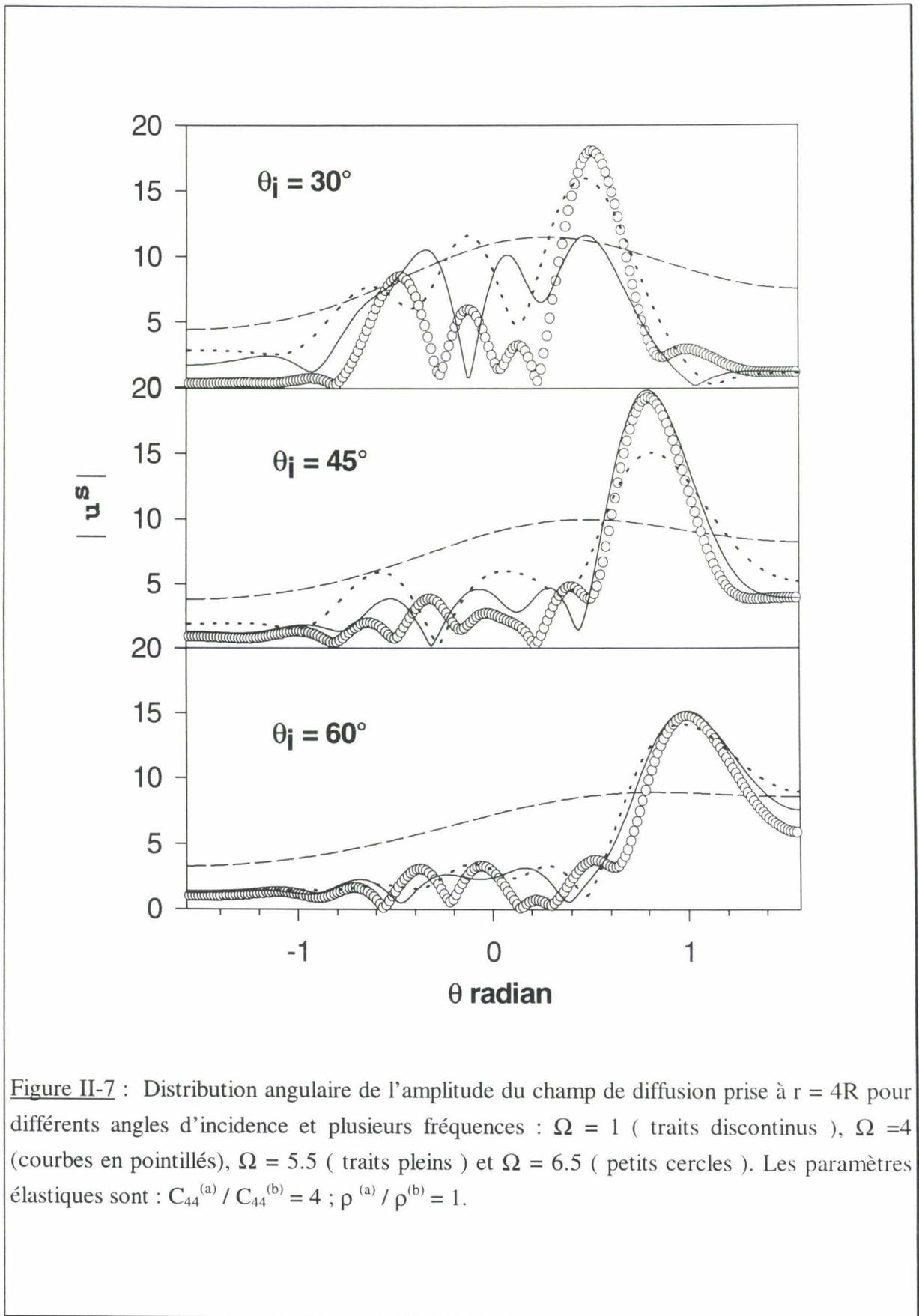
Figure II-6 : Distribution angulaire de la phase du champ de diffusion prise à la distance $r = 4R$ de l'origine. Les paramètres élastiques et les définitions des courbes sont identiques à ceux de la figure II-4.

III-2) Incidence oblique

Nous considérons maintenant l'angle d'incidence θ_i comme un nouveau paramètre en plus de ceux exposés précédemment (voir Figures (II-7), (II-8) et (II-9)). La distribution angulaire du champ diffusé, c'est-à-dire les variations $|U^{(s)}|$ en fonction de θ , montrent un large éventail de comportements aussi bien en ce qui concerne le nombre des oscillations que leurs amplitudes.

Cependant, on peut souligner que pour des fréquences relativement élevées (par exemple $\Omega \geq 4$), une allure assez systématique apparaît dans le cas où la vitesse du son dans le fil est supérieure à celle dans le substrat, et ceci plus particulièrement à des angles d'incidence moyens ou élevés. En effet, dans ce cas l'amplitude de l'onde diffusée montre un maximum important dans la direction de la réflexion spéculaire (en avant) et de petites oscillations dans la direction opposée (en arrière). Ceci est illustré sur la figure (II-7) où la raideur du fil est plus élevée que celle du substrat ($C_{44}^{(a)} \gg C_{44}^{(b)}$), ainsi que sur la figure (II-8) où la densité de masse du fil est inférieure à celle du substrat ($\rho^{(a)} \ll \rho^{(b)}$). Les oscillations dans la direction arrière (c'est-à-dire vers la direction de l'incidence) peuvent rester importantes tant que l'angle d'incidence est relativement faible voire moyen (Figures II-7a et II-8a).

Dans le cas contraire où la vitesse du son est plus faible dans le fil que dans le substrat (ce qui peut être réalisé quand $\rho^{(a)} \gg \rho^{(b)}$ ou $C_{44}^{(a)} \ll C_{44}^{(b)}$), il ne semble pas possible de mettre en évidence un comportement unique ou bien défini qui caractérise les variations d'amplitudes $|U^{(s)}|$ en fonction de l'angle d'observation θ . Des exemples de ce type de courbes sont présentés sur la figure II-9 pour un angle d'incidence $\theta_i = 45^\circ$ et pour différentes valeurs de la



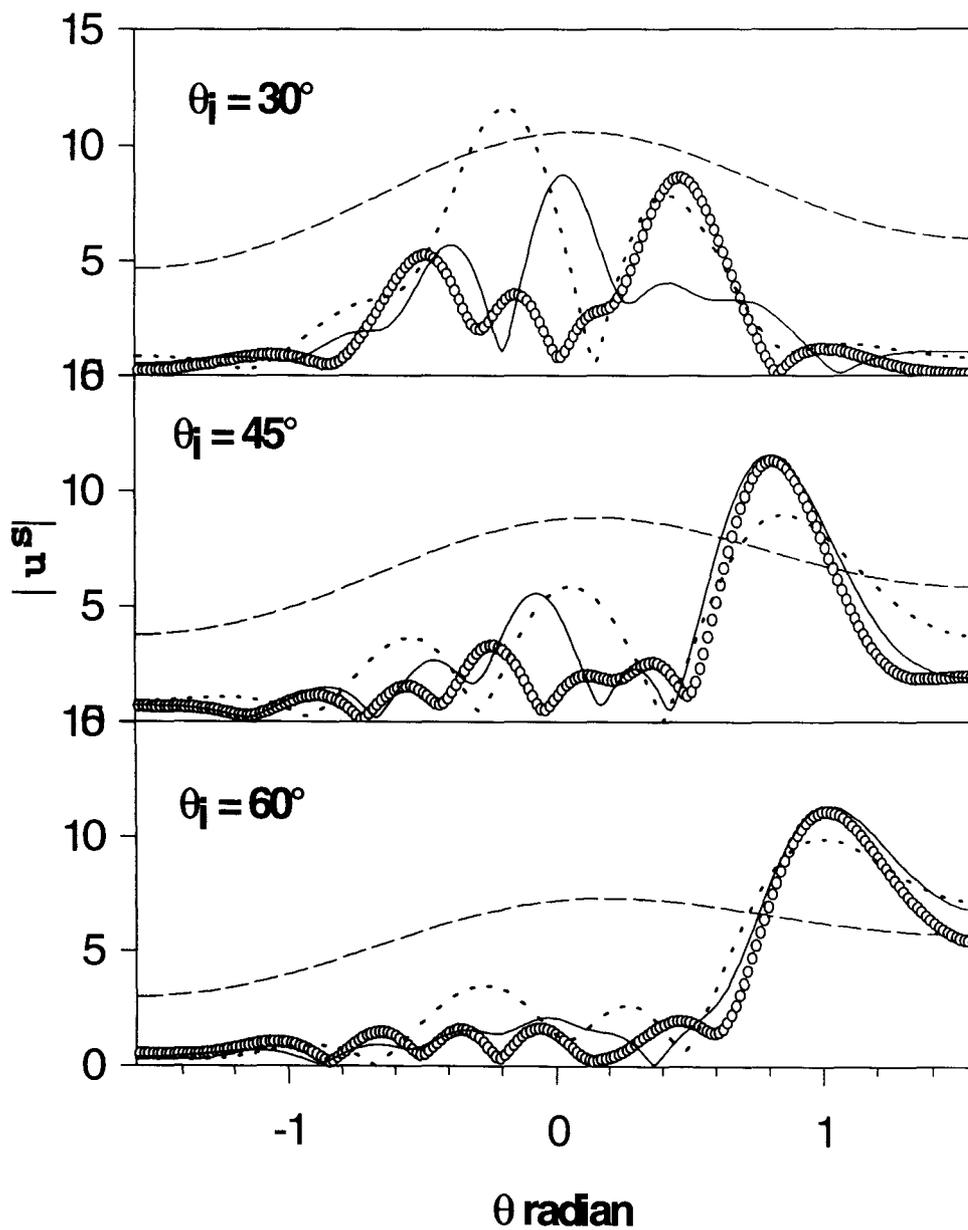


Figure II-8 : Même légende que la figure II-7 sauf qu'ici, les paramètres élastiques sont : $C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 1$; $\rho^{(a)} / \rho^{(b)} = 1/4$.

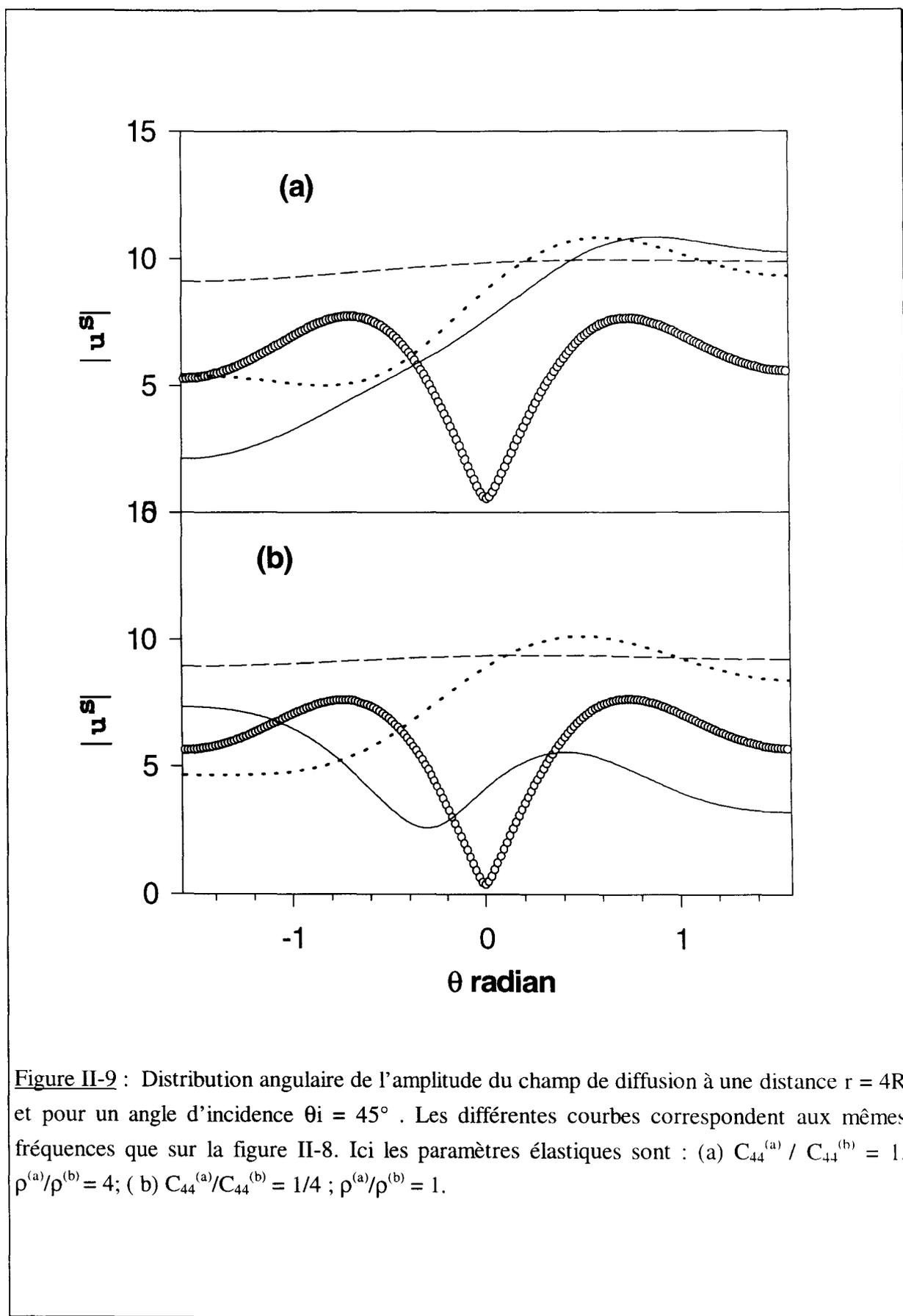


Figure II-9 : Distribution angulaire de l'amplitude du champ de diffusion à une distance $r = 4R$ et pour un angle d'incidence $\theta_i = 45^\circ$. Les différentes courbes correspondent aux mêmes fréquences que sur la figure II-8. Ici les paramètres élastiques sont : (a) $C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 1$, $\rho^{(a)} / \rho^{(b)} = 4$; (b) $C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 1/4$; $\rho^{(a)} / \rho^{(b)} = 1$.

fréquence. On peut cependant remarquer en général que le nombre des oscillations augmente lorsque la fréquence croît.

On peut donner une vision plus générale de la distribution spatiale du champ diffusé pour tout point d'observation (r, θ) (ou (x_1, x_3)) à l'aide des diagrammes de diffusion qui présentent en fait les courbes d'iso-amplitude $|U^{(s)}|$ dans le plan (x_1, x_3) . Les figures (II-10) donnent des exemples de tels diagrammes pour un angle d'incidence $\theta_i = 45^\circ$, une fréquence $\Omega = 5,5$ et différents paramètres élastiques des matériaux. On remarque encore une grande variété de diagrammes de diffusion selon les paramètres élastiques du fil et du substrat. Un comportement bien identifié que l'on pourrait souligner est celui présenté sur les figures (II-10a) et (II-10b) où la vitesse du son dans le fil est supérieure à celle dans le substrat. Dans ce cas, on observe un important lobe de diffusion vers l'avant et un lobe de diffusion plus faible vers l'arrière.

Dans le cas opposé, quand la vitesse du son dans le fil est inférieure à celle dans le substrat, on ne peut pas mettre en évidence un comportement unique. Ainsi, par exemple on observe sur la figure II-10c qu'il y a deux lobes d'intensités similaires dans les directions avant et arrière autour de $\theta = 0$, alors que sur la figure (II-10d), il y a un lobe de diffusion unique orienté plutôt vers l'avant (dans la direction de la réflexion). Par ailleurs, ces résultats subissent des modifications significatives lorsqu'on change de fréquence Ω .

Finalement, il est à noter que pour des raisons de simplicité, nous avons représenté dans les diagrammes de diffusion uniquement la partie diffusée $|U^{(s)}|$ du champ acoustique total. Si nous représentons l'amplitude du champ total incluant l'onde incidente et l'onde réfléchie par la surface plane (équation II-3), alors les contours équivalents à ceux des figures (II-10).

deviennent soit dentelés (figs. II-11a et b) soit ondulés (figs. II-11c et II-11d). En effet, en faisant la somme des champs de déplacement $U^{(i)}$, $U^{(r)}$ et $U^{(s)}$, on peut remarquer que $|U^{(s)}|$ décroît au fur et à mesure qu'on s'éloigne de l'origine et donc devient du même ordre de grandeur, puis plus petit que $|U^{(i)}|$ et $|U^{(r)}|$. Cependant, les trois composantes du champ total sont déphasées les unes par rapport aux autres et ces phases varient d'une position à une autre. Dans le cas où la vitesse du son dans le fil est inférieure à celle dans le substrat (voir figure II-10), l'intensité de l'onde diffusée est relativement faible même en champ proche. C'est donc dans ce cas que les contours sont modifiés de façon plus importante (l'ondulation) par rapport à ceux de $|U^{(s)}|$ seul.

