

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
« HOUARI BOUMEDIENE »
FACULTE DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de MAGISTER

EN : PHYSIQUE

Spécialité : Physique Théorique de la Matière et des Hautes Energies

Par : **AMOUDACHE SAMIRA**

Sujet :

EXCITATIONS PHONONIQUES DANS LES SYSTEMES DE BASSES DIMENSIONS

Soutenu le 10 /10/2005, devant le jury composé de :

Mr- M. SAIDI	Maître de conférences	U.S.T.H.B	Président
Mr- O. RAFIL	Professeur	U.M.M.T.O	Dteur de Thèse
Mr- N. BELDJOUDI	Maître de conférences	U.S.T.H.B	Examineur
Mr- M. DJEBLI	Maître de conférences	U.S.T.H.B	Examineur
Mr- M. TAMINE	Maître de conférences	U.M.M.T.O	Examineur
Mr- R. TIGRINE	Maître de conférences	U.M.M.T.O	Examineur

Résumé:

Le thème d'étude proposé dans ce mémoire de Magister porte sur les excitations phononiques localisées dans les systèmes de basses dimensions avec présence de défauts de structure. L'influence de la présence de ces défauts sur les propriétés vibrationnelles et de diffusion ont fait l'objet d'une investigation. Un système modèle consistant en la composition de deux plans atomiques infinis superposés l'un par rapport à l'autre est proposé dans le cadre de cette étude. Le formalisme théorique proposé dans ce travail repose sur l'utilisation simultanée de la méthode de raccordement avec la théorie des fonctions de Green dans le cadre de l'approximation harmonique en utilisant un modèle des forces centrales, pour décrire de manière détaillée les propriétés vibrationnelles localisées. Ainsi, les densités spectrales et les densités d'états localisées aux défauts structuraux sont analysées. De plus, une étude de la diffusion des ondes élastiques par ce système modèle considéré comme guide d'ondes est également développée. Les résultats obtenus montrent que les coefficients de transmission et de réflexion dépendent des interférences entre les ondes diffusées élastiquement par le défaut. De plus l'interaction entre les états de diffusion et les états localisés fait apparaître des résonances de type Fano comme observé dans le transport électronique. Nous avons ainsi montré que les spectres obtenus par des expériences de diffusion contiennent des informations caractéristiques de chaque défaut.

Mots clés :

Phonons - nanostructures - vibrations de réseaux - défauts - diffusion phononique.

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué au laboratoire de Physique et Chimie Quantique (L.P.C.Q) de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou.

Je tiens à exprimer mes plus vifs remerciements au Professeur Omar Rafil qui a dirigé sans relâche mon travail avec beaucoup de compétence et de patience. Ses qualités humaines et ses remarques m'ont été précieuses. Qu'il trouve ici ma profonde reconnaissance.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur Mohamed Saidi, Maître de conférences à l'université des sciences et de la technologie Houari Boumediene (USTHB) pour l'honneur qu'il me fait de présider le jury de ce mémoire.

Je tiens à exprimer à Messieurs Nadir Beldjoudi et Mourad Djebli, Maîtres de conférences à L'USTHB, ainsi qu'à Messieurs Mokrane Tamine et Rachid Tigrine, Maîtres de conférences à l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou toute ma reconnaissance pour l'honneur qu'ils m'ont fait d'avoir accepté de faire partie de ce jury.

Je remercie Monsieur Boualem Bourahla, maître assistant à l'université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou pour ses conseils et son intérêt à mon travail.

Je tiens à remercier toutes les personnes qui ont contribué de loin ou de près à la réalisation de ce travail. Je remercie en particulier D. Oubaziz, H. Cherifi, et tous les membres de LPCQ. Et que l'ensemble du personnel de la faculté de physique de L'USTHB trouve ici l'expression de mes remerciements.

Je témoigne enfin toute ma reconnaissance à ma famille, mes parents, mon frère, mes sœurs Zina, Baya et Ferroudja, ma belle sœur, pour m'avoir soutenu tout au long de ce travail.

SOMMAIRE

INTRODUCTION	6
CHAPITRE 1 : RAPPELS DE DYNAMIQUE VIBRATIONNELLE D'UN SOLIDE CRISTALLIN	
1.1 Dynamique vibrationnelle des solides ordonnés.....	9
1.2 Dynamique vibrationnelles des solides désordonnés.	11
1.2.1 La méthode de diagonalisation directe.	12
1.2.2 La méthode des fonctions de Green.....	12
1.2.3 La méthode de raccordement.....	13
CHAPITRE 2 : DYNAMIQUE VIBRATIONNELLE D'UN GUIDE D'ONDE PARFAIT.	
2.1 Introduction.....	17
2.2 Dynamique vibrationnelle d'un plan double.....	17
2.3 Courbes de dispersion	21
2.4 Vitesse de groupe.....	22
2.5 Modes atténués.....	22
2.5.1 calcul des facteurs de phase.....	22
2.5.1.a - Méthode du déterminant.....	23
2.5.1.b – Méthode d'augmentation de base.....	23
2.5.2- Tri des valeurs propres.....	23
2.5.3- Facteurs de phases obtenus.....	24
CHAPITRE 3 : DIFFUSION D'ONDES ELASTIQUES PAR DES DEFAUTS IMPLANTES DANS UN GUIDE D'ONDE PARFAIT	
Introduction	28
3.1 - Diffusion d'ondes élastiques par un puits atomique.....	29
3.1.1 - Description du modèle	29
3.1.2- Matrice dynamique du système.....	30
3.1.3 - Matrice de raccordement.....	31
3.1.4 - Etude de la diffusion.....	34

3.1.4.1 – Calcul des coefficients de transmission et de réflexion.....	35
3.1.4.2 – Calcul de la conductance phononique.....	37
3.1.4.1 – Résultats et discussions	38
3.2 Diffusion d’ondes élastiques par un défaut étendu.....	46
Introduction.....	46
3.2. 1 – Défaut non symétrique.....	46
3.2.1.1 – système modèle.....	46
3.2. 1.2 – Résultats et discussions.....	47
3.2.1 – défaut symétrique.....	49
3.2 2.1– Description du modèle	49
3.2. 2.2 – Résultats et discussions.....	50
 CHAPITRE 4 : DENSITES SPECTRALES ET D’ETATS	
AU NIVEAU DU Puits ATOMIQUE	
4.1.Matrice des fonctions de Green	52
4.2. Calcul des éléments de $G(\omega^2)$	53
4.3. densités spectrales et d’états au niveau du puits atomique ...	56
4.3.1 densité spectrale.....	57
4.3.1 densité d’état.....	59
 5-CONCLUSION GENERALE.....	66
 6- ANNEXES	
Annexe A : Approximation Harmoniques des forces centrales	
Equations du mouvements.....	68
Annexe B : Calcul de la vitesse de groupe.....	73
Annexe C : Quelques matrices utiles.....	76
 REFERNCES	90

Introduction :

La recherche d'un point de vue fondamentale aussi bien qu'appliquée sur les systèmes de dimensions réduites a connu un grand essor pendant ces dernières années. Cette croissance remarquable est étroitement connectée aux besoins des sciences et des technologies de l'information et de la communication. Cette recherche contribue considérablement à la miniaturisation des dispositifs électroniques ainsi qu'à la densité de stockage et le traitement de l'information.

La croissance des films minces provoque des défauts de surface induisant une modification des propriétés physiques de telles surfaces. En effet malgré les progrès enregistrés ces dernières années dans les techniques de préparation et d'analyse des surfaces, ces dernières présentent toujours des défauts structuraux. Cette observation est confirmée par des techniques expérimentales d'exploration des surfaces, comme les microscopes à effet tunnel (S.T.M) ou à force atomique (A.F.M) qui offrent une vision directe de la morphologie des surfaces.

La recherche théorique dans le domaine des nanostructures s'est focalisée pour une grande partie sur l'étude des propriétés électroniques. L'exemple le plus étudié, pour des raisons qui tiennent à l'histoire et à l'intérêt technologiques, est celui de la conduction électrique dans des systèmes mésoscopiques. La résistance de tels composés, dont les dimensions sont de l'ordre du nanomètre, ne peut pas être prédite par la théorie classique du transport. Pour la comprendre il faut se placer dans un cadre quantique et tenir compte des phénomènes d'interférences se produisant lors de la superposition de fonctions d'ondes électroniques.

Landauer a proposé à la fin des années 50 une approche de ce problème qui s'est révélée particulièrement riche et adaptée [1,2]. Il a montré que la conductance d'un fil quantique est directement liée aux propriétés de diffusion d'un tel système considéré comme un guide d'ondes perturbé par des défauts.

Depuis, de nombreux auteurs ont adopté ce modèle pour des systèmes souvent traités comme quasi-unidimensionnels, et ont mis en évidence à l'aide de méthodes numériques des phénomènes intéressants [3,4]. De plus, d'autres études [5,6] ont pour objet d'examiner les effets de l'interaction entre les états électroniques de diffusion et les états liés créés par les défauts. Celle-ci provoque l'apparition de résonance de type Fano dans les courbes de conductance en fonction de

l'énergie. Parallèlement, la diffusion des phonons ou ondes vibratoires par les défauts produisent des phénomènes analogues à ceux observés dans le cas électronique [7,8,9,10]

L'objectif de notre travail est d'apporter notre contribution à une meilleure compréhension des phénomènes vibratoires liés à la diffusion d'ondes élastiques par des défauts dans des systèmes de basses dimensions. Contrairement aux cas électroniques utilisant des méthodes quantiques en résolvant l'équation de Schrödinger, notre approche est basée sur la dynamique classique de Newton, menée dans le cadre de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins.

Nous entreprenons une étude théorique des états vibrationnelles et de la diffusion d'ondes élastiques dans des systèmes de basses dimensions avec une brisure de symétrie translationnelle suivant la direction normale à l'inhomogénéité particulièrement; nous nous intéressons aux phénomènes de diffusion par un défaut isolé constitué d'un puits atomique, et en suite par deux types de défauts étendus, le premier est constitué de deux puits atomiques séparés d'un paramètre du réseau, le deuxième est formé de deux puits atomiques espacés de deux paramètres du réseau.

L'existence de défaut provoque une brisure de symétrie dans la direction normale à l'inhomogénéité, et par conséquent, l'application de formalisme basé sur les conditions aux limites de Born et Von Karman devient inapplicable, d'où la nécessité d'une méthode appropriée qui permet de limiter le nombre d'équations et d'inconnus. C'est la méthode de raccordement sur laquelle s'appuiera notre modélisation qui est associée aux fonctions de Green pour le calcul de certaines propriétés physiques comme les densités spectrales et les densités d'états.

Le premier chapitre présente les notions fondamentales de la dynamique vibrationnelle des solides cristallins ordonnés et les différentes méthodes théoriques qui sont utilisés pour l'étude des systèmes désordonnés.

Le chapitre deux traite la dynamique vibrationnelle d'un guide d'onde parfait. On définit les courbes de dispersion des phonons, et leurs modes propageants et évanescent et nous introduirons les vitesses de groupe qui seront utilisées lors de la normalisation des grandeurs physiques telles que les coefficients de réflexion et de transmission.

Le chapitre trois est consacré à la diffusion des ondes vibrationnelles, la première partie est consacré au défaut isolé, nous généralisons la méthode de raccordement initialement utilisée pour l'étude des phénomènes de localisation, à l'étude de la diffusion d'ondes élastiques. Nous déterminerons les coefficients de transmission et de réflexion ainsi que la conductance du système. Par la suite, nous étudierons l'évolution des spectres en fonction de la masse des atomes défauts et des constantes de forces.

Dans la deuxième partie nous étudions le transport cohérent à travers un défaut étendu en appliquant l'approche développée dans la partie précédente. Nous montrerons que les coefficients de transmission et de réflexion dépendent étroitement des interférences entre les ondes diffusées élastiquement par le défaut. De même l'interaction entre les états localisés fait apparaître des résonances de Fano comme observé dans le transport électronique.

Au dernier chapitre, nous associons l'opérateur de Green d'une manière très compacte à la méthode de raccordement à fin de calculer les densités spectrales et les densités d'états au niveau du puits atomique.

Nous terminerons par une conclusion générale qui rappellera les principaux résultats obtenus ainsi que les perspectives offertes dans le domaine.

En fin, en annexe, sont indiqués quelques développements secondaires ainsi que la forme explicite de certaines matrices qui auraient inutilement alourdi ce travail.

RAPPELS DE DYNAMIQUE VIBRATIONNELLE

D'UN SOLIDE CRISTALLIN

Il existe beaucoup de propriétés des solides qui peuvent être décrites sur la base d'un réseau statique. Dans ce modèle, les atomes du solide constituent un réseau rigide et périodique qui n'est qu'une approximation de la configuration réelle des atomes; en effet ces derniers ne sont pas fixes à leurs positions d'équilibre mais exécutent des oscillations autour de cette position, ce sont les fluctuations thermiques dont les amplitudes et les énergies sont déterminés par la température du solide. L'origine de ces oscillations est liée au fait que les atomes ne sont pas infiniment lourds et que les forces interatomiques ne sont pas infiniment fortes.

Dans la première partie de ce chapitre nous rappelons brièvement quelques notions de base de la dynamique vibrationnelle dans les solides ordonnés. Dans la deuxième partie nous exposons les différentes méthodes qui sont développées pour l'étude des systèmes désordonnés.

1-1-Dynamique vibrationnelle des solides ordonnés

Considérons une cellule de N atomes appartenant à un solide infini à laquelle nous appliquons les conditions aux limites périodiques de Born et Von Karman. Le solide peut alors être considéré comme une succession infinie de cellules contenant N atomes soient $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, trois vecteurs formant une base, la position d'équilibre $\vec{X}(l)$ de la cellule élémentaire s'écrit alors :

$$\vec{X}(l) = l_1 \vec{a} + l_2 \vec{b} + l_3 \vec{c} \quad (1.1)$$

Sous l'action des fluctuations thermiques, les atomes ne restent pas sur une position fixe, nous désignerons par $\vec{u}(l, t)$, les déplacements induits par l'agitation thermique de l'atome l à sa position d'équilibre, t décrivant sa dépendance en temps.

Dans le cadre de l'approximation harmonique associé au modèle des forces centrales, l'équation du mouvement de l'atome l est donnée par la relation suivante : (voir annexe A)

$$m(l) \frac{d^2 u_\alpha(l, t)}{dt^2} = \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha\beta}}{r^2} \right) K(l, l') [u_\beta(l, l') - u_\beta(l', l')] \quad (1.2)$$

Dans laquelle α et β représentent des directions cartésiennes, $m(l)$ la masse de l'atome l , $u_\alpha(l, t)$ l'amplitude de sa vibration suivant la direction α , r_α , r_β sont respectivement les composantes

cartésiennes suivant α et β du vecteur $\vec{r}(l,l')$ joignant la position d'équilibre de l'atome l à l'atome l' . r est le module du vecteur $\vec{r}(l,l')$, et $K(l,l')$ la constante de force entre les atomes l et l' .

L'excitation d'un mode propre de fréquence angulaire ω au sein du solide donne lieu à des oscillations régulières que l'on peut décrire par une équation de la forme suivante :

$$u_\alpha(l,t) = u_\alpha(l,\omega) e^{j\omega t} \quad (1.3)$$

ou $u_\alpha(l,\omega)$ est l'amplitude vibrationnelle de l'atome l suivant la direction cartésienne α , ainsi l'équation (1-2) de l'atome l [11] peut s'écrire :

$$-\omega^2 m(l) u_\alpha(l,\omega) = \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha\beta}}{r^2} \right) K(l,l') [u_\beta(l',\omega) - u_\beta(l,\omega)] \quad (1.4)$$

l'équation (1-4) peut être écrite pour les N atomes contenus dans la cellule élémentaire et selon les trois directions cartésiennes. Nous sommes alors en présence d'un système de $3N$ équations de mouvement.

Le solide illimité qui est composé d'une répétition périodique dans l'espace de blocs de N atomes, présente l'avantage de la symétrie de translation, qui avec les conditions aux limites périodiques permet de réduire le champs des déplacements. En effet, du fait de la périodicité spatiale du réseau cristallin, deux atomes l et l' occupant deux sites équivalentes du réseau effectuent à une phase près les mêmes mouvements vibrationnels. Par conséquent, leurs amplitudes de vibration vérifient à chaque instant la relation suivante :

$$\vec{u}(l',\omega) = \vec{u}(l,\omega) e^{j\vec{q}\vec{r}(l,l')} \quad (1.5)$$

ou \vec{q} est un vecteur d'onde du réseau réciproque du cristal.

La relation (1.5) permet de réduire le système d'équations (1.4) à un système de $3N$ équations homogènes à $3N$ inconnues.

Les systèmes établis à partir des équations du type (1.4) peuvent alors s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$(\omega^2 \mathbf{I} - D(\vec{q})) \mathbf{u} = 0 \quad (1.6)$$

$D(q)$ est la matrice dynamique ($3N \times 3N$) pour chaque donnée q , dont les éléments dépendent généralement des constantes de force entre les différents atomes.

I est la matrice identité d'ordre $3N$, et $|u\rangle$ le vecteur propre de déplacement à $3N$ composantes.

pour que le système (1-6) ait des solutions en ω^2 non triviales, il faut que :

$$\det[\omega^2 I - D(q)] = 0 \quad (1.7)$$

Ainsi grâce à la condition de compatibilité du système (1.6) qui fournit une équation algébrique en ω^2 , on peut déterminer les différents modes de vibration du solide en affectant à chaque vecteur d'onde \vec{q} de la première zone de Brillouin, les $3N$ solutions, telles que $\omega_s \geq 0$ avec $s = 1, 2, \dots, 3N$ numérote les différents branches de dispersion et N désigne le nombre d'atomes dans la maille élémentaire du réseau.

1-2 Dynamique vibrationnelle des solides désordonnés

Les ondes élastiques ou vibrationnelles des systèmes de basses dimensions ont fait l'objet d'un intérêt théorique et expérimental croissant depuis la fin du 19^{ème} siècle. Les premières études remontent à 1887 lorsque Lord Rayleigh discuta de la présence d'ondes localisées pouvant se propager dans des directions parallèles à la surface pour des milieux isotropes et élastiques.

Ces excitations ont été identifiées comme des ondes de surfaces car elles sont caractérisées par une décroissance exponentielle de leur amplitude depuis la surface vers le volume et par la relation de proportionnalité entre la fréquence et le vecteur d'onde. Jusqu'au milieu des années soixante, les applications principales de ces ondes de surface étaient orientées vers l'étude des ondes sismiques se propageant dans la croûte terrestre.

L'étude de la dynamique vibrationnelle de surface a fait l'objet d'intérêt théorique et expérimental croissant et a connu un essor important ces dernières années, cependant le formalisme de la section précédente (1-1) basée sur les conditions aux limites de Born et Von Karman, s'applique seulement à un système périodique. Or en ce qui concerne l'étude des modes vibrationnelles des systèmes de basses dimensions, l'absence de symétrie de translation suivant la direction normale au défaut ne permet pas l'application du théorème de Bloch dans cette direction. Autrement dit, la brisure de symétrie suivant une direction rend difficile la résolution des systèmes d'équations des mouvements vibratoires d'un solide semi-fini. D'où la nécessité d'utiliser de nouvelles méthodes de calcul qui permettent de limiter dans une approximation valable le nombre

d'équations et d'inconnus au niveau du défaut. Nous citons comme exemple la méthode de diagonalisation directe appelée aussi slab méthode, la méthode des fonctions de Green et la méthode de raccordement. C'est sur cette dernière que s'appuiera notre modélisation pour l'étude de la diffusion d'ondes élastiques par des défauts dans des guides d'ondes cristallographiques de basses dimensions. Notons que les méthodes citées ci-dessus sont souvent associées aux fonctions de Green.

1-2-1-La méthode de diagonalisation directe

Introduite dans sa formulation générale par Clark en 1965, sa première application à un système physique a été réalisée par Allen. Il s'est particulièrement intéressé aux modes de surface d'un réseau cubique à faces centrées et aux effets induits par une couche absorbée [12]. Durant les vingt dernières années, cette méthode est apparue comme pratique et puissante pour étudier la dynamique vibrationnelle aussi bien pour les surfaces planes que pour les surfaces vicinales [13,14].

La méthode de diagonalisation directe consiste à limiter les systèmes étudiés à un nombre fini de plans atomiques, dans la direction Z par exemple avec une extension infinie dans les deux autres directions X et Y . en outre le nombre de plans utilisés pour la modélisation doit être suffisamment grand afin de garantir l'existence d'une région dite de volume au centre du système. Il reste alors à écrire les équations de mouvements des atomes appartenant à une cellule unitaire pour en déduire la matrice dynamique.

La résolution numérique de cette matrice détermine les vecteurs et les valeurs propres. Ce qui permet ensuite la détermination des courbes de dispersion, des densités spectrales et des vecteurs déplacements des atomes. Néanmoins cette méthode présente l'inconvénient d'utiliser des matrices de taille importante qui augmente les temps de calcul lors des simulations numériques.

1-2-2-Méthode des fonctions de Green

Cette technique qui permet d'étudier la dynamique des systèmes perturbés a été appliquée pour la première fois à la physique de l'état solide par Lifshitz, Koster et Slater.

Durant ces vingt dernières années, cette méthode a été la plus utilisée pour l'étude de la dynamique vibrationnelle des systèmes réels, avec quelques variantes dans leur formalisme mathématique [15,16,17,18,19,20,21].

Cette méthode consiste à créer un réseau semi infini à partir d'un réseau illimité en annulant les interactions entre les atomes situés de part et d'autres d'un plan bissecteur de deux plans atomiques consécutifs.

L'effet de cette modification sur la dynamique vibrationnelle du système est considéré comme une perturbation qui transforme la matrice dynamique D du système illimité en une matrice D_p qui s'écrit sous la forme :

$$D_p = D + P \quad (1.8)$$

Où P représente la matrice de perturbation

Soit $G(\omega^2)$ la matrice des fonctions de Green définie par :

$$G(\omega^2) = [\omega^2 I - D]^{-1} \quad (1.9)$$

Où I est la matrice identité .

Son équivalent $G_p(\omega^2)$ pour le système perturbé s'écrit :

$$G_p(\omega^2) = [\omega^2 I - (D + P)]^{-1} .$$

$$G_p(\omega^2) = \left[(\omega^2 I - D) \left(I - \frac{P}{\omega^2 I - D} \right) \right]^{-1}$$

$$\Rightarrow G_p(\omega^2) = [(\omega^2 I - D) \{ I - G(\omega^2) P \}]^{-1}$$

D'où la relation matricielle :

$$G_p(\omega^2) = [I - G(\omega^2) P]^{-1} G(\omega^2) \quad (1.10)$$

L'ensemble des états vibrationnels du système perturbé est alors donné par les pôles de la fonction $G_p(\omega^2)$. Ils permettent en général d'interpréter les changements causés par le défaut sur les spectres de vibration.

I-2-3- Méthode de raccordement

Cette méthode a été introduite pour la première fois par Feuchtwang [23] lors d'une étude de l'équilibre de la structure statique d'un réseau cristallin semi-infini à trois dimensions. Elle a été reprise en 1987 par Szeftel et Khater dans deux articles [24] et [25]. Le premier étant un développement du formalisme mathématique utilisé et le second une application aux surfaces Ni(100) et Ni(100)+C(2×2).

Formulation de la méthode de raccordement pour le calcul des modes localisés de surface

La méthode de raccordement consiste à décrire les relations entre les mouvements atomique d'un système semi-infini par un nombre fini d'équations en divisant l'espace du solide en trois régions. Pour une surface plane qui borne un solide semi-infini, les trois régions sont les suivantes (figure 1 -1) :

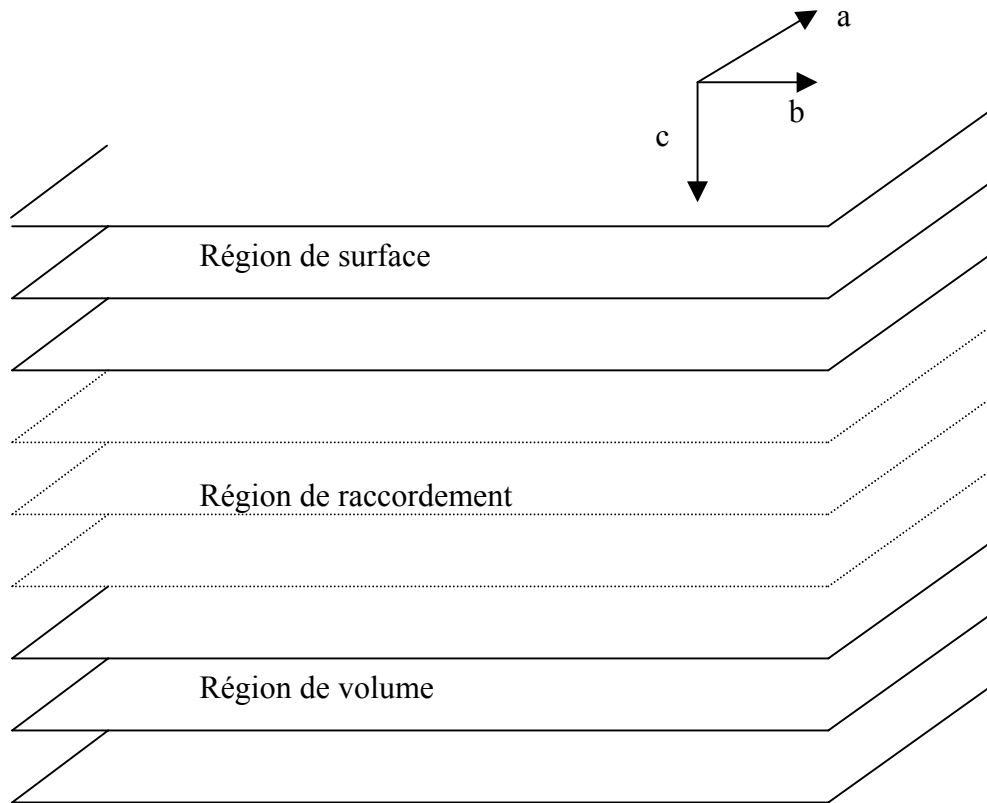


Figure1.1 :Vue schématique d'un solide cristallin semi-infin selon Le concept introduit par la méthode de raccordement.

- La région de surface :

Composée des premiers plans atomiques du système semi-infini étudié. Cette région est généralement affectée par la relaxation et la reconstruction, ce qui lui confère des paramètres structuraux spécifiques, elle a en général des propriétés vibrationnelles différentes de celles du volume.

- La région de volume :

Comporte la partie du réseau se trouvant lors de portée de tous les effets de surface. Cette région est caractérisée par sa périodicité tridimensionnelle et permet de déterminer les courbes de dispersion en volume.

- La région de raccordement :

Composée des plans atomiques situés entre les régions de volume et de surface. Elle permet dans la modélisation théorique proposée de raccorder analytiquement les modes de surface avec les états vibrationnels évanescents qui sont intrinsèques et caractéristiques à la région de volume.