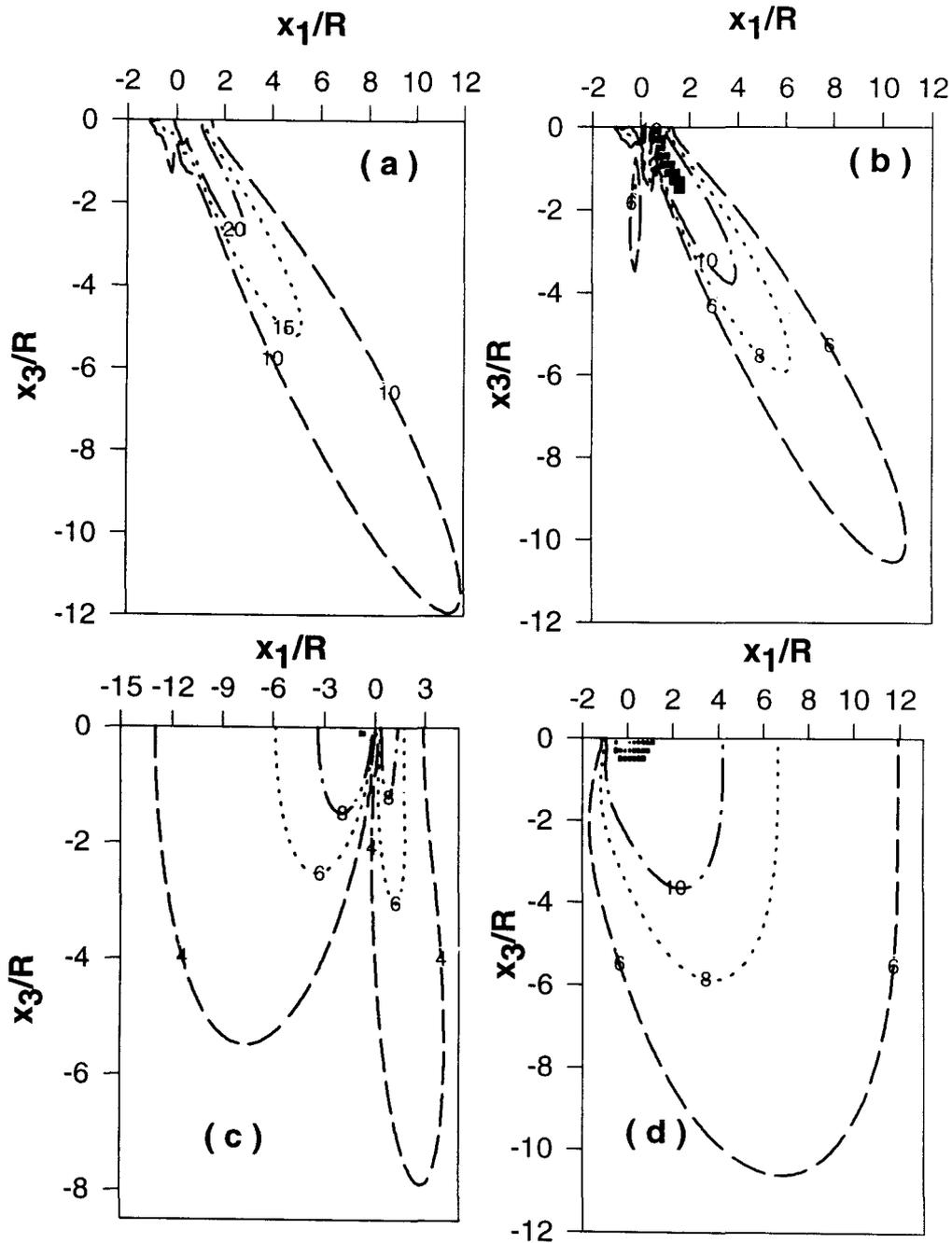


Figure II-10 : Diagramme d'iso-amplitude (contours) du champ de diffusion pour un angle d'incidence $\theta_i = 45^\circ$ et une fréquence de $\Omega = 5.5$. Les paramètres élastiques sont les mêmes que ceux de la figure II-4 (a, b, c et d). Les chiffres indiqués sur les contours correspondent à la valeur de l'amplitude du champ de diffusion $|U^{(s)}|$.

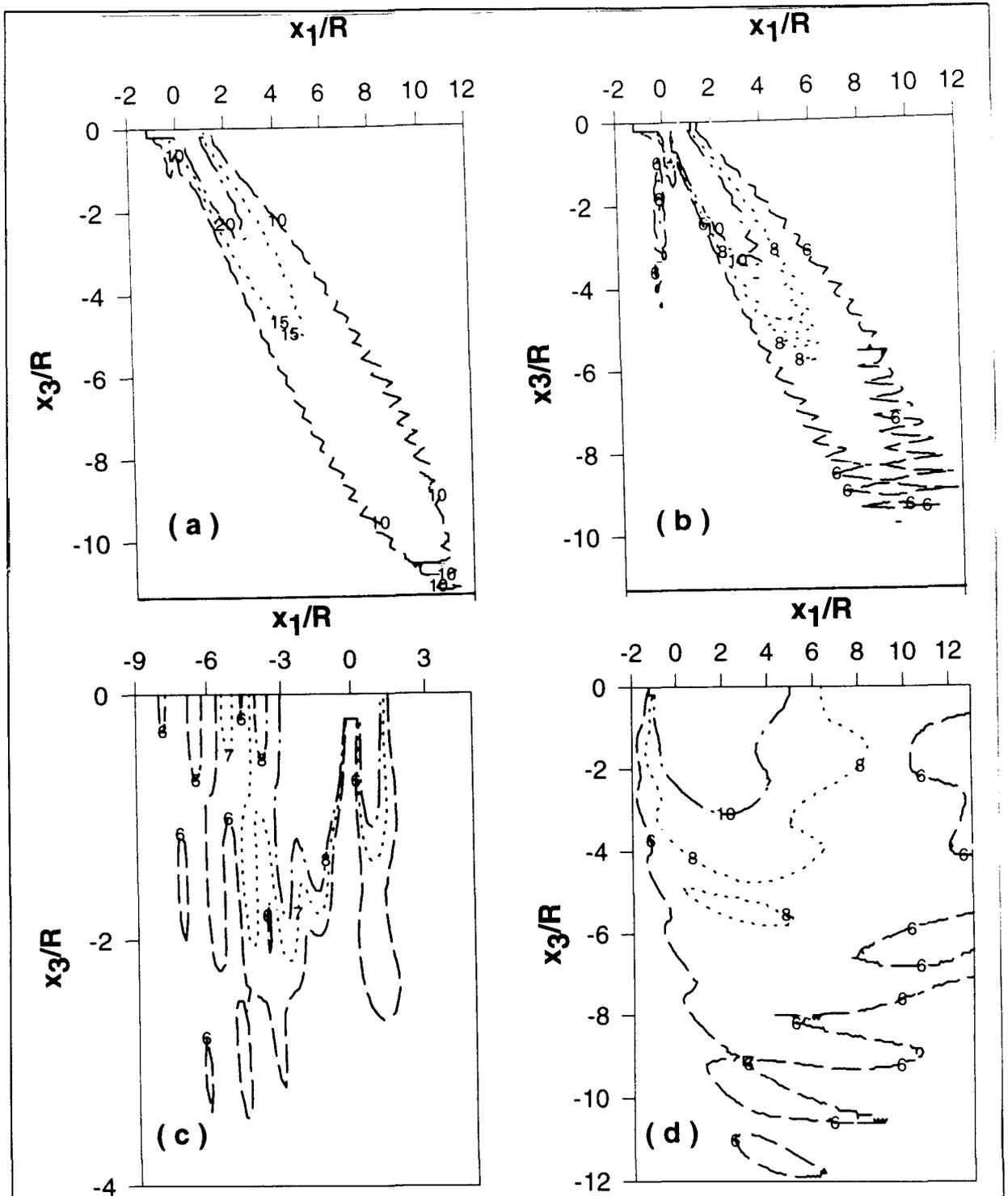


Figure II-11 : Diagramme d'iso-amplitude (contours) du champ de diffusion total $(|u| = |U^{(i)}| + |U^{(r)}| + |U^{(s)}|)$ pour un angle d'incidence $\theta_i = 45^\circ$ et une fréquence de $\Omega = 5.5$. Les paramètres élastiques sont les mêmes que ceux de la figure II-4 et la figure II-10 (a, b, c et d). Les chiffres indiqués sur les contours correspondent à la valeur de l'amplitude du champ de diffusion total $|u|$.

IV) Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'application de notre formalisme de fonction de Green pour étudier la diffusion d'une onde acoustique incidente par un fil supporté de composition et de forme arbitraire. Le comportement physique de l'onde diffusée a été étudiée pour le cas simple où la vibration est de polarisation transverse. Notons que la théorie générale est applicable en principe pour d'autres polarisations ainsi que pour d'autres types d'excitations élémentaires.

Nous avons étudié la distribution spatiale de l'onde diffusée en fonction de la fréquence et de l'angle d'incidence θ_i pour une série de paramètres élastiques des deux matériaux dans le cas où le fil est de forme parabolique.

Pour une incidence normale, ou à θ_i faible, l'amplitude de l'onde diffusée présente une série d'augmentations et de diminutions successives en fonction de la fréquence. Les fréquences où cette amplitude devient minimale correspondent aux modes propres symétriques du fil isolé. Des comportements typiques du champ diffusé peuvent être mis en évidence selon les valeurs relatives des impédances et des vitesses du son dans les deux matériaux. Lorsque l'impédance relative est supérieure à un, l'amplitude de l'onde diffusée comporte des chutes assez brutales au voisinage des fréquences de minima. Entre ces fréquences, l'amplitude prend l'allure de plateaux. Par contre, lorsque l'impédance acoustique relative est inférieure à un, la série d'augmentations et de diminutions successives de l'amplitude en fonction de la fréquence est plutôt régulière. Par ailleurs, deux allures typiques sont aussi observées en relation avec le rapport des vitesses du son dans les deux matériaux. En effet, lorsque ce rapport est supérieur à un, l'angle d'ouverture du champ diffusé autour de $\theta = 0$ se rétrécit avec les fréquences

croissantes et de nouvelles petites oscillations apparaissent comme des satellites sur les côtés du pic central. Dans le cas contraire la distribution angulaire reste large et présente parfois des oscillations dont les amplitudes restent du même ordre de grandeur.

Finalement en dehors de l'incidence normale, une grande variété de situations peut se produire. La plus importante est celle où la vitesse du son dans le fil est supérieure à celle du substrat. En effet, dans ce cas il y a un lobe de diffusion unique orienté vers l'avant (dans la direction de la réflexion) c'est-à-dire une prédominance de la diffusion en direction de la réflexion spéculaire, en particulier pour des fréquences élevées.

Bibliographie

- [1] A.A. Maradudin, T. Michel, B. Djafari Rouhani, A.R. McGurn and A.R. Baghai-Wadji, in : Continuum Models and Discrete systems, Vol I, Ed. G.A. Maugin (Longman, London, (1990) p. 227.
- [2] V.P. Plesski and N.N. Shibanova, Ultrasonics Int. 91, 115 (1991).
- [3] E. Danicki, Wave Motion 9, 445 (1987).
- [4] N.S. Clarke, C. Davies and J.C. Burdess, Wave motion 11, 371 (1989).
- [5] L. Macon, J.P. Desideri and D. Sornette, Phys. Rev. B 44, 6755 (1991), ainsi que les références contenus dans cet article.
- [6] Ch. Kunze, Phys. Rev. B 48, 14338 (1993).
- [7] E. Betzig, J.K. Trautman, T.D. Harris, J.S. Weiner and R.L. Kostelak, Science 251, 1468 (1991)
- [8] C. Girard and A. Dereux , Phys. Rev. B 49, 11344 (1994).
- [9] A.A. Maradudin, P. Ryan and A.R. McGurn, Phys. Rev. B.38, 3068 (1988).
- [10] B. Djafari Rouhani and A.A. Maradudin, Solid State Commun. 73, 173 (1990).
- [11] B. Djafari Rouhani and L. Dobrzynski, J. Phys. : Condens. Matter 5, 8177 (1993) ; B. Djafari Rouhani, L. Dobrzynski and A. Khelif, Progr. Surf. Sci. 48, 301 (1995).

- [12] A. Khater, O. Rafil, Y. Labaye and Y. Pennec, *Solid State Commun.* 87, 53 (1993) ; Y. Pennec and A. Khater, *Surface Science Letters*, 348, L82 (1996).
- [13] J.S. Nkoma, *Solid State Commun*, 78, 525 (1991).
- [14] A.A. Maradudin, E.W. Montroll, G.H. Weiss, and I.P. Iptova, *Solid State Physics*, Suppl. 3, edited by F. Seitz and D. Turnbull (Academic, 1971) ;
M. G. Cottam and A.A. Maradudin, in *Surface Excitations*, edited by V.M. Agranovich and R. London (Elsenier, 1984), p.1.
- [15] A. Khelif, B. Djafari Rouhani and L. Dobrzynski, *Surface Science* 352-354, 1038 (1996).
- [16] A. Khelif, B. Djafari Rouhani, *J. Appl. Phys.*, 81, 7141-7147 (1997)
- [17] L. Dobrzynski, *Surface Science Reports* 6, 119 (1986) and 11, 139 (1990)
Surface Science 180, 489 (1987).
- [18] P.M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, Vol I, Mc Graw Hill, New York (1953).
- [19] J.E. Inglesfield, *J.Phys. C : Solid State Phys.* 4, L4 (1971)
- [20] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, PP 358.

CHAPITRE III

**Résonances acoustiques associées à une assemblée
périodique de fils supportés**

Résonances acoustiques associées à une assemblée périodique de fils supportés

I) Introduction

Durant les deux dernières décennies, plusieurs travaux théoriques et expérimentaux ont été consacrés à l'étude de la propagation des ondes acoustiques de surface dans les milieux semi-infinis limités par une surface présentant une structure périodique ou quasi-périodique de défauts. En particulier, les systèmes suivants ont été étudiés : un milieu élastique semi-infini limité par une surface ondulée périodiquement [1-15], deux milieux semi-infinis séparés par une interface ondulée périodiquement [16-18] et des fils de forme rectangulaire déposés périodiquement sur un substrat [19-21].

Dans le cas des modes de polarisation transverse [13-15] qui nous concernent dans ce travail, ces études consistent en général à prédire les courbes de dispersion et montrer l'existence d'une branche de mode localisé qui se trouve en dessous de la limite de la bande de volume. Ce mode reflète la présence d'une onde acoustique, de polarisation transverse, qui se propage près de la surface. Il est à noter que pour un milieu élastique semi-infini avec une surface parfaitement plane (non-perturbée), il n'existe pas d'onde de surface de polarisation transverse [22]. En effet, dans ce cas il est impossible de satisfaire pour une onde de surface simultanément l'équation de mouvement en volume et la condition aux limites à la surface.

L'existence d'onde de surface de polarisation transverse dans les structures périodiques est donc la conséquence de la perturbation introduite par les défauts de surface. Une interprétation qualitative de l'existence de cette onde peut être faite par analogie avec celle de l'onde de Love pour une couche adsorbée sur un substrat, lorsque la vitesse transverse du son dans l'adsorbat est inférieure à celle dans le substrat. En effet, la partie rugueuse au voisinage de la surface peut être assimilée à un milieu effectif et comme une partie de ce milieu est constituée par le vide, on peut s'attendre à avoir une vitesse du son plus faible dans la "couche adsorbée effective" que dans le substrat.

Dans le présent chapitre, nous nous intéressons à l'étude théorique des ondes acoustiques de polarisation transverse (densité d'états, modes localisés, modes résonnants) lorsqu'une assemblée périodique de fils est déposée sur un substrat. Notre approche de calcul, basée sur le formalisme de la fonction de Green, a l'avantage de faciliter l'accès à des quantités physiques telles que les densités d'états locales et totales qui permettent à leur tour d'obtenir les modes résonnants et localisés associés à ces nanostructures périodiques. En suivant le schéma des chapitres précédents, nous exposons une méthode numérique qui permet de calculer la fonction de Green du système périodique, puis nous l'appliquerons à des fils de section parabolique adsorbés périodiquement sur le substrat.

Rappelons que les modes de polarisation transverse font intervenir une seule direction de vibration, ce qui permet la connaissance analytique dans l'espace direct (plan x_1, x_3) des fonctions de Green associées à un milieu infini et à un milieu semi-infini avec une surface plane. Dans le cas présent, nous devons travailler dans un espace mixte (espace direct - espace réciproque) en introduisant un vecteur d'onde \vec{k} , parallèle à l'axe \vec{x}_1 , qui reflète la périodicité du système. Les densités d'états seront alors déduites comme des fonctions de la fréquence et

du vecteur d'onde \vec{k} ; les modes localisés et résonnants associés à ces nanostructures seront déterminés pour chaque valeur de \vec{k} à partir des pics des densités d'états soit à l'intérieur de la bande de volume (modes résonnants), soit dans la zone non-radiative (modes localisés). En particulier, nous examinerons les comportements de ces modes en fonction des paramètres élastiques des deux matériaux, la forme des fils et la périodicité du système.

La suite de ce chapitre est structurée de la façon suivante : dans une première partie (paragraphe II), nous présentons la méthode de calcul de la fonction de Green associée au système de fils déposés périodiquement sur le substrat. Dans une deuxième partie (paragraphe III), nous exposons quelques résultats numériques obtenus pour les densités d'états, puis nous présentons les courbes de dispersion des modes localisés et résonnants que nous discuterons en fonction de la nature des matériaux constituant et de la périodicité du système.