Compte tenu de la brisure de symétrie dans la direction normale au défaut, la relation pour les déplacements dans la direction cartésienne α , entre d'une part un atome l appartenant à un plan P et d'autre part, un atome l' appartenant à un plan P' tous deux parallèles au défaut mais se trouvant dans la région de volume, vérifient la relation suivante :

$$u_{\alpha}(l', p', \omega) = u_{\alpha}(l, p, \omega) Z^{(p' - p)} e^{j \vec{q} \vec{r}(l, l')} \quad (1.11)$$

ou Z est un facteur de phase inconnu, normal au défaut, tel que $|Z| < 1$; \vec{q} est dans la première zone de Brillouin, et $\alpha \in \{x, y, z\}$.

En insérant l'équation (1.11) dans les équations de mouvements (1-4), on obtient un système d'équations clos pour les déplacements $|u\rangle = |u_{\alpha}(l, \omega)\rangle$ des sites atomiques d'une maille élémentaire dans le volume; qui peuvent analytiquement s'écrire ainsi :

$$\omega^2 m(l) u_{\alpha}(l, \omega) + \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} \right) K(l, l') u_{\beta}(l', \omega) \left[Z^{(p' - p)} e^{j \vec{q} \vec{r}(l, l')} - 1 \right] = 0 \quad (1.12)$$

ou sous forme matricielle suivante :

$$(\omega^2 \mathbf{I} - D(\vec{q}, Z)) |u\rangle = 0 \quad (1.13)$$

La condition de compatibilité de ce système donne accès pour chaque donnée (\vec{q}, ω) à une équation séculaire en Z dont les solutions caractérisent les différents modes en volume suivant la direction normale au défaut.

Les solutions telles que $|Z| = 1$ sont des modes itinérants et celles vérifiant $|Z| < 1$ correspondent à des modes évanescents depuis le défaut vers le volume.

La détermination des états localisés d'une surface plane sans défaut d'un réseau semi-infini, commence dans un premier temps par le calcul de ces modes évanescents dans tout le domaine (\vec{q}, ω) . Puis nous déterminons les équations de mouvement (1.4) pour les sites représentatifs des

trois régions. Ceci nous conduit naturellement à un système matriciel E rectangulaire ou le nombre d'équations est plus petit que le nombre de déplacements inconnus.

A fin de pouvoir résoudre ce système, on peut réduire le nombre de variables pour en déduire un système d'équations homogènes. Ainsi, on décrit pour chaque donnée (\vec{q}, ω) les déplacements atomiques par des ondes évanescentes exprimées comme une combinaison linéaire sur les n modes vibrationnels de volume suivant la direction normale à la surface. Ces n modes correspondent aux n racines Z satisfaisant la condition $|Z| < 1$. La relation suivante fait état de raccordement

$$u_\alpha(\ell, \omega) = \sum_{i=1}^n A(\alpha, Z_i) Z_i^{P-P_s} R_i \quad (1.14)$$

- P représente la troisième coordonnée de l'atome l considéré.
- P_s représente la troisième coordonnée de l'atome de surface.
- α parcourt les trois directions cartésiennes x, y, z .
- n est le nombre de modes évanescents.
- R_i est un vecteur unitaire qui caractérise le mode évanescent i dans la base $\{R\}$.
- Z_i le facteur de phase du mode évanescent i de la matrice dynamique dans le volume.
- $A(\alpha, Z_i)$ représente le poids pondéré associé à la contribution du i -ème mode évanescent dans la direction cartésienne α .

La connaissance simultanée des facteurs de phase Z_i caractérisant les modes évanescents, ainsi que les poids pondérés $A(\alpha, Z_i)$, tous deux issus de l'étude en volume nous permet alors de définir la matrice de raccordement R à l'aide des développements (1.14).

Le produit des matrices E et R ainsi défini nous conduit alors à une matrice carrée S caractérisant le système d'équations homogènes pour le quel les solutions non triviales nous conduisent à :

$$\det(S(\vec{q}, Z)) = 0 \quad (1.15)$$

Et aboutit donc à la détermination des modes vibrationnels au voisinage de la surface. Ainsi, il est alors possible de calculer les courbes de dispersion des états localisés.

Dynamique vibrationnelle d'un guide d'onde parfait

2.1 introduction

La surface joue un rôle important dans les échanges du système avec le milieu extérieur, c'est par son intermédiaire que se fait l'interaction et le contact avec son environnement. De plus, elle a une grande influence sur les propriétés physiques du solide. Beaucoup d'applications pratiques des matériaux dépendent de leurs surfaces. Leur étude dynamique peut par ailleurs, conduire à une meilleure connaissance de leurs caractéristiques et constituer ainsi un moyen de contrôle de fabrication fiable de composants électronique, mécaniques ou optiques.

Le problème que nous avons à résoudre consiste à l'étude de la diffusion d'ondes vibratoires dans un cristal comportant des défauts. Pour cela nous devons d'abord analyser le comportement d'une onde qui se propage à travers un réseau parfait.

Notre modèle est assimilé à deux plans infinis d'atomes superposés l'un par rapport à l'autre qui représentent un guide d'onde parfait. Notre étude est réalisée dans le cadre de l'approximation harmonique limité aux premiers et seconds voisins.

Dans cette partie nous déterminons la matrice dynamique du réseau parfait et nous étudierons la dispersion des ondes par ce réseau. Nous déterminons aussi les facteurs de phase associés à chaque mode en utilisant la méthode d'augmentation de base, nous nous intéresserons à la détermination des vitesses de groupe en utilisant une méthode dite perturbative.

2.2- dynamique vibrationnelle d'un plan double

Le système modèle est un cristal formé de deux plans infinis horizontaux d'atomes identiques de masse m et des constantes de forces K_1 et K_2 pour les premiers et seconds voisins.

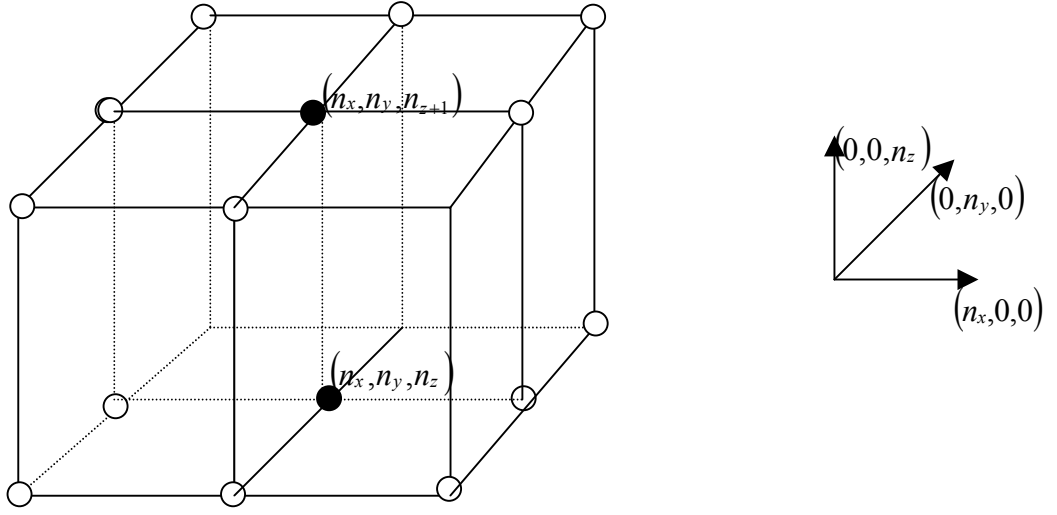


Figure 2.1 : Représentation de deux atomes avec leurs proche voisins dans deux plans infinis

Dans la figure (2.1), les atomes sont repérés par trois indices (n_x, n_y, n_z) dans l'espace cartésien. On écrit les équations de mouvement des atomes désignés en noir sur la figure. D'après l'équation (1.4), les mouvements atomiques des sites (n_x, n_y, n_z) et (n_x, n_y, n_z+1) sont les suivantes :

pour l'atome (n_x, n_y, n_z) :

déplacement suivant OX :

$$\begin{aligned}
 & [\Omega^2 - 2 - 3r_2 + (Z + Z^{-1})(1 + r_2 \cos \varphi_y)] u_x(n_x, n_y, n_z) + \left(\frac{r_2}{2}\right) (Z + Z^{-1}) u_x(n_x, n_y, n_{z+1}) \\
 & + ir_2 (Z - Z^{-1}) \sin \varphi_y u_y(n_x, n_y, n_z) + \left(\frac{r_2}{2}\right) (Z - Z^{-1}) u_z(n_x, n_y, n_{z+1}) = 0
 \end{aligned} \tag{2.1.a}$$

déplacement suivant OY :

$$\begin{aligned}
 & [\Omega^2 - 2 - 3r_2 + (r_2 (Z + Z^{-1}) + 2) \cos \varphi_y] u_y(n_x, n_y, n_z) + r_2 \cos \varphi_y u_y(n_x, n_y, n_{z+1}) \\
 & + ir_2 (Z - Z^{-1}) \sin \varphi_y u_x(n_x, n_y, n_z) + ir_2 \sin \varphi_y u_z(n_x, n_y, n_{z+1}) = 0
 \end{aligned} \tag{2.1.b}$$

déplacement suivant OZ :

$$\begin{aligned}
& [\Omega^2 - 1 - 2r_2] u_z(n_x, n_y, n_z) + \left[\left(\frac{r_2}{2} \right) (Z + Z^{-1}) + 1 + r_2 \cos \varphi_y \right] u_z(n_x, n_y, n_{z+1}) \\
& + \left(\frac{r_2}{2} \right) (Z + Z^{-1}) u_x(n_x, n_y, n_{z+1}) + i r_2 \sin \varphi_y u_y(n_x, n_y, n_{z+1}) = 0
\end{aligned} \tag{2.1.c}$$

pour l'atome (n_x, n_y, n_{z+1}) :

déplacement suivant OX :

$$\begin{aligned}
& [\Omega^2 - 2 - 3r_2 + (Z + Z^{-1})(1 + r_2 \cos \varphi_y)] u_x(n_x, n_y, n_{z+1}) + \left(\frac{r_2}{2} \right) (Z + Z^{-1}) u_x(n_x, n_y, n_z) \\
& + i r_2 (Z - Z^{-1}) \sin \varphi_y u_y(n_x, n_y, n_z) - \left(\frac{r_2}{2} \right) (Z - Z^{-1}) u_z(n_x, n_y, n_z) = 0
\end{aligned} \tag{2.2.a}$$

déplacement suivant OY :

$$\begin{aligned}
& [\Omega^2 - 2 - 3r_2 + (r_2 (Z + Z^{-1}) + 2) \cos \varphi_y] u_y(n_x, n_y, n_{z+1}) + r_2 \cos \varphi_y u_y(n_x, n_y, n_z) \\
& + i r_2 (Z - Z^{-1}) \sin \varphi_y u_x(n_x, n_y, n_z) - i r_2 \sin \varphi_y u_z(n_x, n_y, n_z) = 0
\end{aligned} \tag{2.2.b}$$

déplacement suivant OZ :

$$\begin{aligned}
& [\Omega^2 - 1 - 2r_2] u_z(n_x, n_y, n_{z+1}) + \left[\left(\frac{r_2}{2} \right) (Z + Z^{-1}) + 1 + r_2 \cos \varphi_y \right] u_z(n_x, n_y, n_z) \\
& - \left(\frac{r_2}{2} \right) (Z + Z^{-1}) u_x(n_x, n_y, n_z) + i r_2 \sin \varphi_y u_y(n_x, n_y, n_z) = 0
\end{aligned} \tag{2.2.c}$$

on pose :

$$u(n_{x+1}, n_y, n_z) = Z u(n_x, n_y, n_z) \quad \text{avec} \quad Z = e^{iq_x a}$$

Z est le facteur de phase satisfaisant la condition de propagation ou d'évanescence suivant l'axe des x .

$$u(n_x, n_{y+1}, n_y) = e^{iq_y a} u(n_x, n_y, n_z) = e^{iq_y} u(n_x, n_y, n_z)$$

φ_y : est le facteur de phase suivant la direction y

\vec{q} : étant un vecteur d'onde du réseau réciproque

a : est la distance inter atomique entre premiers et seconds voisins.

$\Omega^2 = \frac{m\omega^2}{K_1}$ est la fréquence normalisée.

$r_2 = \frac{K_2}{K_1}$ le rapport entre les constantes de force des deuxièmes et premiers voisins.

les équations précédentes peuvent être résumées sous la forme matricielle suivante :

$$[\Omega^2 I - D(\varphi_y, Z, r_2)]|u\rangle = 0 \quad (2.3)$$

avec :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} u_x(n_x, n_y, n_z) \\ u_y(n_x, n_y, n_z) \\ u_z(n_x, n_y, n_z) \\ u_x(n_x, n_y, n_{z+1}) \\ u_y(n_x, n_y, n_{z+1}) \\ u_z(n_x, n_y, n_{z+1}) \end{bmatrix}$$

$$D(\varphi_y, Z, r_2) = \begin{bmatrix} D_1 & D_4 & 0 & D_5 & 0 & D_6 \\ D_4 & D_2 & 0 & 0 & D_7 & D_8 \\ 0 & 0 & D_3 & D_6 & D_8 & D_9 \\ D_5 & 0 & -D_6 & D_1 & D_4 & 0 \\ 0 & D_7 & -D_8 & D_4 & D_2 & 0 \\ -D_6 & -D_8 & D_9 & 0 & 0 & D_3 \end{bmatrix}$$

$$D_1 = 2 + 3r_2 - (Z + Z^{-1})(1 + r_2 \cos\varphi_y)$$

$$D_2 = 2 + 3r_2 - [2 + r_2 (Z + Z^{-1})] \cos\varphi_y.$$

$$D_3 = 1 + 2r_2.$$

$$D_4 = -ir_2 (Z - Z^{-1}) \sin\varphi_y.$$

$$D_5 = -\frac{r_2}{2}(Z+Z^{-1}).$$

$$D_6 = -\frac{r_2}{2}(Z-Z^{-1}).$$

$$D_7 = -r_2 \cos\varphi_y.$$

$$D_8 = -ir_2 \sin\varphi_y.$$

$$D_9 = -1-r_2 \cos\varphi_y - \frac{r_2}{2}(Z+Z^{-1}).$$

Les solutions non triviales du système formé par les équations (2.1), (2.2) mis sous forme matricielle nous conduisent à la résolution de l'équation suivante :

$$\det[\Omega^2 \mathbf{I} - D(\varphi_y, r_2, Z)] = 0 \quad (2.4)$$

Les valeurs propres de la matrice dynamique du système des deux plans représentés par la figure (2.1) nous permet de représenter les courbes de dispersions en fonction de φ_x . Pour ce modèle il y a deux atomes qui vibrent dans trois directions (n_x, n_y, n_z) , donc on a six modes de vibrations.

2.3- courbes de dispersion

A φ_x fixé, la résolution du problème au valeur propre de la matrice D donne 6 fréquences propres Ω ainsi que les vecteurs propres \vec{u} correspondants. Lorsque le facteur de phase Z parcourt le cercle unité dans le plan complexe ; ou autrement dit, lorsque le vecteur d'onde \vec{q} parcourt la première zone de Brillouin $[-\pi, \pi]$, on obtient les relations de dispersion pour ces différents modes propres.

On note que ces courbes sont symétriques par rapport à l'origine et que leurs dépendance en fonction de φ_x n'est pas linéaire, ce qui exprime que le système est dispersif. Mis à part cette symétrie, tout dans ces courbes donne une impression de complexité : elles n'ont en particulier pas d'expression analytique simple (au sens d'utilisable pratiquement) . Ce qui limite dramatiquement les possibilités de développements analytiques dans la suite de ce travail. De fait, seules les approches numériques nous ont permis d'avoir accès au phénomènes que nous décrivons plus loin.

Les branches des relations de dispersion se divisent en deux groupes en fonction de leur comportement dans la limite $q \rightarrow 0$, il y a celles dont la fréquence tend vers zéro, et les autres. Nous les appellerons respectivement modes acoustiques et optiques.

La figure (2.2) représente les 6 modes propres de vibration.

2.4- Vitesse de groupe

La vitesse de groupe des phonons correspond à la vitesse du paquet d'ondes donc à celui du transport de l'énergie elle est définie par la dérivée :

$$v_v = \frac{\partial \Omega_v}{\partial q}$$

Qui correspond à la pente des courbes de dispersion. Or on constate que ces courbes ont des régions de pente nulle ou négative. Cela signifie que, dans certains cas, des ondes propagatees deviennent stationnaires ou inversent leur sens de propagation quant on modifie leur vecteur d'onde q . L'annexe B décrit la méthode choisie, basée sur la théorie standard des perturbations utilisée également en mécanique quantique.

La figure (2.3) donne l'allure de la vitesse de groupe v_g dans les différents modes en fonction de la fréquence normalisée Ω . Notons que l'étendue de chacune des plages où la vitesse $v_g \neq 0$ se rapporte bien à celle des modes propagatees.

2.5- Modes atténués

2.5.1- calcul des facteurs de phase :

Les relations de dispersion $\Omega(\vec{q})$ telles que nous les avons calculées jusqu'ici n'ont pas la forme convenable pour le problème qui nous intéresse, à savoir la diffusion des modes de vibration par des défauts. En effet lors d'un tel processus, ce n'est pas le vecteur d'onde \vec{q} qui est conservé mais la fréquence. En d'autres termes, les défauts couplent les différents modes à fréquence constante. Il faut donc inverser le problème et prendre Ω comme variable indépendante. On doit considérer non seulement les modes propagatees mais tenir compte aussi des modes évanescents du système, donc pour chaque fréquence Ω donnée, on doit prendre toutes les solutions $|Z| \leq 1$. Pour cela deux méthodes de calcul peuvent être utilisées. Les solutions s'obtiennent en utilisant la méthode du déterminant où la méthode d'augmentation de base [26], dans ce travail nous nous basons sur la deuxième méthode.

2.5.1a-méthode du déterminant :

Elle consiste à déterminer les racines caractéristiques du système d'équations linéaire (2.3), pour le quel une solution non triviale requiert que son déterminant soit nul il peut alors s'exprimer par le polynôme caractéristique de degré douze en Z suivant :

$$\sum_{n=1}^{12} A_n(\Omega, \Phi_y, r_2) Z^n = 0$$

La symétrie du problème en volume et la nature hermitienne de la matrice dynamique impose que si Z est solution Z^{-1} l'est aussi. A_n avec $n \in [0, 12]$ sont des fonctions des paramètres du système Ω , Φ_y , r_2 .

2.5.1b Méthode d'augmentation de base :

Qui consiste à réécrire l'équation (2.3) en introduisant de nouvelles variables $\vec{v}_{i\alpha}$ et les équations qui les définissent:

$$\vec{v}_{i\alpha} = -\frac{1}{Z} \vec{u}_{i\alpha} \quad (2.5)$$

On obtient ainsi un système linéarisé contenant deux fois plus d'équations que le système original:

$$A\vec{W} = Z B \vec{W} \quad (2.6)$$

A et B sont des matrices (12×12), données de façon explicite en annexe (C1) tandis que \vec{W} est un vecteur défini par :

$$\vec{W} = \begin{pmatrix} \vec{u} \\ \vec{v} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

en résolvant le système (2.6), on obtient pour chaque fréquence ω 12 valeurs propres $\left\{ Z, \frac{1}{Z} \right\}$ et les vecteurs propres correspondants, en vertu de la définition (2.5), les composantes \vec{u} de \vec{W} suffisent pour décrire les déplacements des atomes; nous ne parlerons donc plus des variables \vec{v} .

2.5.2- Tri des valeurs propres :

Les valeurs propres Z sont complexes ou réelles. Elles forment des paires Z et $\frac{1}{Z}$ que nous allons trier en fonction de considérations physiques.

Commençons par les Z complexes de norme 1. Les vecteurs d'onde \vec{q} sont dans ce cas réels. On retrouve ici les couples (Ω, \vec{q}) déjà obtenus en résolvant le problème du guide d'onde dans l'autre sens, soit les modes de vibration propageants. Le sens de propagation est donné par le signe de la vitesse de groupe. Grâce à la parité des relations de dispersion, nous pourrions ainsi choisir, à chaque fréquence de chaque branche, une onde se propageant de gauche à droite.

Pour les Z , réels ou complexes, dont la norme est différente de un, le critère de choix entre les deux termes de la part Z et $\frac{1}{Z}$ est moins arbitraire. En effet une des solutions correspond à une onde atténuée, tandis que l'autre mode diverge en fonction de x . La physique impose évidemment de ne considérer que le mode atténué, identifié par la condition $|Z| < 1$

2.5.3 Facteurs de phase obtenus :

La figure (2.4) représente l'évolution du module des facteurs de phase en fonction de la fréquence Ω . On constate que pour les modes propageants le module de Z est constant et égal à 1 dans le cas des six modes respectivement. En dehors des plages propageantes les modes sont évanescents et les modules des facteurs de phase deviennent inférieurs à 1 et subissent une décroissance exponentielle.

Sur La figure (2.5) sont représentés les facteurs de phase en fonction de la fréquence Ω $\Omega(imagZ, reel Z)$ à trois dimensions. On constate que lorsque les modes sont propageants, Ω évolue sur un cercle de rayon unité, alors que pour les modes évanescents la fréquence quitte le cercle de rayon unité, et les facteurs de phase deviennent réels tendant vers zéro quand Ω tend vers l'infini.

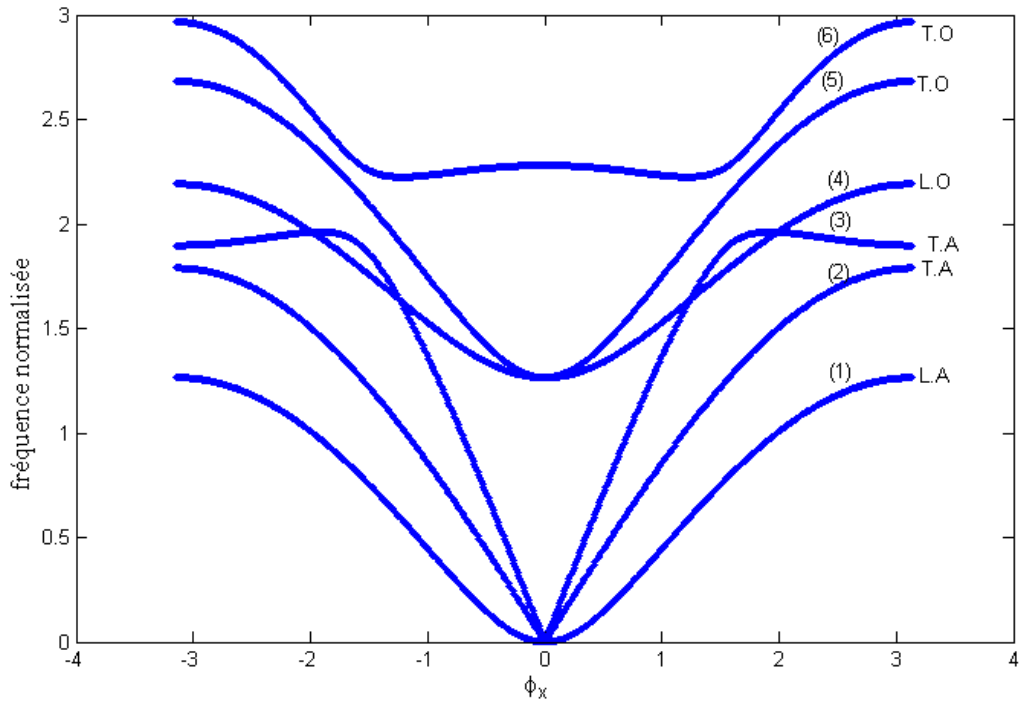


Figure 2.2.: Courbes de dispersion des phonons
des deux plans infinis pour $r_2 = 0.8$, $\varphi_y = 0$.

- TA mode transversal acoustique
- LA mode longitudinal acoustique
- TO mode transversal optique
- LO mode longitudinal optique

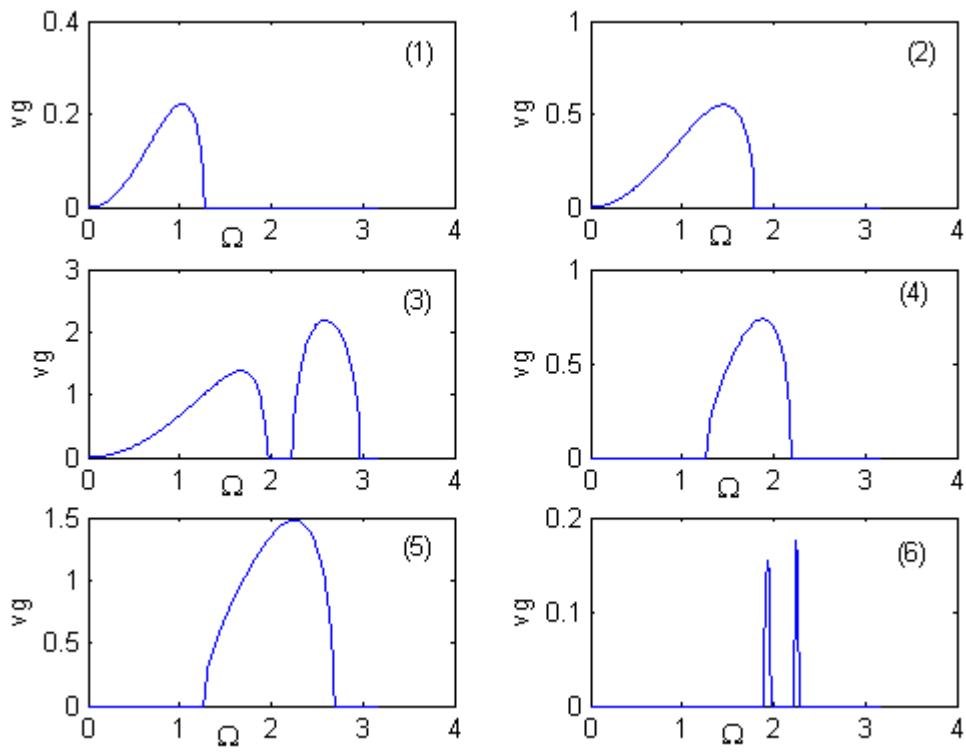


Figure 2.3 : vitesses de groupe des 6 modes de vibration
en fonction de Ω pour $r_2 = 0.8$, $\varphi_y = 0$