II) Formulation théorique

II-1) Géométrie du problème

Le substrat est un milieu élastique isotrope semi-infini limité par une surface plane, caractérisé par une densité de masse $\rho^{(b)}$ et une vitesse transverse du son $C_t^{(b)}$. Sur la surface plane ($x_3 = 0$) de ce substrat, on dépose périodiquement une succession de fils parallèles à l'axe \bar{x}_2 . Chaque fil est issu d'un milieu élastique caractérisé par une densité de masse $\rho^{(a)}$, une vitesse transverse du son $C_t^{(a)}$ et une section dans le plan (x_1, x_3) décrite par la fonction $x_3 = \xi(x_1)$. La périodicité du système selon x_1 est notée P . (voir Figure III-1).

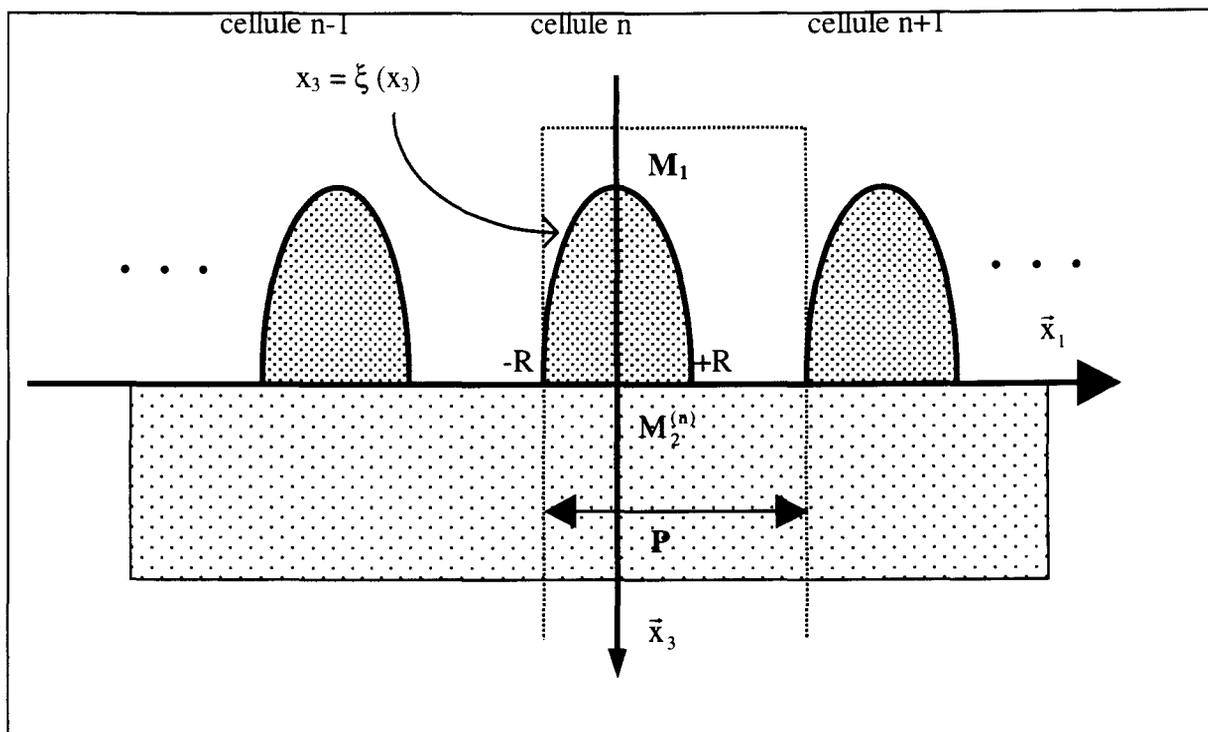


Figure III-1 : Géométrie d'un ensemble de fils déposés de façon périodique sur un substrat avec une période P . Sur cette figure M_2 et M_1 représentent respectivement l'espace d'interface entre les deux matériaux et l'espace de la surface libre des fils.

II-2) Fonction de Green du système périodique \leftrightarrow \underline{g}_d

Comme nous l'avons mentionné dans l'introduction de ce chapitre, dans cette étude l'intérêt est porté sur les ondes de polarisation transverse où le champ des déplacements comporte une composante unique parallèle à l'axe \bar{x}_2 . Cette composante doit satisfaire dans chaque milieu l'équation de mouvement suivante :

$$C_{44} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \frac{\omega^2}{C_t^2} \right) U_2(x_1, x_3 | \omega) = 0 \quad (\text{III.1})$$

et les conditions aux limites adéquates; C_{44} est la constante élastique au point (x_1, x_3) et C_t est la vitesse transverse du son en ce point.

A- Définition de l'espace direct des interfaces et de l'espace mixte

Il est à noter que dans l'espace direct (x_1, x_3) , les points de l'espace des interfaces M_2 peuvent être définis par :

$$\left. \begin{array}{l} x_1 = X_1 + nP \\ x_3 = 0 \end{array} \right\} -R < X_1 < +R \text{ et } n = -\infty \text{ à } +\infty \quad (\text{III.2})$$

\bar{X}_1 représente donc un vecteur unidimensionnel qui appartient à l'espace d'interface M_2 d'une cellule élémentaire $\{-R \leq X_1 \leq R\}$; n est un nombre entier variant de $-\infty$ à $+\infty$ qui définit le numéro de la cellule. Dans la suite, nous désignons par $M_2^{(n)}$ la partie de l'espace M_2 contenue dans la cellule n .

Plutôt que d'utiliser cet espace direct des interfaces, il est plus intéressant de mettre à profit la symétrie de translation parallèle à l'axe \bar{x}_1 et de travailler dans un espace mixte (espace direct-espace réciproque) en introduisant un vecteur d'onde \vec{k} , parallèle à l'axe \bar{x}_1 . Ce vecteur d'onde \vec{k} sera limité à la première zone de Brillouin $-\pi/P < k < +\pi/P$. Les éléments de matrice de tous les opérateurs seront alors exprimés dans une base mixte $(X_1, k ; x_3=0)$ où X_1 est limité à une cellule élémentaire.

Dans cet espace mixte, nous désignerons les éléments de matrice d'un opérateur quelconque \bar{A} (par exemple $\bar{g}_b, \bar{g}_a, \bar{g}_d^{-1}$ etc...) sous la forme $A(X_1, x_3 = 0 ; X'_1, x'_3 = 0 | k, \omega)$. Ces éléments de matrice et ceux dans l'espace direct c'est-à-dire $A(x_1, x_3 = 0 ; x'_1, x'_3 = 0 | \omega)$ (où $x_1 = X_1 + nP$ et $x'_1 = X'_1 + n'P$), sont reliés à l'aide d'une transformation de Fourier comme suit :

$$A(X_1, x_3 = 0 ; X'_1, x'_3 = 0 | k, \omega) = \sum_{n''=(n'-n)} A(x_1, x_3 = 0 ; x'_1, x'_3 = 0 | \omega) \exp(ik(n''P)) \quad (\text{III-3})$$

B- Calcul de la fonction de Green $\overset{\leftrightarrow}{g}_d$ dans l'espace mixte

Après avoir défini ces deux espaces et les conditions de passage de l'un à l'autre, revenons au calcul des éléments de la fonction de Green $\overset{\leftrightarrow}{g}_d(DD)$, dans l'espace complet (D) du système périodique (Voir équation (I-27) du chapitre I). Ce calcul nécessite d'abord la connaissance des éléments de $\overset{\leftrightarrow}{g}_d$ dans l'espace restreint des interfaces M_2 , soit $\tilde{g}_d(M_2, M_2)$. Dans la pratique, la fonction de Green $\tilde{g}_d(M_2, M_2)$ dans l'espace des interfaces est obtenue en calculant d'abord son inverse \tilde{g}_d^{-1} . Ce dernier peut être construit tout simplement à partir d'une juxtaposition de l'inverse de la matrice de la fonction de Green de chaque fil isolé $\tilde{g}_a^{-1}(M_2, M_2)$ et celle du substrat $\tilde{g}_b^{-1}(M_2, M_2)$ (voir éq. (I-24) du chapitre I), soit :

$$\tilde{g}_d^{-1}(M_2, M_2) = \tilde{g}_b^{-1}(M_2, M_2) + \sum_n \tilde{g}_a^{-1}(M_2^{(n)}, M_2^{(n)}) \quad (\text{III-4})$$

Or dans l'espace des interfaces, la fonction de Green des fils isolés $\tilde{g}_a(M_2, M_2)$ n'a que des éléments de matrice à l'intérieur d'une même cellule, alors que celle du substrat $\tilde{g}_b(M_2, M_2)$ a des éléments de matrice entre les cellules différentes. Afin de mieux comprendre ces éléments, nous illustrons schématiquement les formes matricielles de ces opérateurs dans l'espace des interfaces M_2 :

$$\tilde{\mathbf{g}}_b (\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_2) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_2^{(n-1)} & & \\ & \mathbf{M}_2^{(n)} & \\ & & \mathbf{M}_2^{(n+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_2^{(n-1)} & & \\ & \mathbf{M}_2^{(n)} & \\ & & \mathbf{M}_2^{(n+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_2^{(n-1)} & & \\ & \mathbf{M}_2^{(n)} & \\ & & \mathbf{M}_2^{(n+1)} \end{pmatrix} \quad (\text{III-5a})$$

$$\tilde{\mathbf{g}}_a (\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_2) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_2^{(n-1)} & & \\ & \mathbf{M}_2^{(n)} & \\ & & \mathbf{M}_2^{(n+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_2^{(n-1)} & & \\ & 0 & 0 \\ & & \mathbf{M}_2^{(n)} & \\ & & & 0 \\ & & & & \mathbf{M}_2^{(n+1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_2^{(n-1)} & & \\ & \mathbf{M}_2^{(n)} & \\ & & \mathbf{M}_2^{(n+1)} \end{pmatrix} \quad (\text{III-5b})$$



Au lieu d'appliquer l'équation (III-4) dans l'espace direct des interfaces (ce qui conduit à une difficulté numérique en raison de la taille infinie des matrices), nous travaillons dans l'espace mixte mentionné ci-dessus. En fait, dans la pratique l'opération de transformée de Fourier (éq. (III-3)) n'est faite que pour $\tilde{\mathbf{g}}_b$, puisque la matrice de la fonction de Green du fil isolé $\tilde{\mathbf{g}}_a$ (voir éq. (III-5b)) n'a que des éléments à l'intérieur de la même cellule; ainsi sa transformée de Fourier reste identique à elle-même. Après la transformation, nous inversons

les deux opérateurs écrits dans l'espace mixte et nous réécrivons l'équation (III-4) dans cet espace, comme suit :

$$\begin{aligned} g_d^{-1}(X_1, x_3 = 0 ; X'_1, x'_3 = 0 | k \omega) &= g_a^{-1}(X_1, x_3 = 0 ; X'_1, x'_3 = 0) + \\ & \bar{g}_b^{-1}(X_1, x_3 = 0 ; X'_1, x'_3 = 0 | k \omega) \end{aligned} \quad (\text{III-6})$$

où l'on rappelle que \bar{g}_a n'a pas d'élément de matrice entre deux cellules différentes. Il nous reste donc à évaluer le second membre de l'équation précédente. Pour ce faire, on applique à \bar{g}_b la transformée de Fourier définie par l'équation (III-3), puis on inverse le résultat et on l'injecte dans l'équation (III-6). Ceci est l'objet du paragraphe suivant.

C- Calcul de la fonction de Green du substrat \bar{g}_b dans l'espace mixte

Rappelons d'abord (éq. (I.49)) que dans l'espace direct \bar{g}_b s'écrit :

$$g_b(x_1, x_3 = 0 ; x'_1, x'_3 = 0) = -\frac{i}{2C_{44}^{(b)}} H_0^{(1)} \left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} |x_1 - x'_1| \right) \quad (\text{III.5})$$

où $H_0^{(1)}$ est la fonction de Hankel de première espèce.

A l'aide de la transformée de Fourier (voir éq. (III-3)) les éléments de \bar{g}_b dans l'espace mixte s'écrivent :

$$g_b(X_1, x_3 = 0 ; X'_1, x'_3 = 0 | k \omega) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{-i}{2C_{44}^{(b)}} H_0^{(1)} \left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} |X_1 - X'_1 + nP| \right) \exp(ik(nP)) \quad (\text{III.8})$$

D'une part, on note que l'espace d'interface M_2 d'une cellule élémentaire est discrétisée d'une façon équivalente à celle présentée dans le chapitre (I) et ce dans le but de résoudre

numériquement ces équations. D'autre part, pour évaluer la série qui apparaît dans cette équation, on procède en deux étapes : en premier lieu, on calcule numériquement la somme sur un certain nombre limité de cellules allant de $-n_0$ à n_0 , et en second lieu, on utilise la forme asymptotique de la fonction de Hankel pour évaluer les autres termes de la série. En effet la convergence de l'équation (III-8) nécessite le calcul d'un très grand nombre de termes pour chaque valeur de k et chaque valeur de ω . Nous allons voir que l'utilisation de la forme asymptotique de la fonction de Hankel permet de faire une partie du calcul une seule fois. L'équation (III-7) devient alors :

$$g_b(X_1, x_3 = 0; X'_1, x'_3 = 0 | k, \omega) = \frac{-i}{2C_{44}} \left\{ \sum_{n=-n_0}^{n_0} H_0^{(1)} \left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} |X_1 - X'_1 + nP| \right) (\exp(iknP)) + \sum_{n=-\infty}^{-n_0+1} H_0^{(1)} \left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} |X_1 - X'_1 + nP| \right) (\exp(iknP)) + \sum_{n=n_0+1}^{+\infty} H_0^{(1)} \left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} |X_1 - X'_1 + nP| \right) \exp(iknP) \right\} \quad (\text{III.9})$$

Formellement cette équation peut s'écrire :

$$g_b(X_1, x_3 = 0; X'_1, x'_3 = 0 | k, \omega) = \frac{-i}{2C_{44}^{(b)}} \{S_1 + S_2\} \quad (\text{III.10})$$

où S_1 correspond à la somme finie allant de $-n_0$ à n_0 tandis que S_2 contient les résultats des deux séries infinies allant de $-\infty$ à $-(n_0+1)$ et de n_0+1 à $+\infty$.

Or, pour un argument z très grand la fonction de Hankel peut s'écrire sous la forme asymptotique suivante :

$$H_0^{(1)}(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\cong} \sqrt{\frac{2\pi}{z}} [f(z) + iQ(z)] e^{i(z-\pi/4)} \quad (\text{III.11})$$

Les expressions de $f(z)$ et $Q(z)$ sont données dans l'appendice B.

En introduisant cette approximation dans l'expression de S_2 , on peut donc écrire cette somme sous la forme suivante :

$$S_2 = e^{i(X-\pi/4)} \left\{ A_1 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right) + A_2 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^2 + A_3 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^3 + A_4 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^4 + \dots \right\} + e^{-i(X+\pi/4)} \left\{ B_1 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right) + B_2 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^2 + B_3 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^3 + B_4 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^4 + \dots \right\} \quad (\text{III.12})$$

où $X = \omega (X_1 - X'_1) / C_t^{(b)}$

La démonstration de cette formule ainsi que les expressions des coefficients $A_1, A_2 \dots$ et $B_1, B_2 \dots$ sont données dans l'appendice B. L'intérêt du calcul ci-dessus et de l'équation (III-12) est que les facteurs $A_1, A_2 \dots$ et $B_1, B_2 \dots$ sont constitués par des séries convergentes en fonction du numéro de cellule n . Ceci permet de les calculer pour chaque valeur de k et de ω d'une manière aisée.

Rappelons enfin que la connaissance des éléments de \tilde{g}_d dans l'espace des interfaces nous permet de déduire ses éléments dans l'espace entier D en utilisant l'équation (I.27) du Chapitre (I).

III) Application et discussion des résultats

Dans ce qui suit, des résultats seront présentés pour des fils ayant une section de forme parabolique ($\xi(x_1) = -A \left[1 - \frac{x_1}{R} \right]^{1/2}$) adsorbés périodiquement sur un substrat. Tout d'abord, nous examinerons la quantité physique qui découle directement de la connaissance de la fonction de Green \tilde{g}_d , à savoir les densités d'états dans ces nanostructures périodiques. Puis

nous déduisons les courbes de dispersion des modes localisés qui apparaissent en dessous de la bande de volume, et des modes résonnants qui apparaissent à l'intérieur de la bande de volume. Enfin, nous étudions ces modes et leur comportement en fonction des paramètres élastiques des matériaux constituants, la géométrie des fils et la périodicité du système.

Notons que dans le but d'assurer la convergence des résultats dans les calculs numériques, nous avons choisi le nombre N de subdivisions de l'interface M_2 dans chaque cellule égal à 200 et le nombre de cellules n_0 dans la somme S_1 (équations (III-9) et (III.10)) égale à 15.