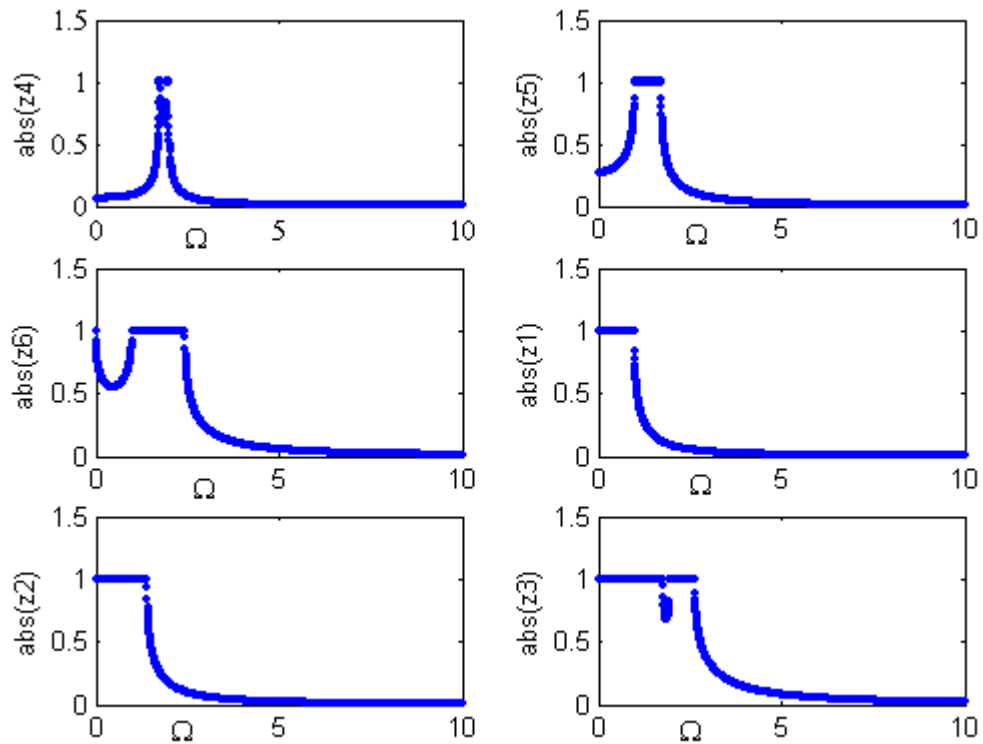


Figure 2.4. : Représentation des modules des facteurs de
phase en fonction de Ω pour $r_2 = 0.5$, $\varphi_y = 0$

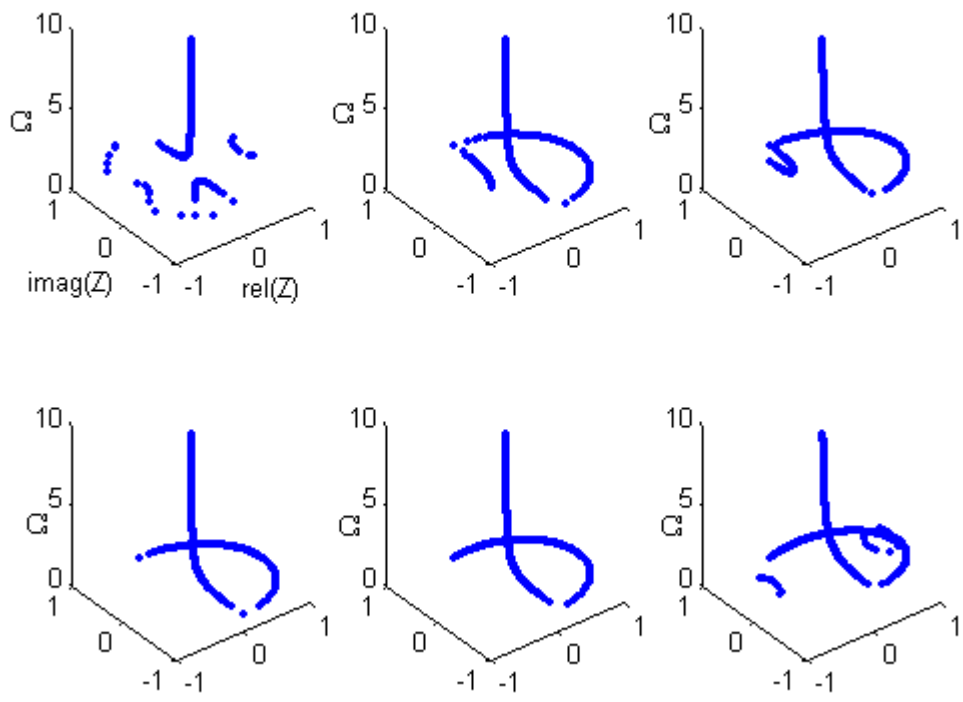


Figure 2.5: Courbes de dispersion $\Omega(Z)$ à trois dimensions pour $r_2 = 0.5$, $\varphi_y = 0$

Diffusion d'ondes élastiques par des défauts implantés dans un guide d'onde parfait

introduction

Les études concernant les systèmes de basses dimensions sont un domaine de recherche en pleine expansion sur le double plan théorique et expérimental, ainsi les chercheurs s'investissent davantage dans ce domaine. Il ya essentiellement deux motivations principales pour l'intérêt accordé à ces systèmes mésoscopiques désordonnés, la première est leurs applications de plus en plus nombreuses comme composants dans la technologie de pointe : la micro-électronique, l'aéronautique et l'optoélectronique. La seconde est le développement des formalismes appropriés pour décrire l'effet des défauts sur les propriétés de localisation et de diffusion.

Le présent chapitre est consacré à l'étude de l'effet de défaut sur les propriétés de diffusion d'ondes élastiques dans les systèmes de basses dimensions. Cette étude sera menée dans un cas simple de l'approximation harmonique des forces centrales et de l'interaction entre premiers et seconds voisins.

La méthode de calcul utilisée est la méthode de raccordement développée initialement pour l'étude des phénomènes de localisation que nous adaptons aux calculs des propriétés de transport cohérent dans les systèmes de basses dimensions. En étudiant le phénomène de diffusion d'ondes élastiques [27,28]. Et ce en s'appuyant sur l'approche développée par Antoine Khater [29,30] Cette approche dans le domaine du transport cohérent vibrationnel est semblable à l'approche développée par Landauer [31] pour le calcul de la conduction du courant électrique dans des fils quantiques.

Dans la première partie, nous appliquerons ce formalisme au cas d'un défaut isolé. Dans la deuxième partie nous l'étendrons à un autre type de défaut plus complexe.

Partie 1 : diffusion d'ondes élastiques par un puits atomique

3.1.1-Description du modèle

Le système modèle de basse dimension que nous introduisons dans le cadre de cette partie est un système mésoscopique illustré à partir d'un puits de hauteur monoatomique, inséré entre deux plans atomiques, le système est représenté dans la (figure 3.1.1). Cette structure simplifiée introduit une brisure de symétrie normale à la direction du puits. Néanmoins notons que ce modèle ne contient pas de substrat semi-infini.

Pour une étude détaillée de cette structure et afin d'appliquer le formalisme de raccordement, nous définirons pour cela plusieurs régions d'étude le système est composé tout d'abord d'une région de puits; la région E avec des atomes de masse m_b , une région de volume suffisamment éloignée du défaut pour avoir des propriétés du système semi-infini; région D et G avec des atomes de masse m_a . En fin il ya deux régions de raccordement qui sont définies par les sites atomiques situés entre la région de puits et la région de volume.

L'étude dynamique dans le volume pour les doubles plans a été faite au chapitre 2. Notre étude est réalisée dans le cadre de l'approximation harmonique limité aux premiers et seconds voisins, r_2 étant leur rapport pour les atomes situés loin du défaut isolé que représente le puits. De plus on suppose une modification des contraintes autour du défaut considéré, qui se caractérise par un changement homogène des constantes de forces dans cette région. Le paramètre λ évalue son ordre de grandeur ($\lambda_1 = \lambda_v = \lambda_l = \lambda_h$ et $\lambda_2 = \lambda_{vh} = \lambda_{lh} = \lambda_{lv}$).

Les rapports entre les différents constantes de forces en volume et la région perturbée sont définies comme suit :

$$r_2 = \frac{K_2}{K_1}, \quad \lambda_v = \frac{K_v}{K_1}, \quad \lambda_h = \frac{K_h}{K_1}, \quad \lambda_\ell = \frac{K_\ell}{K_1}, \quad \lambda_{v\ell} = \frac{K_{v\ell}}{K_1}, \quad \lambda_{vh} = \frac{K_{vh}}{K_1}, \quad \lambda_{\ell h} = \frac{K_{\ell h}}{K_1}$$

avec $K_v, K_h, K_l, K_\ell, K_{v\ell}, K_{vh}, K_{lh}$ constantes d'interactions entre les atomes du défaut.

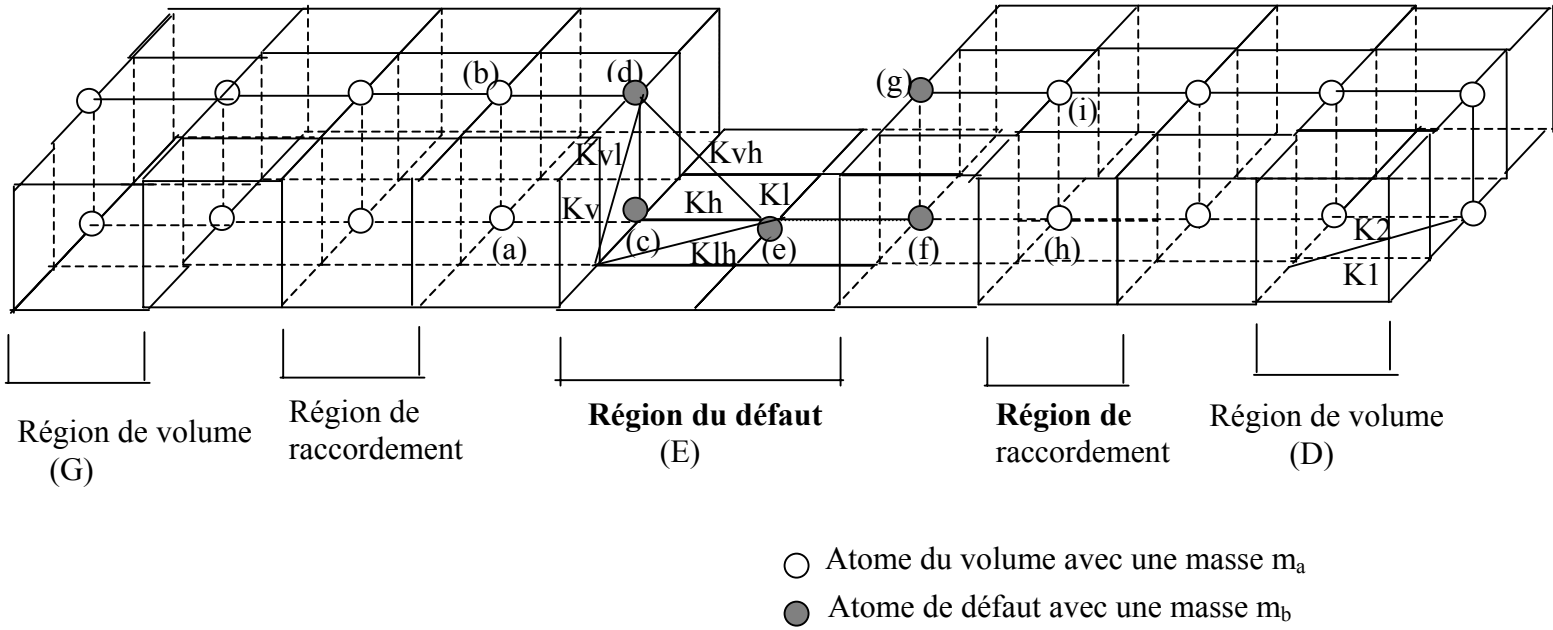
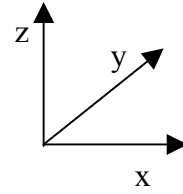


Figure 3.2.1. Schéma d'un système modèle d'un puits inséré entre deux plans atomiques superposés l'un par rapport à l'autre

3.1.2- Matrice dynamique du système

La matrice dynamique D , trouve son origine dans l'écriture des équations du mouvement des cinq atomes situés dans la zone du défaut $c(-1,0,0)$, $d(-1,0,1)$, $e(0,0,0)$, $f(1,0,0)$, $g(1,0,1)$ de la figure (3.1.1) ainsi que les atomes de raccordement $b(-2,0,1)$, $a(-2,0,0)$, $h(2,0,0)$, $i(2,0,1)$ possédant un environnement du guide d'onde parfait. La matrice correspondante à l'écriture des équations de mouvement de ces atomes, est une matrice rectangulaire D (les éléments composant cette matrice sont donnés en annexe C_2) formée de 27 lignes et 39 colonnes. Contenant plus d'inconnus que d'équations telle que :

$$[D]u=0 \tag{3.1.1}$$

avec $\dim[D] = 27 \times 39$

$\dim|u\rangle = 39 \times 1$

$\dim|0\rangle = 27 \times 1$

Où le vecteur $|u\rangle$ décrit les déplacements vibrationnels de tous les sites de la zone perturbée du système modèle.

3.1.3- Matrice de raccordement

L'objectif de cette partie, dans le cadre de notre modèle, est d'établir les relations de raccordement entre les déplacements vibrationnels des atomes appartenant au domaine de défaut et les champs vibrationnels des modes évanescents des deux guides d'ondes parfaits. Pour cela nous allons représenter les déplacements atomiques des sites appartenant à la région de raccordement par une combinaison linéaire de vecteurs $\{RT\}$ définissant un espace fini. Dans le cas présent, il y'a en effet deux régions de raccordement, c'est pourquoi nous devons définir deux bases distinctes $\{R\}$ et $\{T\}$, la première est pour la région de raccordement du double plan côté gauche du défaut et la seconde pour le double plan côté droit. Les dimensions des vecteurs unitaires $\{R\}$ et $\{T\}$ sont liés au nombre de modes évanescents obtenus lors de l'étude de la dynamique de localisation de la région de volume. Ainsi $\{R\}$ et $\{T\}$ sont de dimension 6.

Pour un atome appartenant à la région de raccordement du double plan côté droit, on peut décrire ses déplacements vibrationnels de la manière suivante [24,32,35] :

$$u'_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{j=1}^6 Z_j^{+n_x} A'(\alpha, j) T_j \quad (3.1.2)$$

Et pour un atome du double plan côté gauche :

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = \sum_{i=1}^6 Z_i^{-n_x} A(\alpha, i) R_i \quad (3.1.3)$$

Dans les quelles α représente une des trois directions cartésiennes .

$A(\alpha, i)$ et $A'(\alpha, j)$ les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres des matrices de volume [11]

Le vecteur $|u\rangle$ des déplacements atomiques des sites de la maille élémentaire de la zone de défaut (voir figure (3.1.1)) peut se décomposer en deux parties :

Le vecteur $|irr\rangle$ est constitué par les déplacements des cinq sites irréductibles formant la région du puits :

$$c(-1,0,0), d(-1,0,1), e(0,0,0), f(1,0,0), g(1,0,1)$$

le vecteur $|rac\rangle$ est formé des 24 déplacements associés aux 8 sites raccordés

$$b(-2,0,1), a(-2,0,0), h(2,0,0), i(2,0,1), \text{ ainsi que les sites voisins } (3,0,0), (3,0,1), (-3,0,0), (-3,0,1) \text{ ceci pour les deux bases } \{R\} \text{ et } \{T\}.$$

Ainsi :

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} \quad (3.1.4)$$

$$\text{Avec } \dim|irr\rangle = 15 \times 1 \text{ et } \dim|rac\rangle = 24 \times 1$$

On peut alors écrire le raccordement des atomes à l'aide des expressions suivantes :

$$\begin{aligned} |u\rangle = \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \text{Id} & 0 & 0 \\ 0 & R_1 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 \\ 0 & R_3 & 0 \\ 0 & 0 & R_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \\ &= [M_r] \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

$$R_1 = \begin{bmatrix} Z_1^2 A'(1,1) & Z_2^2 A'(1,2) & Z_3^2 A'(1,3) & Z_4^2 A'(1,4) & Z_5^2 A'(1,5) & Z_6^2 A'(1,6) \\ Z_1^2 A'(2,1) & Z_2^2 A'(2,2) & Z_3^2 A'(2,3) & Z_4^2 A'(2,4) & Z_5^2 A'(2,5) & Z_6^2 A'(2,6) \\ Z_1^2 A'(3,1) & Z_2^2 A'(3,2) & Z_3^2 A'(3,3) & Z_4^2 A'(3,4) & Z_5^2 A'(3,5) & Z_6^2 A'(3,6) \\ Z_1^2 A'(4,1) & Z_2^2 A'(4,2) & Z_3^2 A'(4,3) & Z_4^2 A'(4,4) & Z_5^2 A'(4,5) & Z_6^2 A'(4,6) \\ Z_1^2 A'(5,1) & Z_2^2 A'(5,2) & Z_3^2 A'(5,3) & Z_4^2 A'(5,4) & Z_5^2 A'(5,5) & Z_6^2 A'(5,6) \\ Z_1^2 A'(6,1) & Z_2^2 A'(6,2) & Z_3^2 A'(6,3) & Z_4^2 A'(6,4) & Z_5^2 A'(6,5) & Z_6^2 A'(6,6) \end{bmatrix}$$

$$R_2 = \begin{bmatrix} Z_1^2 A(1,1) & Z_2^2 A(1,2) & Z_3^2 A(1,3) & Z_4^2 A(1,4) & Z_5^2 A(1,5) & Z_6^2 A(1,6) \\ Z_1^2 A(2,1) & Z_2^2 A(2,2) & Z_3^2 A(2,3) & Z_4^2 A(2,4) & Z_5^2 A(2,5) & Z_6^2 A(2,6) \\ Z_1^2 A(3,1) & Z_2^2 A(3,2) & Z_3^2 A(3,3) & Z_4^2 A(3,4) & Z_5^2 A(3,5) & Z_6^2 A(3,6) \\ Z_1^2 A(4,1) & Z_2^2 A(4,2) & Z_3^2 A(4,3) & Z_4^2 A(4,4) & Z_5^2 A(4,5) & Z_6^2 A(4,6) \\ Z_1^2 A(5,1) & Z_2^2 A(5,2) & Z_3^2 A(5,3) & Z_4^2 A(5,4) & Z_5^2 A(5,5) & Z_6^2 A(5,6) \\ Z_1^2 A(6,1) & Z_2^2 A(6,2) & Z_3^2 A(6,3) & Z_4^2 A(6,4) & Z_5^2 A(6,5) & Z_6^2 A(6,6) \end{bmatrix}$$

$$R_3 = \begin{bmatrix} Z_1^3 A'(1,1) & Z_2^3 A'(1,2) & Z_3^3 A'(1,3) & Z_4^3 A'(1,4) & Z_5^3 A'(1,5) & Z_6^3 A'(1,6) \\ Z_1^3 A'(2,1) & Z_2^3 A'(2,2) & Z_3^3 A'(2,3) & Z_4^3 A'(2,4) & Z_5^3 A'(2,5) & Z_6^3 A'(2,6) \\ Z_1^3 A'(3,1) & Z_2^3 A'(3,2) & Z_3^3 A'(3,3) & Z_4^3 A'(3,4) & Z_5^3 A'(3,5) & Z_6^3 A'(3,6) \\ Z_1^3 A'(4,1) & Z_2^3 A'(4,2) & Z_3^3 A'(4,3) & Z_4^3 A'(4,4) & Z_5^3 A'(4,5) & Z_6^3 A'(4,6) \\ Z_1^3 A'(5,1) & Z_2^3 A'(5,2) & Z_3^3 A'(5,3) & Z_4^3 A'(5,4) & Z_5^3 A'(5,5) & Z_6^3 A'(5,6) \\ Z_1^3 A'(6,1) & Z_2^3 A'(6,2) & Z_3^3 A'(6,3) & Z_4^3 A'(6,4) & Z_5^3 A'(6,5) & Z_6^3 A'(6,6) \end{bmatrix}$$

$$R_4 = \begin{bmatrix} Z_1^3 A(1,1) & Z_2^3 A(1,2) & Z_3^3 A(1,3) & Z_4^3 A(1,4) & Z_5^3 A(1,5) & Z_6^3 A(1,6) \\ Z_1^3 A(2,1) & Z_2^3 A(2,2) & Z_3^3 A(2,3) & Z_4^3 A(2,4) & Z_5^3 A(2,5) & Z_6^3 A(2,6) \\ Z_1^3 A(3,1) & Z_2^3 A(3,2) & Z_3^3 A(3,3) & Z_4^3 A(3,4) & Z_5^3 A(3,5) & Z_6^3 A(3,6) \\ Z_1^3 A(4,1) & Z_2^3 A(4,2) & Z_3^3 A(4,3) & Z_4^3 A(4,4) & Z_5^3 A(4,5) & Z_6^3 A(4,6) \\ Z_1^3 A(5,1) & Z_2^3 A(5,2) & Z_3^3 A(5,3) & Z_4^3 A(5,4) & Z_5^3 A(5,5) & Z_6^3 A(5,6) \\ Z_1^3 A(6,1) & Z_2^3 A(6,2) & Z_3^3 A(6,3) & Z_4^3 A(6,4) & Z_5^3 A(6,5) & Z_6^3 A(6,6) \end{bmatrix}$$

I_d est la matrice identité de dimension 15×15

$$\dim[M_r] = 39 \times 27$$

En utilisant (3.1.5) on peut alors réécrire le système (3.1.1) de la manière suivante:

$$[D(27 \times 39)][M_r(39 \times 27)] \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = |0\rangle \quad (3.1.6)$$

Où encore si la matrice S est le produit matriciel de D par M_r

$$[S(27 \times 27)] \begin{bmatrix} |irr\rangle \\ |T\rangle \\ |R\rangle \end{bmatrix} = |0\rangle \quad (3.1.7)$$

Pour des valeurs de λ et r_2 données les états vibrationnels localisés sur le défaut sont déterminés à partir de la relation de compatibilité $\det[S(27 \times 27)] = 0$.

Ces modes correspondent à des phonons localisés qui se propagent parallèlement au défaut, les déplacements vibrationnels associés à ces phonons s'évanouissent vers les régions de volume des doubles plans de part et d'autre du puits atomique [33].

3.1.4- Etude de la diffusion

Considérons le cas d'un mode propageant i ($|Z_i| = 1$) provenant du guide d'ondes parfait gauche (G) et allant vers le guide d'ondes parfait droit (D). L'onde résultante diffusée par le puits se décompose en deux parties, l'une est transmise au double plan côté droit, l'autre est réfléchiée sur le double plan côté gauche, ce qui donne naissance à un champ vibrationnel de déplacement dans les deux demi – espaces.

La composante cartésienne α du champ de déplacements d'un atome situé en dehors de la région de défaut (E) peut être exprimée en utilisant la méthode de raccordement [39]

Les déplacements atomiques dans les trois directions cartésiennes d'un site atomique appartenant au double plan (G) côté gauche peuvent s'exprimer comme la superposition de l'onde incidente avec les modes propres de vibration du guide d'ondes parfait gauche à la même fréquence :

$$u_\alpha(n_x, n_y, n_z) = A(\alpha, i) [Z(i)]^{n_x} + \sum_{i'=1}^6 [Z(i')]^{-n_x} R_{i'} A(\alpha, i') \quad \text{avec } n_x < 0 \quad (3.1.8)$$

De la même manière, pour un site atomique du double plan (D) côté droit, les déplacements atomiques peuvent s'exprimer ainsi :

$$\mathbf{u}'_{\alpha}(n_x, n_y, n_z) = \sum_{j=1}^6 [Z'(j)]^{+n_x} T_{ij} A'(\alpha, j) \quad \text{avec } n_x > 0 \quad (3.1.9)$$

La quantité R_{ii} , comme nous le verrons plus loin est à relier avec les coefficients de réflexion d'un mode incident i selon les six modes $i'=1...6$ du double plan (G) pour une fréquence donnée. De même, la quantité T_{ij} est associée avec les coefficients de transmissions du mode incident i selon les modes propres $j=1...6$ du double plan (D).

Les coefficients $A(\alpha, i')$ et $A'(\alpha, j)$ représentent les poids pondérés associés aux différents modes évanescents déterminés à l'aide des vecteurs propres des matrices de volume.

3.1.4.1- Calcul des coefficients de réflexion et de transmission

Les coefficients de réflexion et de transmission r_{ii} et t_{ij} sont respectivement calculés pour un mode propageant i , sachant que i' et j décrivent des modes qui peuvent être propageants ou évanescents dans la fenêtre des fréquences dans laquelle i est propageant.

soit $|RT\rangle$ le vecteur de base pour les coefficients de réflexion et de transmission et $|irr\rangle$ le vecteur formé par les déplacements atomiques des sites irréductibles de la région de défaut. En utilisant les équations (3.8) et (3.9), on peut alors écrire les équations de mouvements des atomes formant le défaut, et obtenir un système d'équations inhomogènes de la forme [29]:

$$|\mathbf{u}\rangle = \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [M_r] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} + |IH\rangle \quad (3.1.10)$$

ou le vecteur $|IH\rangle$ regroupe les termes inhomogènes décrivant l'onde incidente

En multipliant l'équation (3.1.10) par la matrice $[D]$ on obtient alors :

$$[D]|u\rangle = [D] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [D][M_r] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} + [D]|IH\rangle \quad (3.1.11)$$

Ce qui peut se résumer à :

$$[D][M_r] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |rac\rangle \end{pmatrix} = [S] \begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} = -[D]|IH\rangle \quad (3.1.12)$$

Ou encore :

$$\begin{pmatrix} |irr\rangle \\ |RT\rangle \end{pmatrix} = -[S]^{-1} [D]|IH\rangle$$

(3.1.13)

La solution du système d'équations (3.1.13) rend compte des déplacements atomiques $|irr\rangle$ de la région de défaut ainsi que des grandeurs R_{i_i} et T_{i_j} pour une fréquence incidente Ω .

Les coefficients de réflexion r_{i_i} et de transmission t_{i_j} peuvent alors être calculées en prenant soin de les normaliser à l'aide des vitesses de groupes, qui assurent la conservation de l'énergie et l'unitarité de la somme des parties réfléchies et transmises [6]. Plus précisément, pour des ondes provenant du côté gauche du défaut selon le mode propre i , le coefficient de réflexion est donné par :

$$r_{i_i} = \frac{v_{i'}}{v_i} |R_{i_i}|^2$$

Et le coefficient de transmission par :

$$t_{i_j} = \frac{v_j}{v_i} |T_{i_j}|^2$$

Notons que v_i , qui représente la vitesse de groupe du mode propre i , est nulle pour les modes évanescent de deux guides d'ondes parfaits. En effet, les modes évanescent sont nécessaires pour une description totale de la dynamique vibrationnelle et pour la diffusion d'ondes cristallographiques bien qu'ils ne contribuent pas au transport énergétique.

Nous pouvons également définir les probabilités de réflexion et de transmission pour un mode propre i donné à la fréquence de diffusion Ω à l'aide des expressions suivantes [30]

$$r_i = \sum_{i'} r_{i i'}$$

$$t_i = \sum_j t_{i j}$$

La relation d'unitarité, qui veut que la somme des transmissions et des réflexions soit égale à 1 est alors décrite par la relation suivante :

$$s = \sum_i (t_i + r_i) = 1$$

Nous avons systématiquement exploité cette relation pour contrôler nos calculs.

3.1.4.2- Calcul de la conductance phononique

Afin de décrire la transmission globale des ondes vibrationnelles par un défaut, il est aussi utile de définir par analogie avec la conductance électronique qui est liée aux phénomènes de diffusion [31], la conductance phononique d'un défaut pour une fréquence Ω donnée [34]. Cette conductance notée $\sigma(\Omega)$ est notamment définie pour une propagation depuis le double plan côté gauche vers le double plan côté droit :

$$\sigma(\Omega) = \sum_{i,j} t_{i j}$$

Où la somme est effectuée sur tous les modes se propageant à la fréquence Ω .