III-1) Les densités d'états

Rappelons la définition de la densité d'états locale à l'aide de la fonction de Green \tilde{g}_d

$$n(X_1, x_3 | \omega, \mathbf{k}) = - \lim_{\epsilon \rightarrow \infty} \frac{2\omega}{\pi} \left[\rho(X_1, x_3) \text{Im} g_d(X_1, x_3 ; X_1, x_3 | \omega + i\epsilon, \mathbf{k}) \right] \quad (\text{III.13})$$

Elle dépend de la fréquence ω , du vecteur d'onde $\vec{\mathbf{k}}$ et du point (X_1, x_3) à l'intérieur de la cellule élémentaire.

Afin d'étudier le comportement de cette densité d'états, nous présentons pour différents paramètres élastiques des matériaux, une moyenne des densités d'états locale sur l'interface fil-substrat et sur la surface libre du fil. Les résultats sont donnés pour plusieurs valeurs successives du vecteur d'onde k variant de 0 à π/P . Les paramètres physiques des deux matériaux sont indiqués par leurs rapports $\left(\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}} ; \frac{\rho^{(a)}}{\rho^{(b)}} \right)$; sur les figures ((III-2) à (III-5)), la période est prise égale à $P = 3R$, tandis que la hauteur des fils est prise égale à $A = 2R$.

On observe sur l'ensemble des figures ((III-2) à (III-5)), l'existence d'un pic très fin et très intense, pour chaque valeur de k , dans le domaine de fréquence en dessous de la bande de volume (zone non-radiative), c'est-à-dire $\omega < C_t^{(b)} k$. Les pics qui apparaissent dans la zone non-radiative sont associés aux modes localisés à la surface de ces nanostructures périodiques, leurs intensités et leurs positions varient en fonction du vecteur d'onde k et des paramètres élastiques des deux matériaux. Notons que dans tous les cas l'intensité du pic dans la densité d'états locale moyennée sur l'interface est plus faible que dans celle sur la surface. On peut attribuer ce comportement à une plus forte concentration de ces ondes au voisinage de la surface libre qu'au voisinage de l'interface. Nous constatons aussi dans certain cas (figs. (III-4) et (III-5)) l'apparition à la limite de la zone de Brillouin ($K \simeq \pi/P$) d'un second pic associé à un nouveau mode localisé. Ce comportement peut être lié au rapport des vitesses transverses du son dans les deux matériaux. En effet, ce nouveau mode apparaît quand la vitesse du son dans le fil est inférieure à celle dans le substrat ($C_t^{(a)} \ll C_t^{(b)}$), ce qui peut être réalisé, soit en prenant le substrat plus dur que les fils ($C_{44}^{(a)}/C_{44}^{(b)} \ll 1$, voir figure III-4 f) soit le substrat moins dense que les fils ($\rho^{(a)}/\rho^{(b)} \gg 1$, voir figure III-5 f).

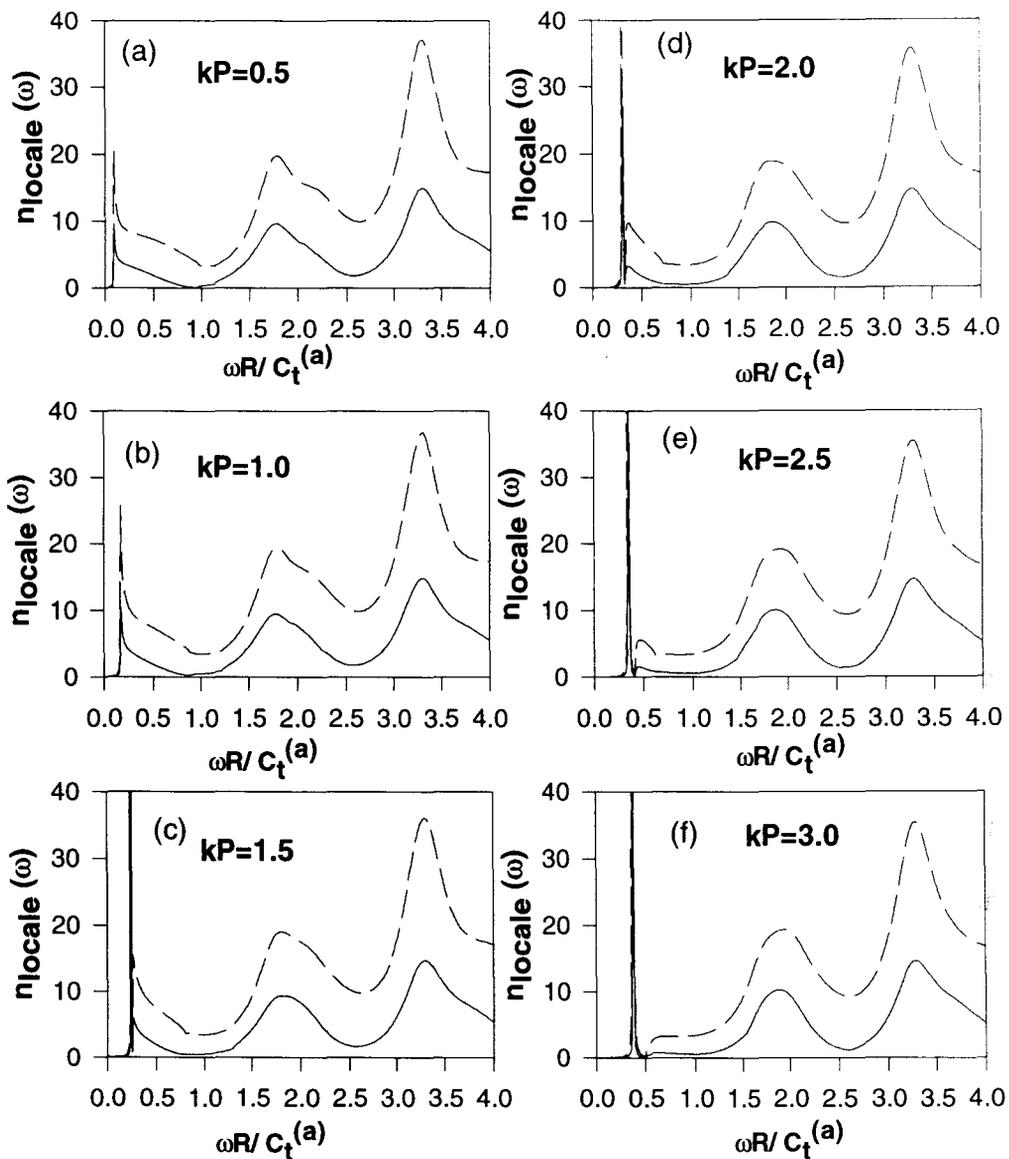


Figure III-2 : Densités d'états en surface (traits discontinus) et à l'interface (traits pleins) pour les fils adsorbés périodiquement sur un substrat. Les courbes représentent l'évolution des densités d'états n_{locale} en fonction de la fréquence réduite $\Omega = \omega P / C_t^{(a)}$, pour différentes valeurs de $kP = \{(a) kP=0.5, (b) kP=1.0, (c) kP=1.5, (d) kP=2.0, (e) kP=2.5, (f) kP=3.0\}$; k est le module du vecteur d'onde parallèle à x_1 , P la période du système. Dans ce cas P est prise égale $P=3R$. Les paramètres physiques des matériaux constituant le système sont :

$$C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 2, C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 4$$

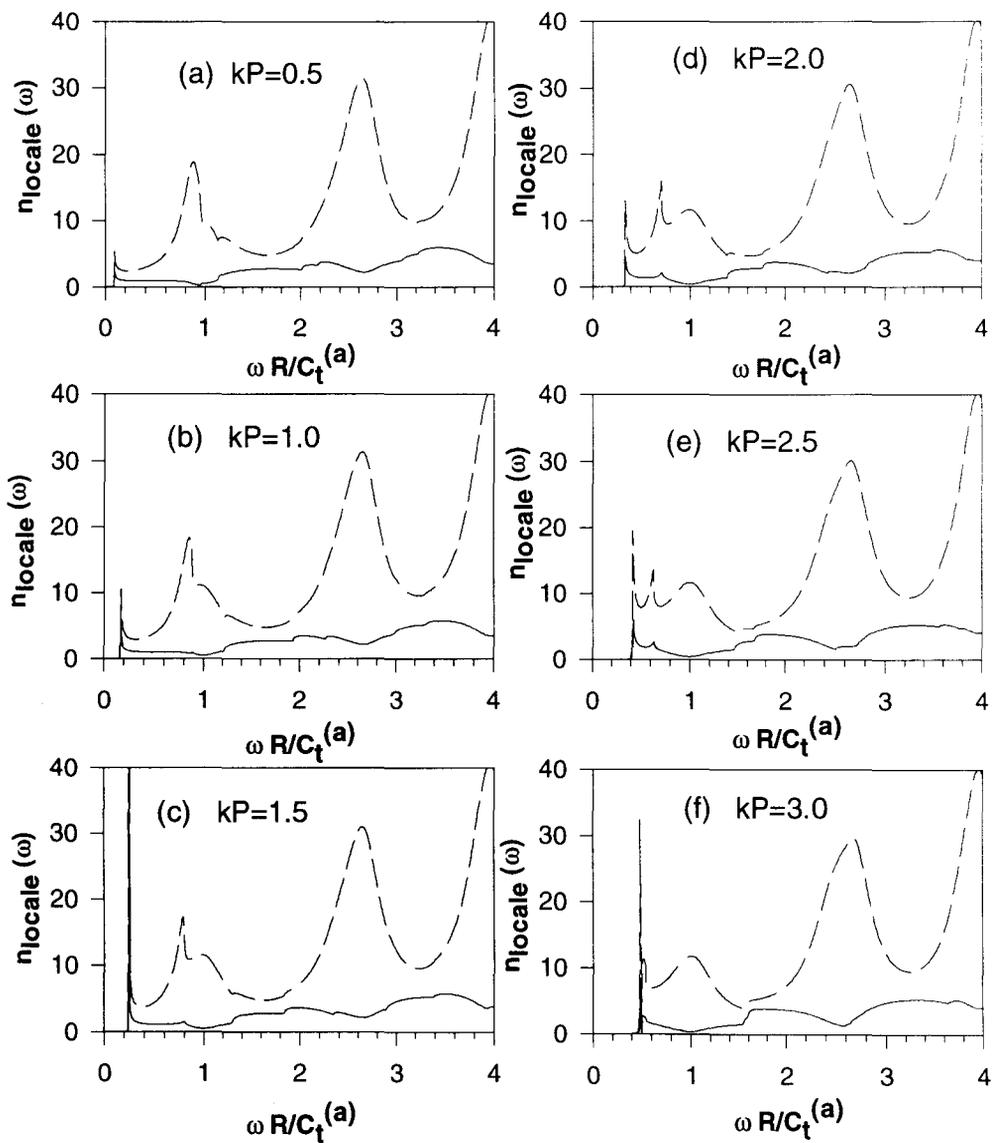


Figure III-3 Même légende que la figure III-2 avec les paramètres suivants des matériaux constituant le système

$$C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 2 \quad , \quad C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 1$$

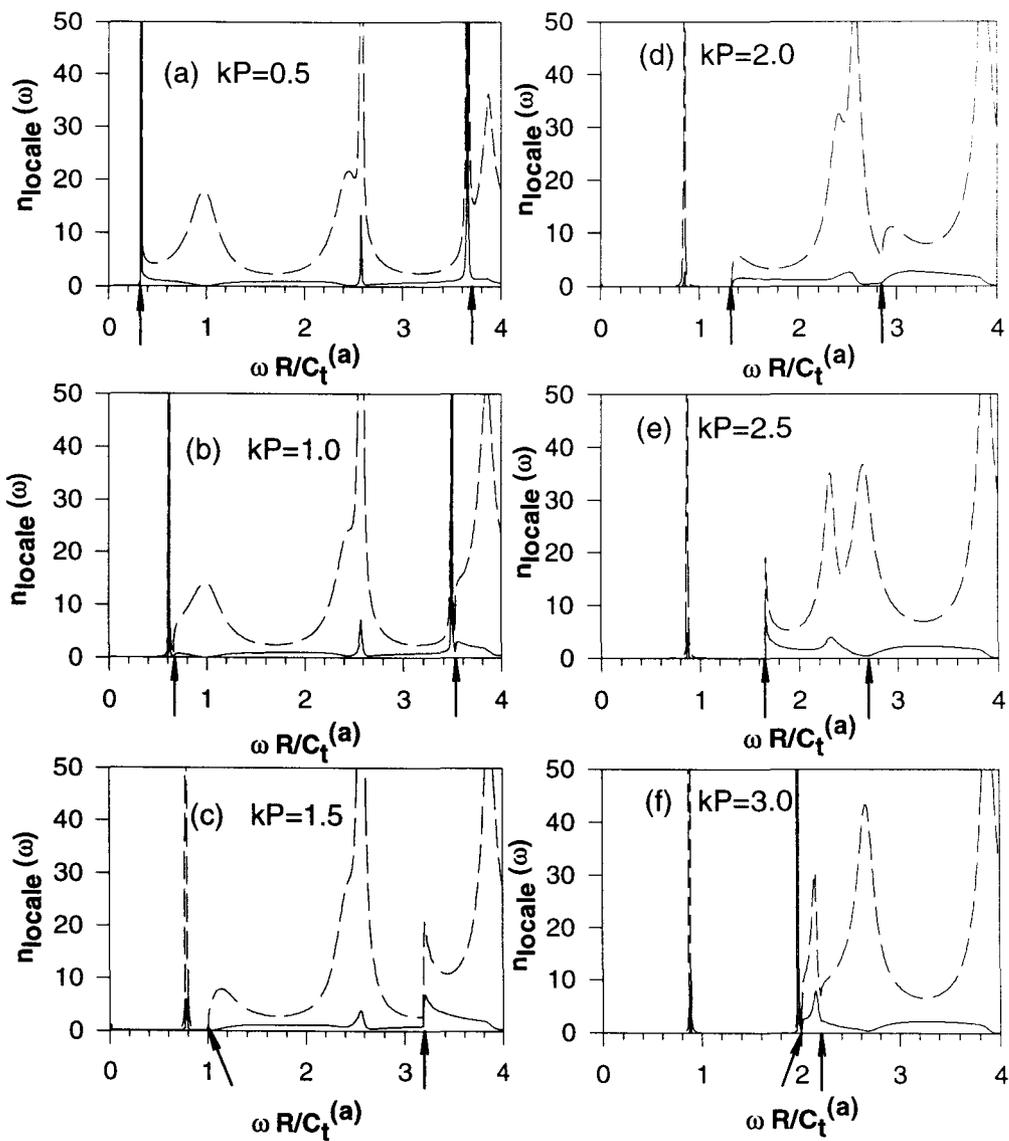


Figure III-4 Même légende que la figure III-2. Ici, les flèches pointées sur l'axe des fréquences indiquent les positions des repliements de la bande de volume dans la première zone de Brillouin. Les paramètres physiques des matériaux constituant le système sont :

$$C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 0.5 \quad , \quad C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 0.25$$

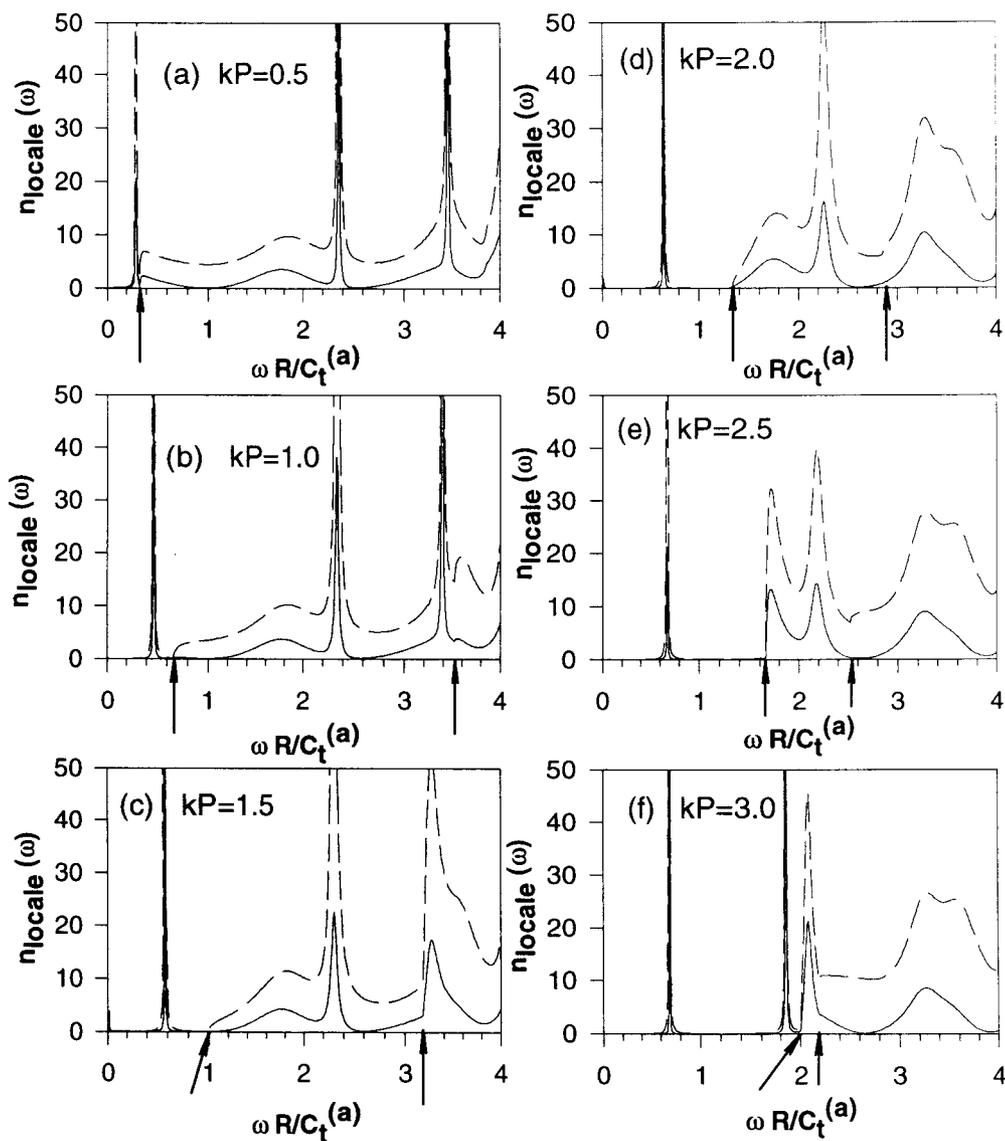


Figure III-5 Même légende que la figure III-4, sauf qu'ici les paramètres élastiques des deux matériaux sont :

$$C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 0.5, C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 1$$

Au delà des pics des modes localisés, on peut aussi observer des pics significatifs à l'intérieur de la bande de volume ($\omega > kC_t^{(b)}$) qui correspondent aux modes résonnants. Les fréquences de résonance varient relativement peu en fonction du vecteur d'onde k , excepté lorsqu'elles croisent un repliement du bas de la bande de volume dans la première zone de Brillouin. L'intensité et la largeur des pics de résonance se comportent assez différemment selon que la vitesse du son dans le fil est supérieure ou inférieure à celle dans le substrat. Dans le premier cas ($C_t^{(a)} > C_t^{(b)}$), les pics de résonance sont relativement larges et pas très bien définis; par ailleurs leur allure n'est pratiquement pas affectée lors de leur croisement avec un repliement du bas de la bande de volume. Ce cas est illustré sur les figures (III.2 et 3), où le matériau du fil est respectivement plus dur ($C_{44}^{(a)} \gg C_{44}^{(b)}$; figure (III-2)) ou moins dense ($\rho^{(a)} \ll \rho^{(b)}$; figure (III-3)) que celui du substrat.

Dans le cas opposé où la vitesse du son dans le fil est inférieure à celle dans le substrat ($C_t^{(a)} < C_t^{(b)}$), les pics de résonance sont plus fins et bien définis et leurs intensités très élevées; de plus leur allure change de manière significative lors d'un croisement avec un repliement du bas de la bande de volume (ces positions sont repérées par des flèches sur l'axe des fréquences) . On retrouve ce cas sur la figure (III-4) où le matériau du fil est mou par rapport à celui du substrat ($C_{44}^{(a)} \ll C_{44}^{(b)}$), et sur la figure (III-5) où le matériau du fil est plus dense que celui du substrat ($\rho^{(a)} \gg \rho^{(b)}$).

On peut essayer de comparer les comportements des densités d'états locales sur l'interface fil-substrat et sur la surface libre. On peut alors distinguer deux cas en relation avec l'impédance acoustique relative des deux matériaux $Z = \sqrt{\frac{C_{44}^{(a)} \rho^{(a)}}{C_{44}^{(b)} \rho^{(b)}}}$. En effet, lorsque Z est supérieure à un (figure III-2 et 5), l'allure de la moyenne des densités d'états locales sur l'interface fil-substrat est très similaire à celles sur la surface libre du fil. Au contraire, lorsque Z

est inférieur à un (voir Figs. III-3 et 4), les densités d'états locales à l'interface peuvent présenter une allure différente, voire quelquefois une correspondance entre les résonances en surface et les anti-résonances à l'interface et vice-versa. Rappelons que ce comportement a aussi été observé dans le cas d'un seul fil adsorbé sur un substrat dans le chapitre I.

Dans le contexte de dégager des comportements généraux des densités d'états, nous avons aussi représenté sur la figure (III-6) les densités d'états en surface et à l'interface après avoir sommé les contributions de toutes les valeurs de k allant de 0 à π . Dans la pratique, le calcul numérique a été effectué pour 20 valeurs de k dans la première zone de Brillouin. Ceci explique l'existence (à basse fréquence notamment) de multiples pics très rapprochés qui correspondent soit aux modes de surface soit aux croisements des résonances avec les repliements successifs du bas de la bande de volume pour les différentes valeurs de k prises en compte; autrement dit, nous n'avons pas introduit d'élargissement supplémentaire de ces pics qui les rendraient lisses.

On peut alors remarquer, d'une part, l'analogie de ces courbes avec celles correspondant au cas où un seul fil est adsorbé sur le substrat (avec les mêmes paramètres). D'autre part, on peut noter que l'intensité des pics est très importante lorsque la vitesse transverse du son dans le fil est inférieure à celle dans le substrat (voir figure III-6 c et d). Par contre les pics de densité d'états restent relativement peu intenses lorsque la vitesse du son dans les fils est supérieure à celle dans le substrat (voir figure III-6 a et b).

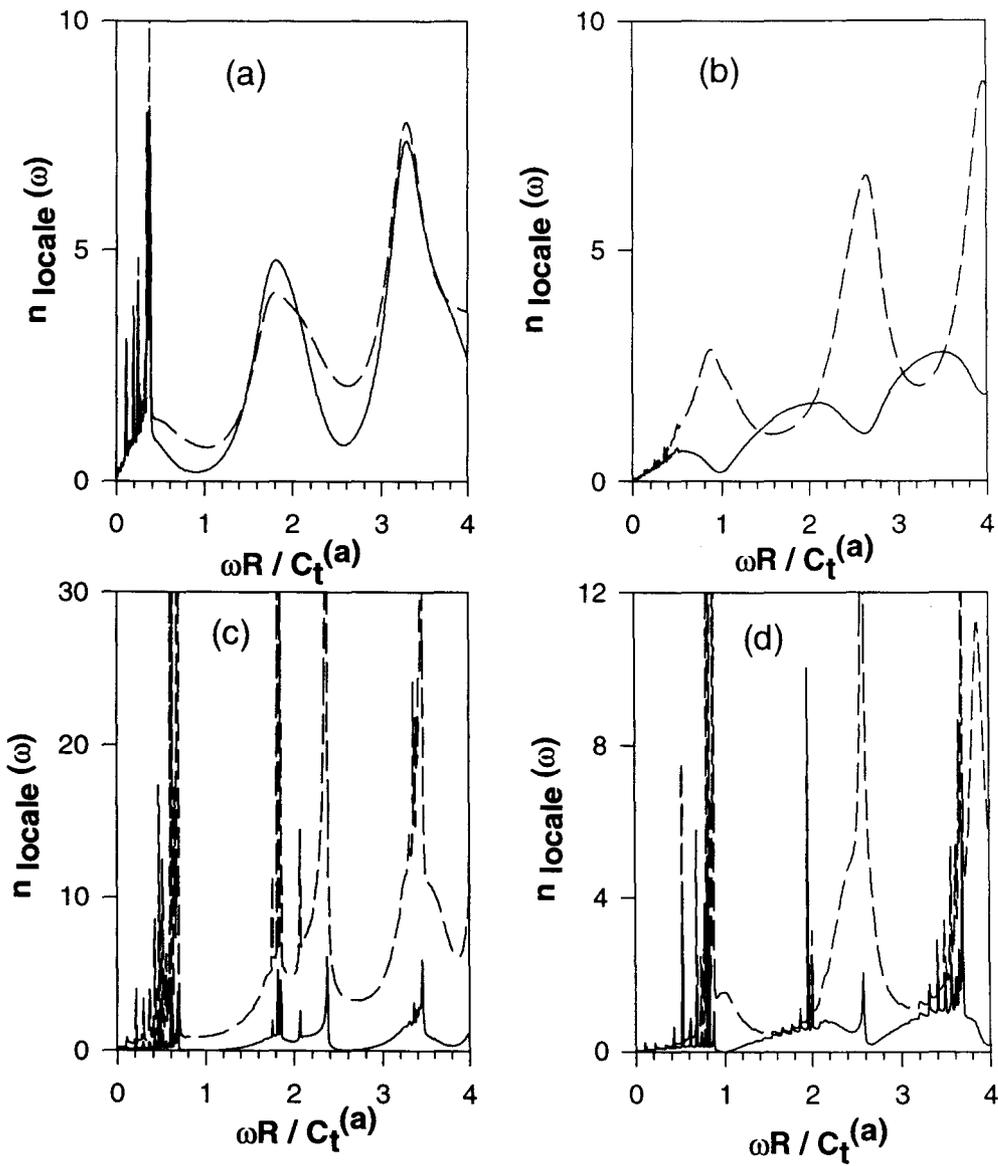


Figure III-6 : La somme des densités d'états en surface (traits discontinus) et à l'interface (traits pleins) pour les contributions de toutes les valeurs de k allant de $\{0 \text{ à } \pi/P\}$; la période du système est prise égale $P=3R$. Les paramètres physiques des matériaux constituant le système sont : (a) $C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 2$, $C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 4$; (b) $C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 2$; $C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 1$ (c) $C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 0,5$, $C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 1$; (d) $C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 0,5$; $C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 0.25$

III-2) Courbe de dispersion des modes localisés

La figure (III-7) donne les courbes de dispersion des modes de surface dans la région non-radiative du plan (ω, k) pour différentes natures et formes des fils adsorbés. Les courbes représentent la fréquence réduite $\frac{\omega P}{C_t^{(b)}}$ en fonction du vecteur d'onde réduit kP , où ω est la fréquence, k le vecteur d'onde et P la périodicité du système. La droite épaisse indique le bas de la bande de volume du substrat. Les différentes courbes en dessous de cette limite représentent les branches de modes de surface, qui résultent de la perturbation induite par les fils, pour différentes valeurs du rapport R / P .

Notons qu'à la limite des grandes longueurs d'ondes (k petit), la courbe de dispersion des modes localisés devient généralement tangente à la limite inférieure de la bande de volume ($\omega = C_t^{(b)}k$). Il en résulte, qu'aux basses fréquences les ondes transverses se propagent essentiellement dans le substrat à la vitesse $C_t^{(b)}$ car la taille des fils est très petite devant la longueur d'onde ; par contre, lorsque k augmente (la longueur d'onde diminue) la courbe de dispersion s'éloigne de la limite inférieure de la bande de volume, avec une courbure négative qui correspond à un ralentissement de ses vitesses de phase et de groupe.

A) Comportement des modes de surface en fonction des paramètres élastiques de deux matériaux

Sur cette figure (III-7), nous pouvons distinguer deux comportements typiques des modes de surface en fonction des paramètres physiques des matériaux constituants. La première situation est celle où la vitesse du son est plus élevée dans le fil que dans le substrat. Dans ce cas, la courbe de dispersion du mode de surface reste très proche de la limite

inférieure de la bande de volume. Celle-ci est illustrée sur la figure (III-7a) pour une constante élastique $C_{44}^{(a)} \gg C_{44}^{(b)}$, et sur la figure (III-7b) pour une densité de masse $\rho^{(a)} \ll \rho^{(b)}$.

La deuxième situation est celle où la vitesse du son dans le fil est faible par rapport à celle dans le substrat ($C_t^{(a)} \ll C_t^{(b)}$) ; c'est à dire quand le fil est très mou par rapport au substrat ($C_{44}^{(a)} \ll C_{44}^{(b)}$, figure (III-7d)), ou bien lorsque sa densité de masse est supérieure à celle du substrat ($\rho^{(a)} \gg \rho^{(b)}$, figure (III-7c)). Nous remarquons alors que les fréquences de mode de surface se détachent de façon importante par rapport à celles du bas de la bande de volume. Cela révèle un phénomène de localisation plus fort de ces modes en surface. Enfin on observe dans ces cas l'apparition d'une seconde branche du mode de surface au bord de la zone de Brillouin lorsque les fils sont côte à côte ($R/P = 1/2$).

On peut établir une certaine analogie entre ces comportements et ceux des ondes de Love associées à une couche adsorbée sur un substrat. Dans le cas où $\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}} > 1$ il n'y a pas de mode de Love dans la couche adsorbée; par contre il en existe dans notre problème car on peut penser qu'à cause du vide dans l'espace entre les fils il apparaît un abaissement effectif de la vitesse du son au voisinage de la surface. Ceci est sensible surtout au bord de zone de Brillouin où les longueurs d'ondes sont plus petites. Dans le cas opposé ($\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}} < 1$) il existe des modes de Love dans une couche adsorbée ; dans notre cas, les espaces vides entre les fils doivent encore renforcer cet effet ce qui conduit à un détachement plus important des fréquences du mode de surface par rapport à la bande de volume.

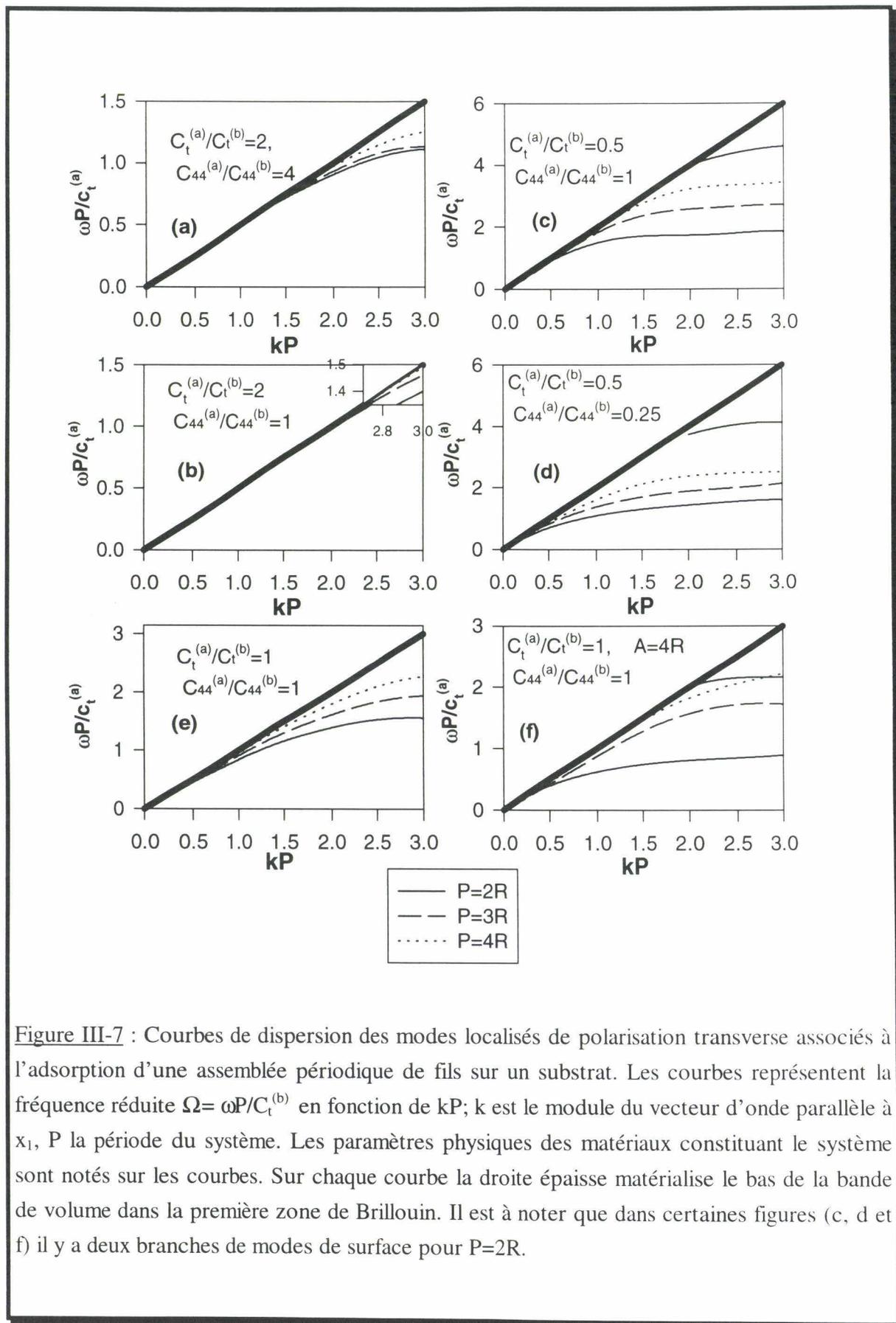


Figure III-7 : Courbes de dispersion des modes localisés de polarisation transverse associés à l'adsorption d'une assemblée périodique de fils sur un substrat. Les courbes représentent la fréquence réduite $\Omega = \omega P/c_t^{(b)}$ en fonction de kP ; k est le module du vecteur d'onde parallèle à x_1 , P la période du système. Les paramètres physiques des matériaux constituant le système sont notés sur les courbes. Sur chaque courbe la droite épaisse matérialise le bas de la bande de volume dans la première zone de Brillouin. Il est à noter que dans certaines figures (c, d et f) il y a deux branches de modes de surface pour $P=2R$.