Pour un guide d'ondes parfait ; sans défaut σ est un entier qui donne le nombre de modes propageants à la fréquence Ω considérée. Loin du défaut, nous sommes en présence de deux guides d'ondes identiques, ce qui entraîne l'existence d'une même conductance associée à ces deux systèmes parfaits.

La présence du défaut crée donc un écart entre le σ idéal et sa valeur provenant des processus de diffusion élastique sur les défauts, cet écart donne une mesure de la réflexion. La conductance σ permet de regrouper les contributions de tous les modes en une seule courbe, mais elle présente l'inconvénient de perdre toute information sur l'origine détaillée par mode. En ce sens, il ya perte d'information par rapport aux coefficients de transmission individuels.

Néanmoins, la conductance est accessible expérimentalement puisque on est capable d'exciter et de détecter des vibrations à une fréquence donnée [37].

3.1.4.3- Résultats et discussions :

Les figures 3.1.2 à 3.1.4 représentent les courbes de réflexion et de transmission dans les six modes de vibration en fonction de la fréquence normalisée Ω . Notons que ces courbes existent sur la totalité du domaine de la plage de propagation, là où les vitesses de groupe sont non nulles.

Les résultats numériques sont obtenus pour $\varphi_y = 0$ et pour les valeurs des paramètres suivants :

$r_2 = 0.8$ et λ prenant des valeurs suivantes :

$\lambda_1 = 0.9, \lambda_2 = 0.7$ et $\lambda_1 = 0.7, \lambda_2 = 0.5$ et enfin pour $\lambda_1 = 0.5, \lambda_2 = 0.3$ dans le cas d'un adoucissement des contraintes au niveau de puits. $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0.8$ pour un système homogène (où on néglige l'effet de la relaxation et de la reconstruction au niveau du défaut) et enfin pour $\lambda_1 = 1.1, \lambda_2 = 0.9$ et $\lambda_1 = 1.3, \lambda_2 = 1.1$ et enfin pour $\lambda_1 = 1.5, \lambda_2 = 1.3$ pour un durcissement des constantes de force au niveau du défaut.

Sur la figure (3.1.2) sont rassemblés les coefficients de réflexion et de transmission dans les 6 modes de vibration pour $r_2 = 0.8, \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0.8$ on observe des structures résonantes de type Fano qui est une signature du couplage continuum état discret sur l'ensemble des figures.

Les figure (3.1.3a- 3.1.3b- 3.1.3c) représentent les coefficients de réflexion et de transmission dans les 6 modes de vibration dans le cas d'un adoucissement des constantes de forces au niveau du puits nous remarquons la disparition des résonances dans l'intervalle des hautes fréquences. On note l'apparition de nombreuses résonances à des basses fréquences.

Les figure (3.1.4a- 3.1.4b- 3.1.4c) montrent également les différents coefficients dans les 6 modes de vibration dans le cas d'un durcissement des constantes de forces on note un déplacement des résonances des basses fréquences (modes acoustiques) vers les hautes fréquences (modes optiques).

En conclusion ces résonances dues à un couplage cohérent continuum états discrets se localisent dans l'intervalle des basses fréquences pour les valeurs décroissantes de λ et elles se déplacent vers les hautes fréquences pour les valeurs croissantes de λ .

La figure (3.1.5) montre l'allure des coefficients de transmission et de réflexion en fonction de la fréquence lorsque la masse des atomes défaut est plus lourde que la masse des atomes du volume ($m_b=2m_a$) on remarque que les résonances s'étalent sur les basses fréquences. Il n'est pas étonnant qu'un défaut lourd induise la création d'une vibration de faible fréquence. En effet un résultat bien connu de mécanique élémentaire indique que la fréquence propre d'un oscillateur harmonique est lié à sa masse par $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ (3.1.14). Même si notre système est plus compliqué cette relation continue à donner une information utile. Ces résonances dues à un couplage cohérent continuum états discrets se déplacent vers les hautes fréquences quand la masse des atomes défaut diminue ($m_b=0.5m_a$) figure (3.1.6) conformément à la relation (3.1.14) qui stipule qu'à une faible masse correspond une fréquence de vibration élevée.

En conclusion ces résonances se localisent dans les hautes fréquences pour des masses d'atomes de défauts plus petites que celle d'un atome du guide d'ondes parfait, et elles se localisent dans les basses fréquences pour des masses d'atomes de défauts plus grandes que celle des atomes du réseau parfait.

La figure (3.1.7) et (3.1.8) montrent respectivement l'allure des courbes de conductance phononique du système en fonction de la fréquence Ω pour $r_2=0.8$, $\lambda_1=1, \lambda_2=0.8$ et $\lambda_1=0.9, \lambda_2=0.7$ $\lambda_1=1.1, \lambda_2=0.9$ et pour une incidence normale $\varphi_y=0$, nous retrouvons également les pics de résonance respectifs exactement aux mêmes positions que dans les figures (3.1.2, 3.1.3a, 3.1.4a) on a représenté aussi la conductance phononique du guide d'onde parfait (courbe en continu de la figure (3.1.7)). On note que les marches correspondent au changement dans les modes propageants à une fréquence donnée.

La seule conclusion un peut générale que permet de prédire ces différentes courbes est la suivante : une résonance dans les courbes de transmission indique la présence d'un état discret dans cette région de fréquence. Par contre l'inverse n'est pas toujours vrai ; il arrive en effet très

fréquemment que les états prétendent séparés interagissent entre eux et avec les continus de manière telle qu'aucune structure claire ne soit visible dans les courbes de transmission.

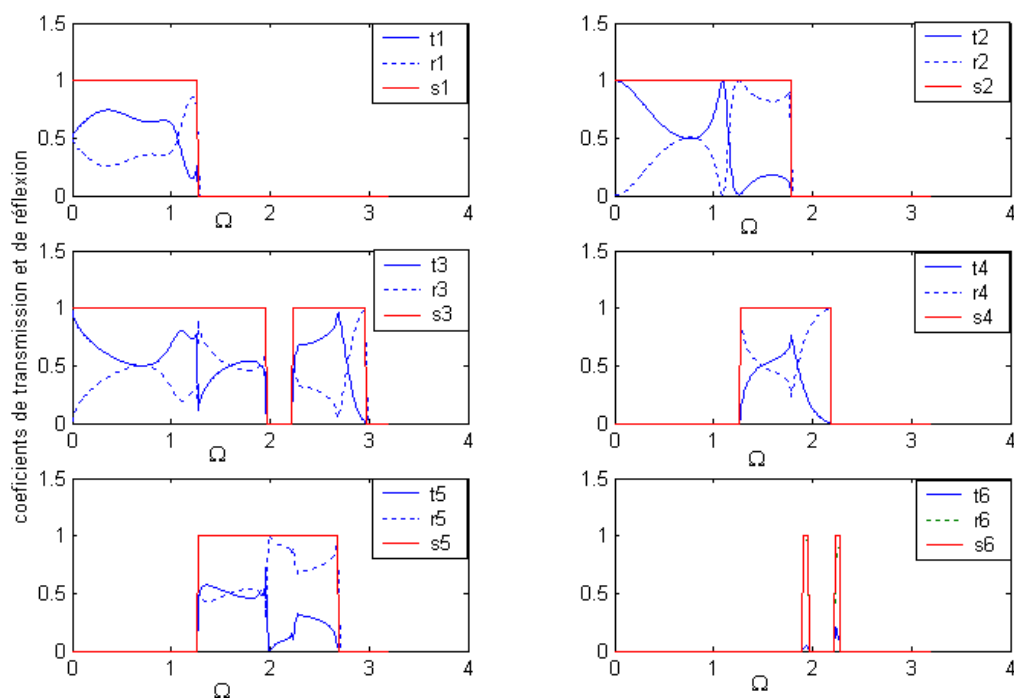


Fig.3.1.2 : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des différents modes pour $r_2 = 0.8$, $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0.8$, sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$.

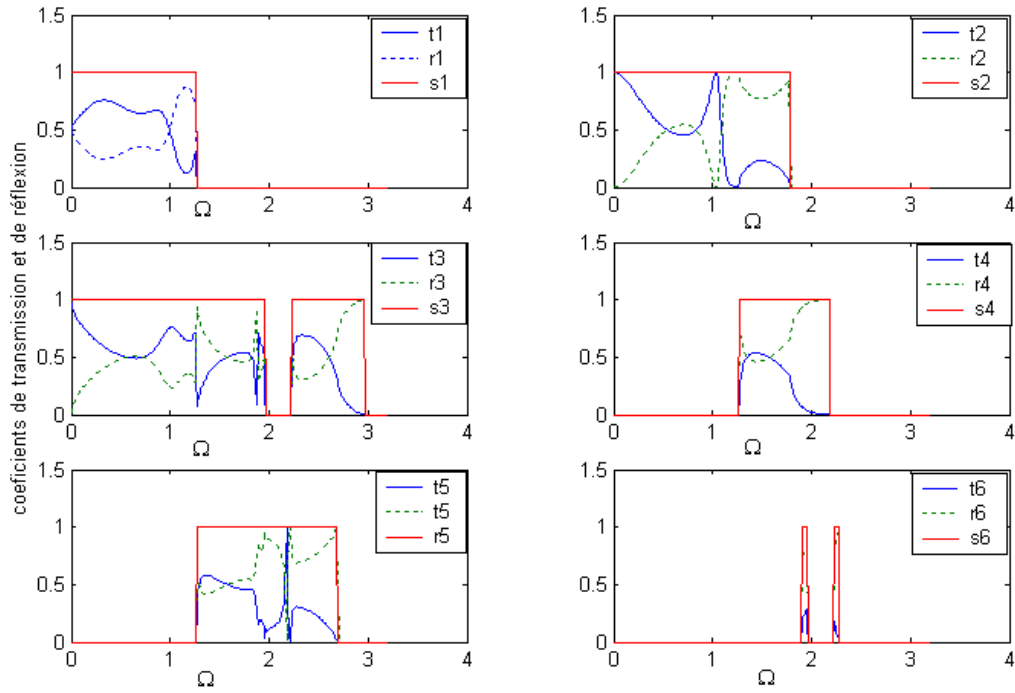


Figure 3.1.3a : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes pour $r_2 = 0.8$, et sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$ et pour $\lambda_1 = 0.9$, $\lambda_2 = 0.7$

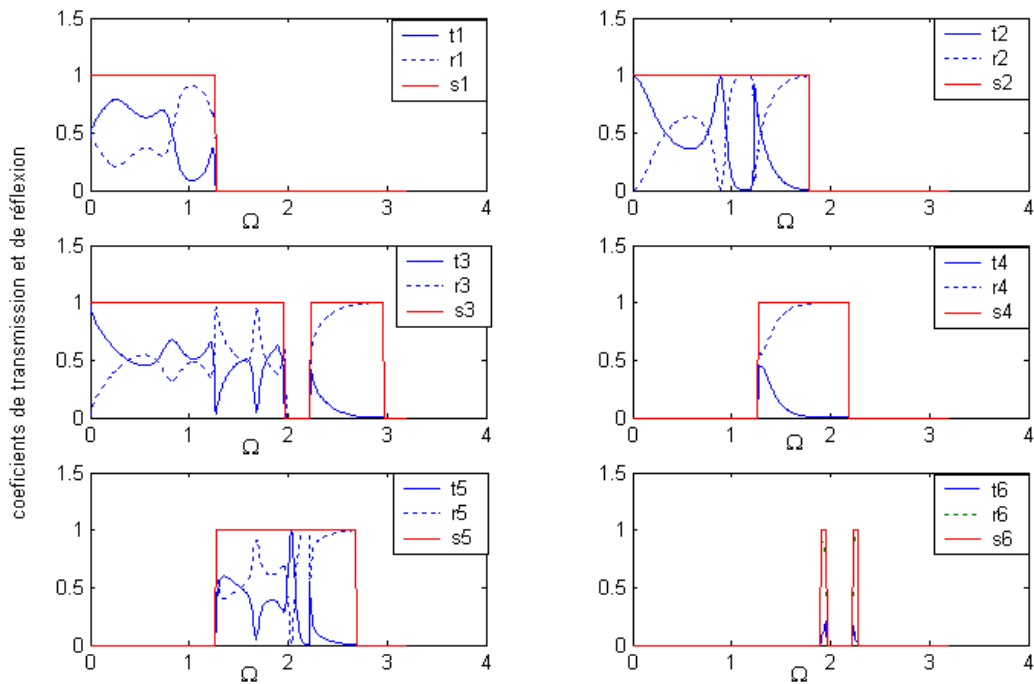


Figure.3.1.3b : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes pour $r_2 = 0.8$, et sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$ et pour $\lambda_1 = 0.7$, $\lambda_2 = 0.5$