B) Comportement des modes de surface en fonction de la taille R des fils comparée à la période P

L'autre paramètre important qui influence le comportement des modes de surface est la période P du système. Sur chacune des figures (III-7), nous avons tracé les courbes de dispersion pour plusieurs valeurs de la taille R d'un fil comparée à la période P; le paramètre R/P vaut 1/2, 1/3 et 1/4. La hauteur d'un fil est toujours fixée à $A=2R$.

Tout d'abord, on peut souligner que les courbes de dispersion des modes de surface varient de façon importante avec le rapport R/P, et même dans le cas des figures (III-7 c et d) où $C_t^{(a)} < C_t^{(b)}$ on peut même avoir deux branches de mode de surface à R/P=1/2.

De façon assez générale, on peut observer un comportement monotone de ces courbes de dispersion avec le rapport R/P, à savoir que ces courbes montent et s'approchent du bas de la bande de volume lorsque R/P diminue. On peut comprendre ce comportement monotone et progressif de la façon suivante : dans notre représentation de $\frac{\omega P}{C_t^{(b)}}$ en fonction de kP , la période P est fixée d'une figure à l'autre tandis que R, et par conséquent la taille des fils, diminue lorsque le rapport R/P décroît. Le substrat sera donc de moins en moins perturbé par des objets superficiels de taille de plus en plus petite. Notons que dans le cas où $\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}} > 1$, le mode de surface disparaît relativement rapidement lorsqu'on diminue R/P; au contraire dans le cas $\frac{C_t^{(a)}}{C_t^{(b)}} < 1$, il faut aller à des valeurs très faibles de R/P pour que le mode de surface disparaisse (par exemple R/P \cong 0.1 sur la figure III-7 c).

A côté de cette tendance assez générale, on peut observer la possibilité d'un comportement non monotone de la courbe de dispersion des modes de surface avec le rapport R/P . Ce comportement est obtenu dans le cas de la figure (III-7 a) où le fil est constitué d'un matériau plus dur que le substrat et nous l'avons illustré plus en détail sur la figure (III-8). En considérant le mode de surface en bord de la zone de Brillouin ($k = \pi/P$), sa fréquence diminue d'abord lorsque le rapport R/P diminue à partir de $1/2$ avant de croître et de se confondre finalement avec la bande de volume à $R/P \cong 0,2$. Une interprétation qualitative de ce comportement peut être donnée en faisant l'analogie avec une couche adsorbée sur un substrat. Supposons que la section des fils soit simplement rectangulaire. Lorsque le rapport $R/P=1/2$, les fils rectangulaires sont côte à côte et on trouve exactement la géométrie d'une couche adsorbée sur un substrat (voir figure (III-9)). Or, quand la vitesse transverse du son dans l'adsorbat est supérieure à celle dans le substrat, il n'y a pas de mode de surface (dans notre cas où les fils ont une section parabolique le mode de surface existe quand-même puisqu'une partie du milieu au voisinage de la surface est constituée par le vide). Diminuons maintenant le rapport R/P . Dans le cas des fils de section rectangulaire, il apparaît des espaces vides entre les fils et on peut donc s'attendre à avoir une vitesse du son plus faible dans la "couche adsorbée effective" que dans le substrat, ce qui est la condition d'existence pour l'onde de Love. Cependant en continuant à diminuer le rapport R/P , on aboutit à des fils de petite taille qui perturberont peu le substrat et ne pourront plus extraire un mode de surface à partir de la bande de volume (voir figure (III-9)).

c) Comportement des modes de surface en fonction de la forme des fils.

Nous modélisons une variation de la forme du fil en jouant sur sa hauteur A par rapport à sa base $2R$. Nous avons considéré le cas particulier où le matériau du fil est de même nature

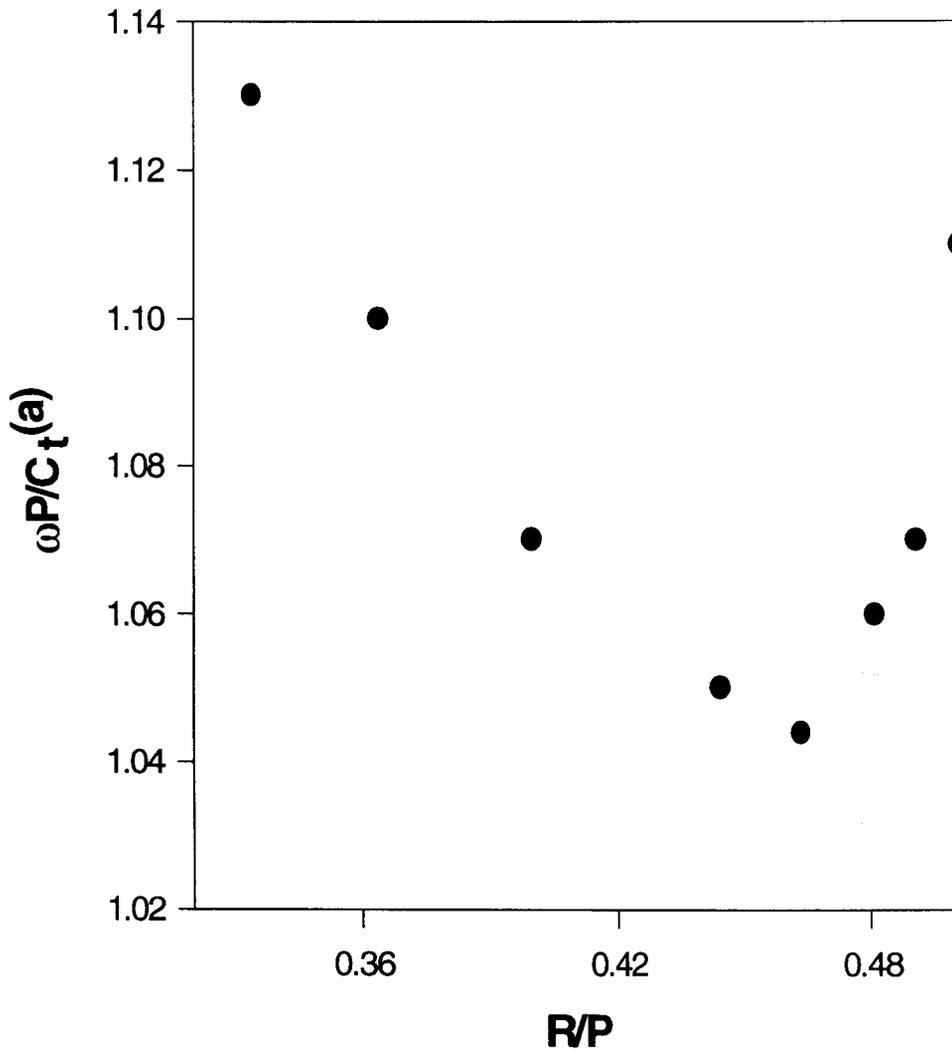


Figure III-8 : Variation de la fréquence réduite Ω en fonction du rapport R/P, à $kP=3$ et pour les paramètres suivants des deux matériaux :

$$C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 2, C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 4$$

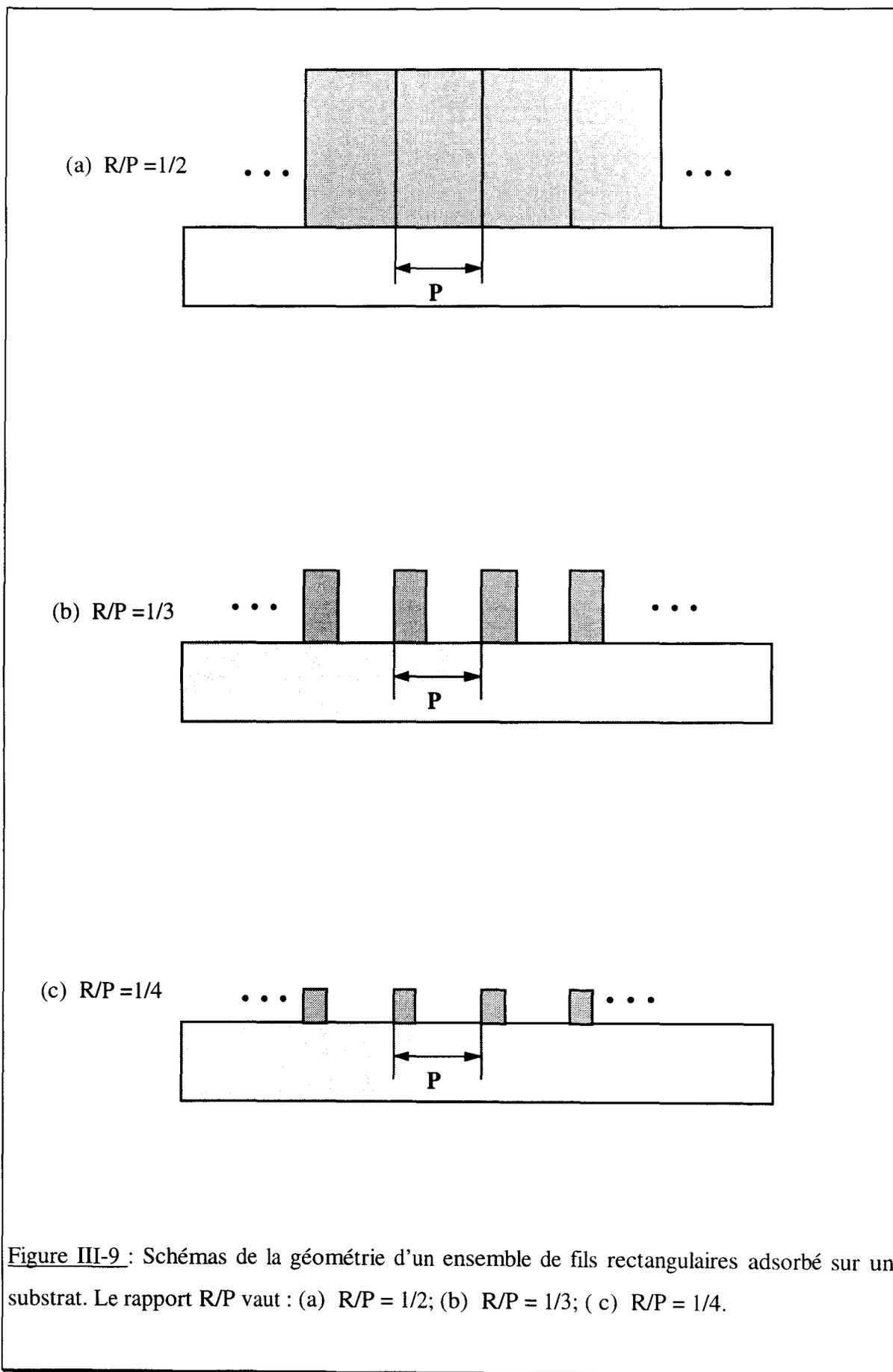


Figure III-9 : Schémas de la géométrie d'un ensemble de fils rectangulaires adsorbé sur un substrat. Le rapport R/P vaut : (a) $R/P = 1/2$; (b) $R/P = 1/3$; (c) $R/P = 1/4$.

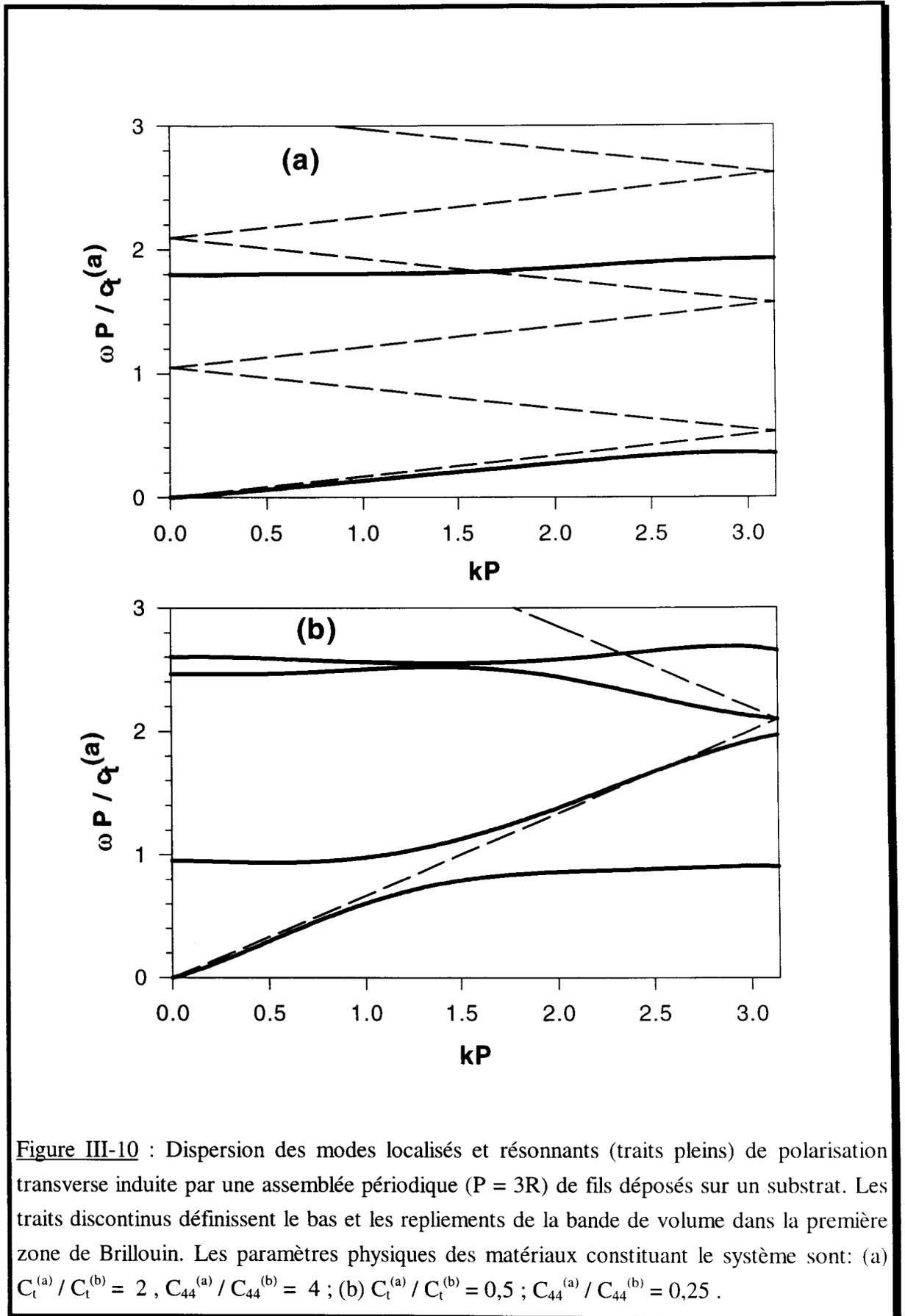
que celui du substrat. Sur les figure ((III-7e) et (III-7f)), nous avons illustré les courbes de dispersion des modes de surface pour deux hauteurs différentes, à savoir $A = 2R$ (figure III-7 e) et $A = 4R$ (figure III-7 f).

De manière générale, on constate que les fréquences du mode de surface décroissent lorsque la hauteur A du fil augmente en même temps que de nouveaux modes de surface apparaissent vers le bord de la zone de Brillouin ($2 \leq kP \leq \pi$). L'existence de plusieurs branches de modes localisés dans la région non-radiative du plan (ω, k) peut être comprise dans le sens où le fil isolé peut supporter plusieurs modes discrets. En effet, ces modes discrets deviennent de plus en plus serrés quand la hauteur du fil augmente, c'est-à-dire leur nombre augmente sur un intervalle de fréquence fixé. En conséquence, on peut penser que quand ces fils sont déposés sur le substrat, il y a la possibilité d'avoir davantage de modes de surface.

III-2) Courbes de dispersion des modes résonnants

Dans ce qui suit, nous donnons les courbes de dispersion obtenues pour les modes résonnants de polarisation transverse dans ce système périodique. Ces modes sont déduits des pics de densités d'états que nous avons présentées auparavant. Nous avons fixé la période du système $P = 3R$, la hauteur du fil $A = 2R$ et fait varier les paramètres physiques des deux matériaux.

Les courbes des figures (III-10 a et b), illustrent respectivement les courbes de dispersion des modes résonnants dans le cas où les fils sont constitués d'un matériau plus dur ($C_{44}^{(a)} \gg C_{44}^{(b)}$) ou plus mou que le substrat ($C_{44}^{(a)} \ll C_{44}^{(b)}$), tandis que les densités de masse sont prises identiques dans les deux matériaux. Sur ces courbes les traits discontinus représentent les repliements de la bande de volume dans la première zone de Brillouin. Les



modes résonnants associés aux fils adsorbés sont représentés par des traits épais. La première branche, située en dessous de la limite de la bande de volume, correspond au mode localisé qui a été discuté au paragraphe précédent. Les modes résonnants apparaissent comme des branches à l'intérieur de la bande de volume. Ces branches sont en général plutôt plates et présentent une faible dispersion en fonction du vecteur d'onde k , sauf au niveau de leur croisement avec un repliement du bas de la bande de volume dans la première zone de Brillouin. Ces modes existent donc sur des domaines de fréquence très fins, il en résulte en général des vitesses de groupe très faibles.

Sur la figure (III-10 b) le premier mode résonnant, autour de $\Omega \cong 1$, est très proche de la limite inférieure de la bande de volume pour des vecteurs d'ondes kP compris entre 1,5 et 2,5 puis, pour les valeurs supérieures de kP il sort de la bande de volume et devient un mode de surface avec une vitesse de propagation assez proche de celle du substrat $C_t^{(b)}$.

Notons aussi que les gammes de fréquences dans lesquelles apparaissent les premiers modes résonnants correspondent assez bien aux positions des pics de résonances d'un seul fil adsorbé sur un substrat avec les mêmes paramètres physiques. Or, ces dernières positions concordent finalement avec les positions des modes discrets d'un seul fil isolé (sans support) avec des conditions aux limites adéquates ; c'est-à-dire un fil isolé ayant les deux surfaces libres de contraintes pour la figure (III-10 a). Par contre, les modes résonnants de la figure (III-10 b) correspondent à un fil isolé ayant sa surface courbée libre de contrainte et sa surface plane rigidement bloquée.

Sur la figure (III-11) nous avons illustré les courbes de dispersion des modes résonnants associés à des fils très denses par rapport au substrat (soit $\rho^{(a)} \gg \rho^{(b)}$; figure III-11a) ou à des fils de faible densité par rapport au substrat (soit $\rho^{(a)} \ll \rho^{(b)}$; figure III-11 b).

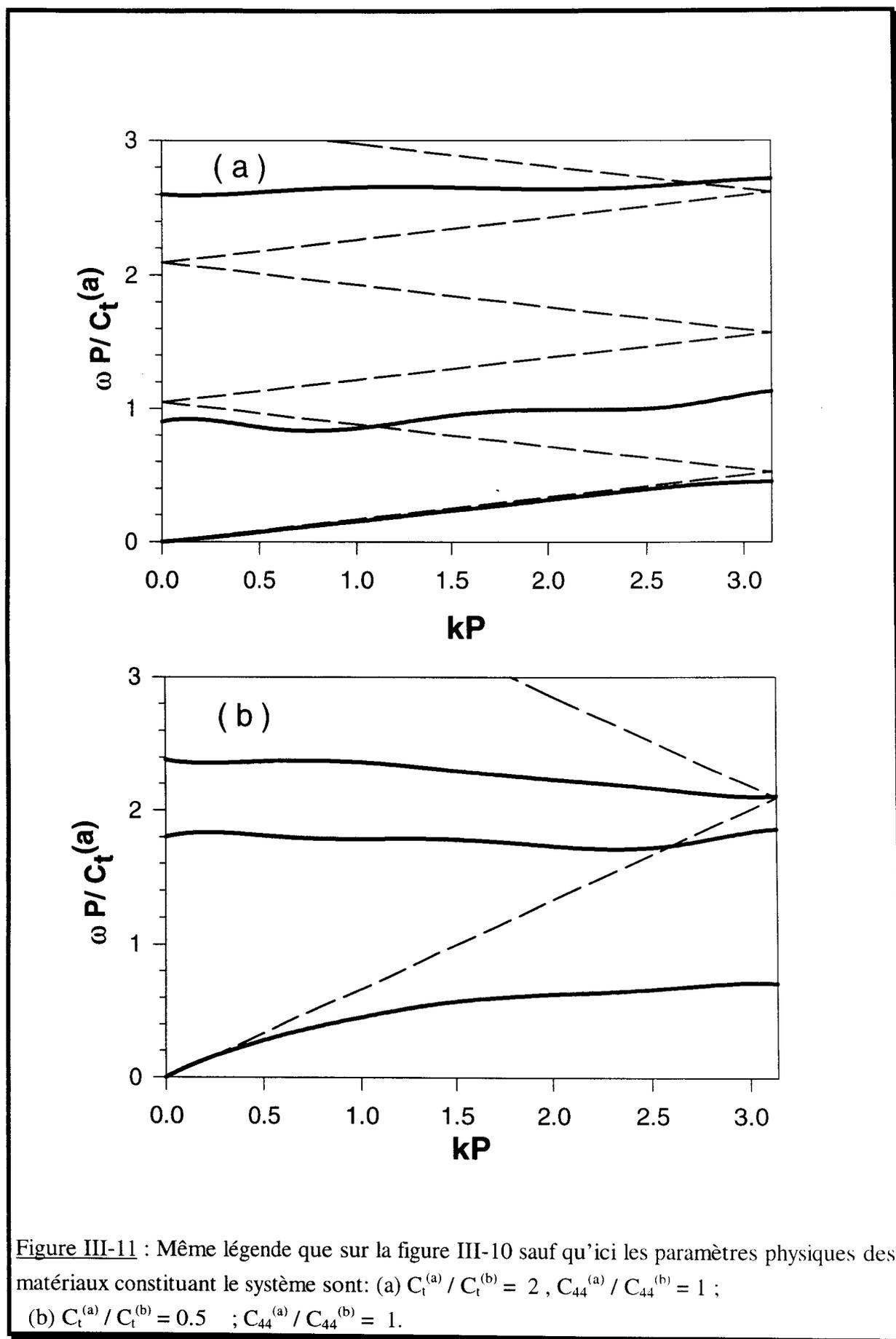


Figure III-11 : Même légende que sur la figure III-10 sauf qu'ici les paramètres physiques des matériaux constituant le système sont: (a) $C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 2$, $C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 1$;
 (b) $C_t^{(a)} / C_t^{(b)} = 0.5$; $C_{44}^{(a)} / C_{44}^{(b)} = 1$.

Les comportements généraux mentionnés ci-dessus restent encore valables dans ce cas. En particulier, les branches de modes résonnants se produisent dans les mêmes gammes de fréquence que les résonances d'un seul fil déposé sur un substrat ; néanmoins, rappelons que ces fréquences n'ont pas de lien très évident avec les modes propres d'un fil isolé (sans support).

IV) Conclusion

Nous avons étudié, dans ce chapitre, les résonances acoustiques de polarisation transverse associées à une assemblée périodique de fils supportés. A partir de la détermination des densités d'états, nous avons mis en évidence l'existence des modes localisés et résonnants dans ces nanostructures périodiques.

Sur le plan théorique, l'utilisation du formalisme de la fonction de Green, nous a permis d'obtenir les densités d'états en fonction de la fréquence pour chaque valeur du vecteur d'onde k ($0 < k < \pi/P$) parallèle à la surface.

Le mode de surface est une conséquence de la perturbation de la surface plane du substrat par ces fils puisque, pour une polarisation transverse, ce mode ne peut pas exister sur un substrat limité par une surface parfaitement plane. Le comportement du mode de surface dépend fortement des paramètres élastiques, de la forme (hauteur) des fils et de la périodicité du système. Quand le rapport des vitesses transverses du son des deux matériaux est supérieur à un, la courbe de dispersion du mode de surface est très proche du bas de la bande de volume et ces modes se propagent essentiellement avec une vitesse très proche de $C_t^{(b)}$. Dans le cas opposé ($C_t^{(a)} < C_t^{(b)}$) les fréquences de modes de surface se détachent de façon importante par rapport à celles du bas de la bande de volume ($\omega = C_t^{(b)}k$), ce qui révèle une localisation plus forte de ces modes en surface.

L'examen des fréquences associées au mode de surface en fonction de la taille du fil comparée à la période du système (R/P) montre, d'une façon assez générale, une variation monotone des courbes de dispersion. Celles-ci montent et s'approchent du bas de la bande de volume lorsque le rapport R/P diminue. Une exception à ce comportement se produit

(variation non-monotone) lorsque le matériau du fil est plus dur que celui du substrat $C_{44}^{(a)} \gg C_{44}^{(b)}$. En fait dans ce cas la diminution du R/P à partir de $1/2$ donne lieu d'abord à une décroissance des fréquences du mode de surface avant que celles-ci croissent et se confondent finalement avec la bande de volume. Une interprétation de ce comportement est donnée en comparant les fils adsorbés à une couche effective adsorbée sur un substrat.

Un autre paramètre important qui influence ces modes de surface est la hauteur des fils. En effet, nous avons montré que de nouveaux modes de surface apparaissent à la limite de la zone de Brillouin quand la hauteur augmente ($A = 4R$). Ceci peut être lié au confinement des modes discrets du fil isolé (sans support) lorsque la hauteur A augmente.

Finalement, nous avons étudié les modes résonnants et leur comportement en fonction des différents paramètres élastiques des deux matériaux. Les branches correspondant aux modes résonnants sont généralement plates et présentent une faible variation en fonction du vecteur d'onde, sauf au croisement avec un repliement de la bande de volume dans la première zone de Brillouin. Leurs positions en fréquence sont très proches des positions de résonance pour un seul fil adsorbé sur un substrat.

Finalement, en effectuant une moyenne des densités d'états sur toutes les valeurs de k , on obtient une allure assez semblable à celle pour un seul fil supporté avec les mêmes paramètres.

Appendice B

Dans cet appendice, nous présentons les détails du calcul de la fonction de Green du substrat \tilde{g}_b dans l'espace mixte (X_1, k) (équation (III-9) et (III-10)), en utilisant la transformée de Fourier et l'approximation asymptotique de la fonction de Hankel pour les grands arguments. En fait, il s'agit d'évaluer la série S_2 de l'équation (III-10) :

$$\begin{aligned}
 S_2 &= \sum_{n=-\infty}^{-(n_0+1)} H_0^{(1)}\left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} |X_1 - X'_1 + nP|\right) \exp(iknP) + \sum_{n=n_0+1}^{+\infty} H_0^{(1)}\left(\frac{\omega}{C_t^{(b)}} |X_1 - X'_1 + nP|\right) \exp(iknP) \\
 &= \sum_{n=n_0+1}^{\infty} \left\{ H_0^{(1)}\left[\frac{\omega}{C_t^{(b)}} |X_1 - X'_1 + nP|\right] \exp(iknP) + H_0^{(1)}\left[\frac{\omega}{C_t^{(b)}} |X_1 - X'_1 - nP|\right] \exp(-inPk) \right\}
 \end{aligned}
 \tag{B-1}$$

Posons $X = \frac{\omega}{C_t^{(b)}} (X_1 - X'_1)$, $\alpha = \frac{\omega P}{C_t^{(b)}}$ et $\beta = \frac{C_t^{(b)} k}{\omega}$

On doit donc calculer :

$$S_2 = \sum_{n=n_0+1}^{\infty} \left[H_0^{(1)}(n\alpha + X) \exp(in\alpha\beta) + H_0^{(1)}(n\alpha - X) \exp(in\alpha\beta) \right]
 \tag{B-2}$$

Or pour un argument z grand :

$$\begin{aligned}
 H_0^{(1)}(z) &\cong \sqrt{\frac{2}{\pi z}} [f(z) + iQ(z)] \exp(i(z - \pi/4)) \\
 \text{où } f(z) &= 1 - \frac{9}{128z^2} + \frac{11025}{98304z^4} + \dots \cong 1 - \frac{a_1}{z^2} + \frac{a_2}{z^4} + \dots \\
 \text{et } Q(z) &= -\frac{1}{8z} + \frac{225}{3072z^3} - \dots \cong \frac{-b_1}{z} + \frac{b_2}{z^3} - \dots
 \end{aligned}
 \tag{B-3}$$

En introduisant ce développement asymptotique de la fonction de Hankel dans l'expression de S_2 , le premier membre de droite de l'équation (B-2) devient alors :

$$\sum_{n=n_0+1}^{\infty} H_0^{(1)}(n\alpha + X)e^{in\alpha\beta} \cong \sum_{n=n_0+1}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp(i(X - \pi/4)) \cdot \exp(in\alpha(1+\beta)) * \left\{ \frac{1}{(n\alpha + X)^{1/2}} - \frac{a_1}{(n\alpha + X)^{5/2}} + \frac{a_2}{(n\alpha + X)^{9/2}} + i \left[\frac{-b_1}{(n\alpha + X)^{3/2}} + \frac{b_2}{(n\alpha + X)^{7/2}} + \dots \right] \right\} \quad (B-4)$$

Par ailleurs, on peut considérer l'approximation suivante :

$$\left(1 + \frac{X}{n\alpha}\right)^\gamma \approx 1 + \gamma \left(\frac{X}{n\alpha}\right) + \frac{\gamma(\gamma-1)}{2!} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^2 + \frac{\gamma(\gamma-1)(\gamma-2)}{3!} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^3 + \dots \quad (B-5)$$

avec $-1 < \gamma < +1$

En injectant cette approximation dans l'expression (B-4), on obtient :

$$\sum_{n=n_0+1}^{\infty} H_0^{(1)}(n\alpha + X)e^{in\alpha\beta} \cong \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp(i(X - \pi/4)) \cdot \sum_{n=n_0+1}^{\infty} \exp(i(n\alpha(1+\beta))) * \left\{ \frac{1}{(n\alpha)^{1/2}} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{X}{n\alpha}\right) + \frac{3}{8} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^2 - \frac{5}{16} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^3 + \frac{35}{128} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^4 - \frac{63}{64} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^5 \dots \right. \right. \\ + a_1 \left(\frac{1}{n\alpha}\right)^2 \left(-1 + \frac{5}{2} \left(\frac{X}{n\alpha}\right) - \frac{35}{8} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^2 + \frac{105}{16} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^3 \right) \\ + a_2 \left(\frac{1}{n\alpha}\right)^4 \left(1 - \frac{9}{2} \left(\frac{X}{n\alpha}\right) + \frac{99}{8} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^2 - \frac{297}{16} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^3 \right) \\ + i \left[b_1 \frac{1}{(n\alpha)} \left(-1 + \frac{3}{2} \left(\frac{X}{n\alpha}\right) - \frac{15}{8} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^2 + \frac{35}{8} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^3 - \frac{315}{128} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^4 \right) + \right. \\ \left. b_2 \frac{1}{(n\alpha)^3} \left(1 - \frac{7}{2} \left(\frac{X}{n\alpha}\right) + \frac{63}{8} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^2 - \frac{231}{16} \left(\frac{X}{n\alpha}\right)^3 \right) \right] \left. \right\} \quad (B-6)$$

De la même manière on trouve l'expression suivante pour le second membre de la somme S_2 (équation B-2).

$$\begin{aligned}
 \sum_{n=n_0+1}^{\infty} H_0^{(1)}(n\alpha - X)e^{in\alpha\beta} &\equiv \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp(i(X + \pi/4)) \cdot \sum_{n=n_0+1}^{\infty} \exp(i(n\alpha(1-\beta)))^* \\
 &\frac{1}{(n\alpha)^{1/2}} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{X}{n\alpha} \right) + \frac{3}{8} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^2 - \frac{5}{16} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^3 + \frac{35}{128} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^4 - \frac{63}{64} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^5 \dots \right. \\
 &\quad \left. + a_1 \left(\frac{1}{n\alpha} \right)^2 \left(-1 + \frac{5}{2} \left(\frac{X}{n\alpha} \right) - \frac{35}{8} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^2 + \frac{105}{16} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^3 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + a_2 \left(\frac{1}{n\alpha} \right)^4 \left(1 - \frac{9}{2} \left(\frac{X}{n\alpha} \right) + \frac{99}{8} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^2 - \frac{297}{16} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^3 \right) \right. \\
 &\quad \left. + i \left[b_1 \frac{1}{(n\alpha)} \left(-1 + \frac{3}{2} \left(\frac{X}{n\alpha} \right) - \frac{15}{8} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^2 + \frac{35}{8} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^3 - \frac{315}{128} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^4 \right) + \right. \quad (B-7) \\
 &\quad \left. \left. b_2 \frac{1}{(n\alpha)^3} \left(1 - \frac{7}{2} \left(\frac{X}{n\alpha} \right) + \frac{63}{8} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^2 - \frac{231}{16} \left(\frac{X}{n\alpha} \right)^3 \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

On remarque dans ces deux expressions (B-6 et B-7) qu'il y a une possibilité d'extraire des séries (des sommes sur le nombre de cellule n). Pour ce faire posons :

$$F_v = \sum_{n=n_0+1}^{\infty} \frac{e^{in\alpha(1+\beta)}}{n^v}$$

$$G_v = \sum_{n=n_0+1}^{\infty} \frac{e^{in\alpha(1-\beta)}}{n^v}$$

où $v = 1/2, 3/2, 5/2, 9/2, 11/2$ (B-8)

On constate que ces séries sont rapidement convergentes sauf pour $v = 1/2$ ce qui nous amène dans ce cas à faire la somme pour un nombre très grand de n au point de vue numérique ($n = 10^6$).

L'avantage de cette écriture est de nous permettre d'évaluer l'expression de S_2 d'une manière simple qui allège le calcul numérique d'une façon remarquable. En effet, introduisons

maintenant les définitions de F_v et G_v dans les expressions (B-6) et (B-7). Puis réécrivons la somme S_2 , on obtient alors l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
 S_2 \approx & \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp(i(X - \pi / 4)) * \\
 & \left\{ \left[\left(\frac{5a_1}{2a_2} F_{(7/2)} - \frac{1}{2} F_{(3/2)} - \frac{9a_2}{2\alpha^4} F_{(11/2)} \right) + i \left(\frac{3b_1}{2\alpha} F_{(5/2)} - \frac{7b_2}{2\alpha^3} F_{(9/2)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right) \right. \\
 & + \left[\left(\frac{3}{8} F_{(5/2)} - \frac{35a_1}{8\alpha^2} F_{(9/2)} \right) + i \left(\frac{63b_2}{8\alpha^3} F_{(11/2)} - \frac{15b_1}{8\alpha} F_{(7/2)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right)^2 \\
 & + \left[\left(\frac{105 a_1}{16\alpha^2} F_{(11/2)} - \frac{5}{16} F_{(7/2)} \right) + i \left(\frac{35b_1}{8\alpha} F_{(9/2)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right)^3 \\
 & + \left[\left(\frac{35}{128} F_{(9/2)} \right) + i \left(-\frac{315}{128\alpha} b_1 F_{(11/2)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right)^4 \\
 & + \left[\left(-\frac{63}{64} F_{(11/2)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right)^5 \\
 & + \left. F_{(1/2)} - \frac{a_1}{\alpha^2} F_{(5/2)} + \frac{a_2}{\alpha^4} F_{(9/2)} + i \left(-\frac{b_1 F_{(3/2)}}{\alpha} + \frac{b_2}{\alpha^3} F_{(7/2)} \right) \right\} + \\
 & + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp(i(X + \pi / 4)) * \\
 & \left\{ - \left[\left(\frac{5a_1}{2\alpha^2} G_{(7/2)} - 1/2 G_{(3/2)} - \frac{9a_2}{2\alpha^4} G_{(11/2)} \right) + i \left(\frac{3b_1}{2\alpha} G_{(5/2)} - \frac{7b_2}{2\alpha^3} G_{(9/3)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right) \right. \\
 & + \left[\left(\frac{3}{8} G_{(5/2)} - \frac{35a_1}{8\alpha^2} G_{(9/2)} \right) + i \left(\frac{63b_2}{8\alpha^3} G_{(11/2)} - \frac{15b_1}{8\alpha} G_{(7/2)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right)^2 \\
 & - \left[\left(\frac{105a_1}{16\alpha^2} G_{(11/2)} - \frac{5}{16} G_{(7/2)} \right) + i \left(\frac{35b_1}{8\alpha} G_{(9/2)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right)^3 \\
 & + \left[\left(\frac{35}{128} G_{(9/2)} \right) + i \left(-\frac{315}{128\alpha} b_1 G_{(11/2)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right)^4
 \end{aligned}$$

$$-\left[\left(-\frac{63}{64} F_{(11/2)} \right) \right] \left(\frac{X}{\alpha} \right)^5 + G_{(1/2)} - \frac{a_1}{\alpha^2} G_{(5/2)} + \frac{a_2}{\alpha^4} G_{(9/2)} + i \left(\frac{-b_1}{\alpha} G_{(3/2)} + \frac{b_2}{\alpha^3} G_{(7/2)} \right) \quad (\text{B-9})$$

On peut donc écrire S_2 de manière formelle comme suit :

$$S_2 = e^{i(X-\pi/4)} \left\{ A_1 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right) + A_2 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^2 + A_3 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^3 + A_4 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^4 + \dots \right\} + e^{-i(X+\pi/4)} \left\{ B_1 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right) + B_2 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^2 + B_3 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^3 + B_4 \left(\frac{X_1 - X'_1}{P} \right)^4 + \dots \right\} \quad (\text{B-10})$$

avec :

$$A_0 = \left[F_{(1/2)} - \frac{a_1}{\alpha^2} F_{(5/2)} + \frac{a_2}{\alpha^4} F_{(9/2)} + i \left(\frac{-b_1}{\alpha} F_{(3/2)} + \frac{b_2}{\alpha^3} F_{(7/2)} \right) \right]$$

$$A_1 = \left[\left(\frac{5a_1}{2\alpha^2} F_{(7/2)} - \frac{1}{2} F_{(3/2)} - \frac{9a_2}{2\alpha^4} F_{(11/2)} \right) + i \left(\frac{3b_1}{2\alpha} F_{(5/2)} - \frac{7b_2}{3\alpha^3} F_{(9/2)} \right) \right]$$

$$A_2 = \left[\left(\frac{3}{8} F_{(5/2)} - \frac{35a_1}{8\alpha^2} F_{(9/2)} \right) + i \left(\frac{63b_2}{8\alpha^3} F_{(11/2)} - \frac{15b_1}{8\alpha} F_{(7/2)} \right) \right]$$

$$A_3 = \left[\left(\frac{105a_1}{16\alpha^2} F_{(11/2)} - \frac{5}{16} F_{(7/2)} \right) + i \left(\frac{35b_1}{8\alpha} F_{(9/2)} \right) \right]$$

$$A_4 = \left[\left(\frac{35}{128} F_{(9/2)} \right) + i \left(\frac{-315}{128\alpha} b_1 F_{(11/2)} \right) \right]$$

$$A_5 = \left[\left(-\frac{63}{64} F_{(11/2)} \right) \right]$$

$$B_0 = \left[G_{(1/2)} - \frac{a_1}{\alpha^2} G_{(5/2)} + \frac{a_2}{\alpha^4} G_{(9/2)} + i \left(\frac{-b_1}{\alpha} G_{(3/2)} + \frac{b_2}{\alpha^3} G_{(7/2)} \right) \right]$$

$$B_1 = \left[\left(\frac{5a_1}{2\alpha^2} G_{(7/2)} - 1/2 G_{(3/2)} - \frac{9a^2}{2\alpha^4} G_{(11/2)} \right) + i \left(\frac{3b_1}{2\alpha} G_{(5/2)} - \frac{7b_2}{3\alpha^3} G_{(9/2)} \right) \right]$$

$$B_2 = \left[\left(\frac{3}{8} G_{(5/2)} - \frac{35a_1}{8\alpha^2} G_{(9/2)} \right) + i \left(\frac{63b_2}{8\alpha^3} G_{(11/2)} - \frac{15b_1}{8\alpha} G_{(7/2)} \right) \right]$$

$$B_3 = \left[\left(\frac{105}{16\alpha^2} a_1 G_{(11/2)} - \frac{5}{16} G_{(7/2)} \right) + i \left(\frac{35b_1}{8\alpha} G_{(9/2)} \right) \right]$$

$$B_4 = \left[\left(\frac{35}{128} G_{(9/2)} \right) + i \left(-\frac{315}{128\alpha} b_1 G_{(11/2)} \right) \right]$$

$$B_5 = \left[\left(\frac{-63}{64} G_{(11/2)} \right) \right]$$

BIBLIOGRAPHIE

- [1] A. D. Lapin, Akust. Zh. 25, 766 (1979) [Sov. Phys. - Acoustics 25, 432 (1979)].
- [2] A. D. Lapin, Akust. Zh. 26, 104 (1980) [Sov. Phys. - Acoustics 26, 55 (1980)].
- [3] V. I. Grigorevskii and V. P. Plesskii, Pisma Zh. Tekh. Fiz. 5, 1398 (1979) [Sov. Tech. Phys. Lett. 5, 588 (19979)].
- [4] R. F. Humphryes and E. A. Ash, Electron. Lett. 5, 175 (1969).
- [5] I. D. Akhromeeva and V. V. Krylov, Akust. Zh. 23, 510 (1977) [Sov. Phys. - Acoustics 23, 292 (1977)].
- [6] Yu. V. Gulyaev, T. N. Kurach, and V. P. Plesskii, Pisma Zh. Tekh. Fiz. 5, 272 (1979) [Sov. Tech. Phys. Lett. 5, 111 (1979)].
- [7] Yu. V. Gulyaev, T. N. Kurach, and V. P. Plesskii, Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 29, 563 (1979) [Sov. Tech. Phys. - JETP Letters. 29, 513 (1979)].
- [8] Yu. V. Gulyaev, T. N. Kurach, and V. P. Plesskii, . Akust. Zh. 26, 540 (1980) [Sov. Phys. - Acoustics 26, 296 (1980)].
- [9] Yu. V. Gulyaev, and V. P. Plesskii, Fiz. Tver. Tela 21, 3479 (1979) [Sov. Phys. -Solid State 21, 2010 (1979)].
- [10] A. N. Avdeev and V. P. Plesskii, Akust. Zh. 28, 289 (1982) [Sov. Phys. - Acoustics 28, 173 (1982)].
- [11] N. E. Glass, R. Loudon, and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B24, 6843 (1981)
- [12] N. E. Glass and A. A. Maradudin, J. Appl. Phys. 54, 796 (1983)
- [13] B. A. Auld, J. J. Gagnepain, and M. Tan, Electronics Lett. 12, 650 (1976)

- [14] Yu. V. Gulyaev and V. P. Plesskii, Zh. Tekh. Fiz. 48, 447 (1978) [Sov. Phys. Technical Physics. 23, 266 (1978)].
- [15] N. E. Glass and A. A. Maradudin, Electronics Lett. 17, 773 (1981).
- [16] Yu. V. Gulyaev and V. P. Plesskii, Electronics Lett. 15,64 (1979).
- [17] Yu. V. Gulyaev and V. P. Plesskii, Wave Electronics 4, 7 (1979).
- [18] B. Djafari-Rouhani and A. A. Maradudin, J. Appl. Phys. 65, 4245 (1989).
- [19] A. R. Baghai-Wadji and A. A. Maradudin, Appl. Phys. Lett. 59 , 1841 (1991).
- [20] Qiang Xue and Yougan Shui, IEEE transaction on ultrasonics 37,13 (1989).
- [21] S. V. Biryukov, Sov. Phys. Acoust. 34 , 328 (1992).
- [22] E. Dieulesaint and R. Royer, Ondes élastiques dans les solides ; application au traitement du signal (Masson, Paris, 1996)

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

La présence d'inhomogénéités ou de rugosités près de la surface d'un cristal (fils supportés ou enfouis, rainures ou creux) modifie le spectre des vibrations de la surface plane. Nous avons mis au point une méthode numérique exacte basée sur le formalisme de fonction de Green pour obtenir les propriétés acoustiques (densités d'états locales et totales, diffusion d'une onde incidente en champ proche ou lointain) associées à ces défauts de surface. L'intérêt de la méthode est de pouvoir envisager à la fois une géométrie arbitraire de la section du fil ou de la rainure et de choisir des matériaux différents pour le fil et pour le substrat.

Nous avons appliqué cette méthode à l'étude des résonances acoustiques de polarisation transverse pour un ou deux fils adsorbés sur un substrat ainsi que pour une assemblée périodique de fils supportés. Nous avons également étudié la diffusion d'une onde acoustique incidente par ce type d'hétérogénéités en surface. Ces résultats sont présentés pour des fils dont la section a une forme parabolique.

Dans le cas d'un fil adsorbé, la qualité des résonances dans les densités d'états dépend des paramètres relatifs des deux matériaux ainsi que de la géométrie du fil. On aboutit à une grande variété de situations dont certaines peuvent avoir une interprétation simple; par exemple dans le cas d'un fil beaucoup plus dur que le substrat, les résonances résultent simplement de l'élargissement des modes discrets du fil isolé (non supporté). Notons que les pics des densités d'états locales en surface et à l'interface sont identiques ou différents selon

que le rapport des impédances acoustiques des deux matériaux est respectivement supérieur ou inférieur à un.

Nous avons remarqué que ces résonances subissent des modifications sensibles lorsque deux fils voisins sont déposés sur la surface plane d'un substrat.

Nous avons aussi étudié la diffusion d'une onde incidente par un fil supporté. En incidence normale ou à faible angle d'incidence, l'amplitude de l'onde diffusée présente une série d'augmentations et de diminutions successives en fonction de la fréquence. Celles pour lesquelles l'amplitude devient minimale correspondent aux modes propres symétriques du fil isolé. Une explication de ce comportement est le fait que, pour ces fréquences, la condition aux limites à la surface plane du substrat n'est pas perturbée par la présence du fil supporté. Cependant, l'allure de l'amplitude dépend du rapport des impédances acoustiques. Par ailleurs, la distribution angulaire autour de la normale se rétrécit ou s'élargit selon que le rapport des vitesses du son dans les deux matériaux est respectivement supérieur ou inférieur à un.

En dehors de l'incidence normale, une grande variété de situations peut se produire. Néanmoins, on peut souligner un comportement assez général dans le cas où la vitesse du son dans le fil $C_t^{(a)}$ est supérieure à celle dans le substrat $C_t^{(b)}$, à savoir la prédominance de la diffusion en direction de la réflexion spéculaire (autrement dit le lobe de diffusion est orienté vers l'avant).

Nous avons étendu la méthode à l'étude des modes localisés et résonnants associés à une assemblée périodique de fils déposés sur un substrat. Nous pouvons ainsi montrer qu'il peut exister une ou plusieurs branches de modes de surface en dessous de la bande de volume selon les paramètres élastiques et la géométrie des fils, mais aussi selon la périodicité du système. Rappelons que la surface plane d'un substrat isotrope ne peut pas supporter de mode

de surface de polarisation transverse. En présence des fils supportés, les modes de surface se détachent d'autant plus de la bande de volume que la vitesse du son $C_t^{(a)}$ dans les fils est plus faible que celle $C_t^{(b)}$ dans le substrat. Dans le cas où $C_t^{(a)} > C_t^{(b)}$, ces modes restent très proches du bas de la bande de volume et peuvent éventuellement n'exister que pour un domaine assez restreint de la période comparée à la taille des fils.

Les courbes de dispersion des modes résonnants sont généralement assez plates et ne présentent de variation notable en fonction du vecteur d'onde k qu'au voisinage de leurs croisements avec les repliements du bas de la bande de volume dans la zone de Brillouin. Leurs positions en fréquence sont assez proches de celles des résonances associées à un seul fil adsorbé. Finalement, en effectuant une moyenne de la densité d'états sur toutes les valeurs du vecteur d'onde k , on obtient une allure assez semblable à celle pour un seul fil supporté.

Notre intérêt pour les nanostructures intégrées sur ou près d'une surface réside dans la détermination de leurs propriétés spectrales (modes localisés, résonances) ainsi que dans l'étude de la diffusion d'ondes par ces défauts. La méthode de fonction de Green que nous avons mise au point a pour l'instant été appliquée à l'étude des modes acoustiques de polarisation transverse dans le cas des fils de forme arbitraire déposés sur une surface.

La perspective générale de ce travail sera donc l'extension de notre formalisme à l'étude de géométries plus complexes (amas, fissure, composites...) ainsi que d'autres types d'excitations (phonons impliquant le couplage de deux ou trois directions de vibration, électrons, ondes électromagnétiques, ...). Nous pouvons également envisager d'aborder ces problèmes à partir de modèles atomiques, étant donné que le traitement de modèles continus passe par une discrétisation de l'espace ; dans ce cadre, nous avons déjà considéré le cas d'un fil

isolé dont on a pu déterminer les fréquences de résonance. Rappelons que dans tous ces problèmes, la difficulté réside au départ dans la connaissance des fonctions de Green pour le volume et pour une surface ou interface plane.

Au-delà de ces perspectives générales, nous pouvons mentionner quelques prolongements immédiats de notre travail :

- ondes acoustiques de polarisation transverse pour des fils enfouis dans le volume d'un cristal ou au voisinage de la surface d'un substrat (fig. 1-a) ; on peut en particulier envisager le cas d'un canal vide qui peut représenter une fissure (fig. 1-b).

- ondes acoustiques de polarisation transverse à l'interface ondulée périodiquement entre deux substrats (fig. 1-c) ; il suffirait de coupler deux surfaces ondulées périodiquement, ces dernières ayant été étudiées au chapitre III.

- matériaux composites à fibres (fig. 1-d), si l'on se limite aux vibrations de polarisation transverse pour lesquelles le champ des déplacements a une seule composante parallèle à l'axe des fibres. Le matériau composite peut être réalisé par la juxtaposition des cellules élémentaires qui s'obtiennent par le découpage et l'assemblage des morceaux qui les composent.

- dans le cadre d'un modèle de masse effective, l'étude de la structure électronique d'un fil déposé sur une surface ou enfoui au voisinage de celle-ci, à condition que la surface soit limitée par une barrière de potentiel infini.

Tous ces problèmes peuvent être traités à partir de légers remaniements des outils développés dans ce travail.

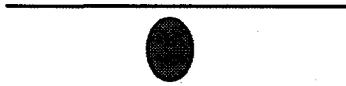


Figure 1-a : Fil enfoui au voisinage d'une surface

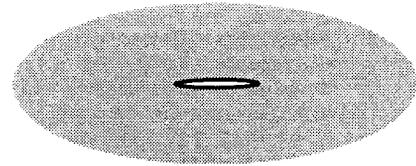


Figure 1-b : Fissure dans un milieu

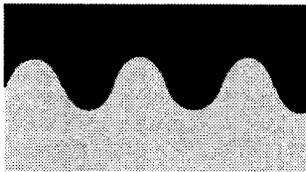


Figure 1-c : interface périodique

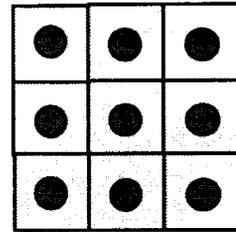


Figure 1-d : Composite à fibres