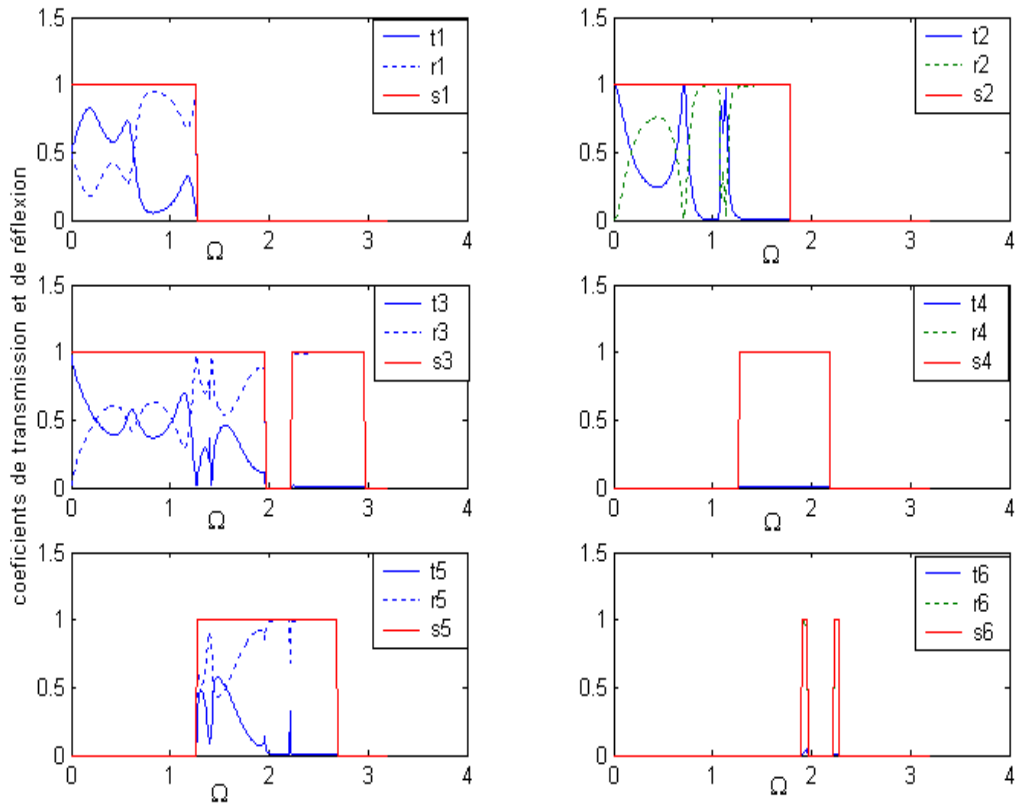


Figure 3.1.3c : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes pour $r_2 = 0.8$, et sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$ et pour $\lambda_1 = 0.5$, $\lambda_2 = 0.3$

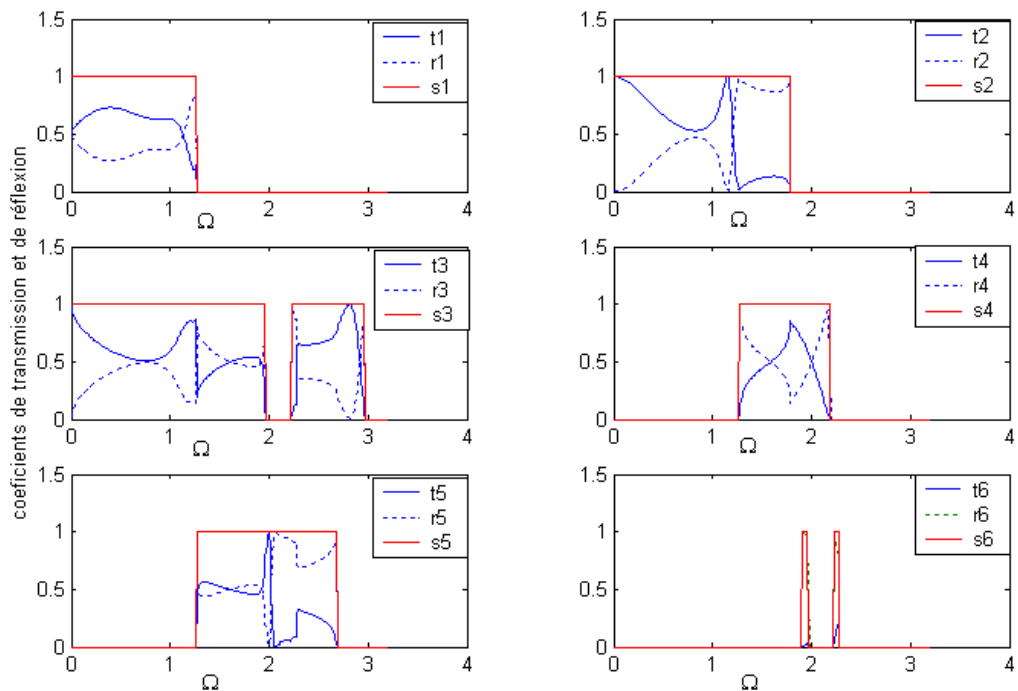


Figure 3.1.4a : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes pour $r_2 = 0.8$, et sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$ et pour $\lambda_1 = 1.1$, $\lambda_2 = 0.9$

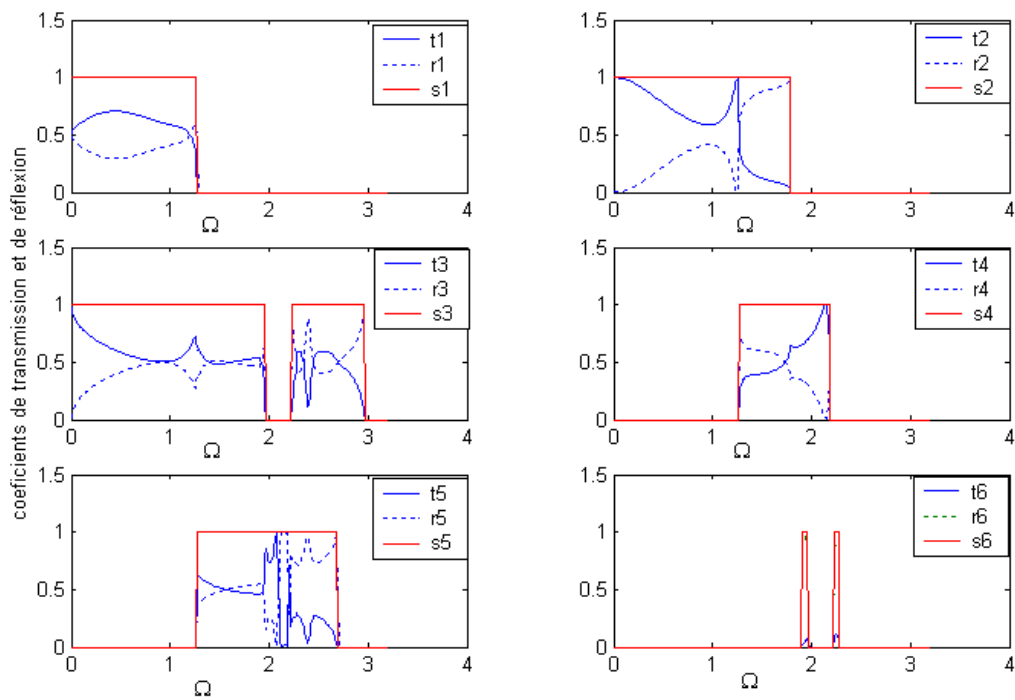


Figure 3.1.4b : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes pour $r_2=0.8$, et sous l'angle d'incidence $\varphi_y=0$ et pour $\lambda_1=1.3$, $\lambda_2=1.1$

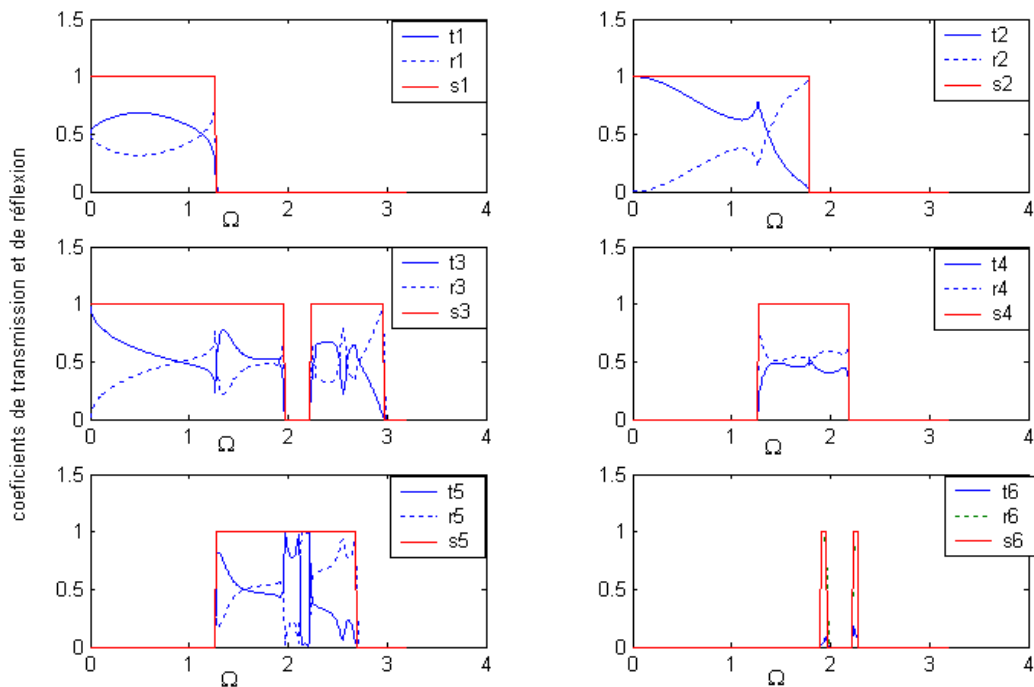


Figure 3.1.4c : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes pour $r_2=0.8$, et sous l'angle d'incidence $\varphi_y=0$ et pour $\lambda_1=1.5$, $\lambda_2=1.3$

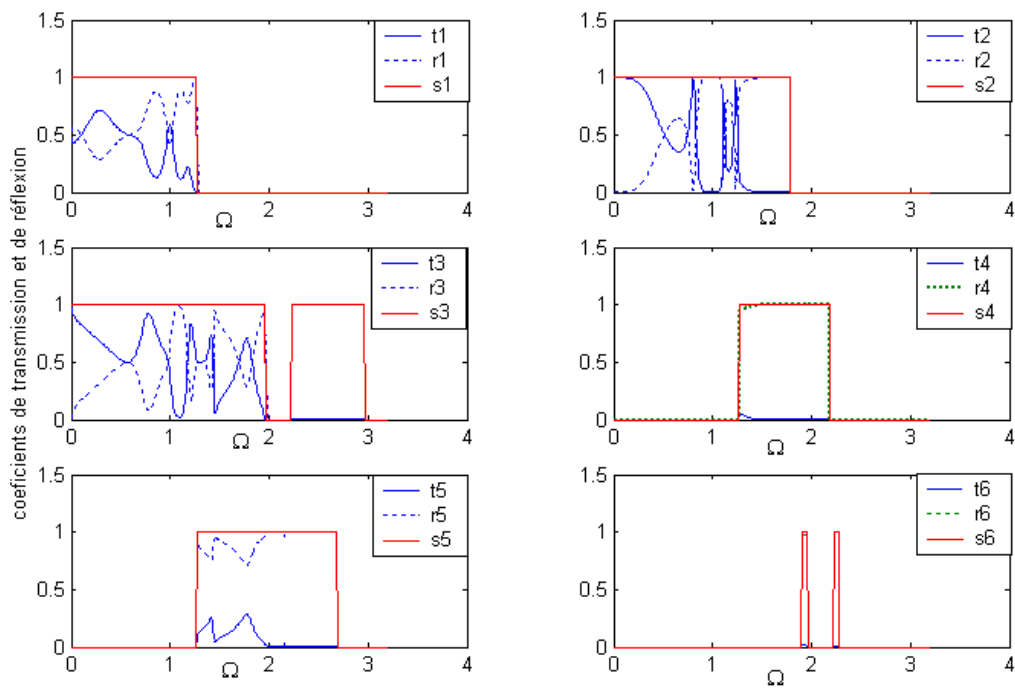


Figure 3.1.5 : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes pour $r_2 = 0.8$, et sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$ et pour $m_b = 2m_a$

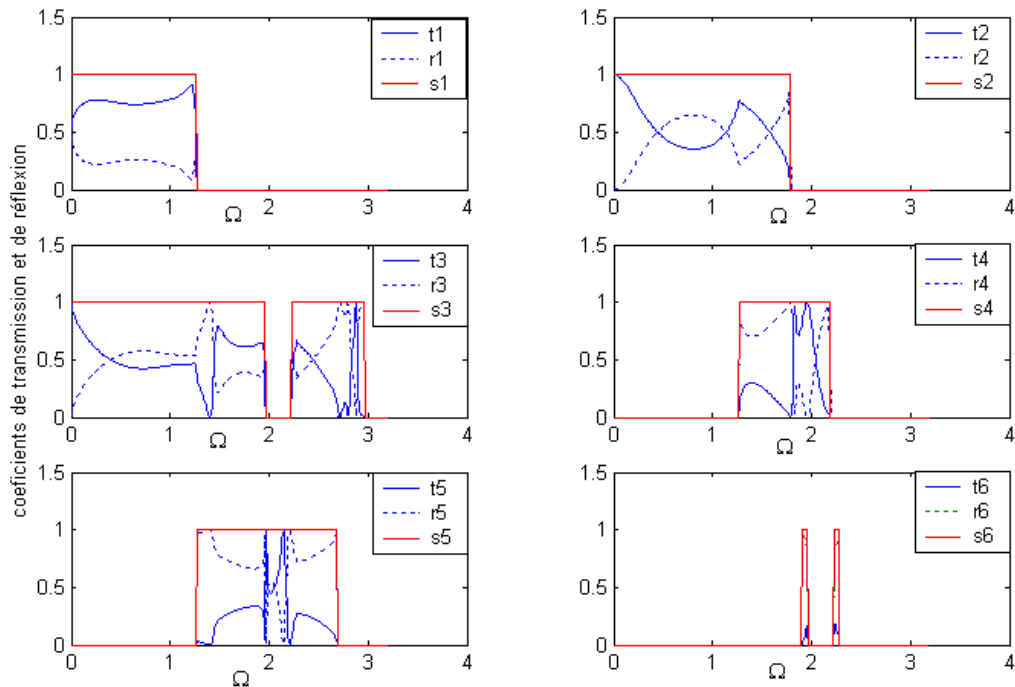


Figure 3.1.6 : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes pour $r_2 = 0.8$, et sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$ et pour $m_b = 0.5m_a$

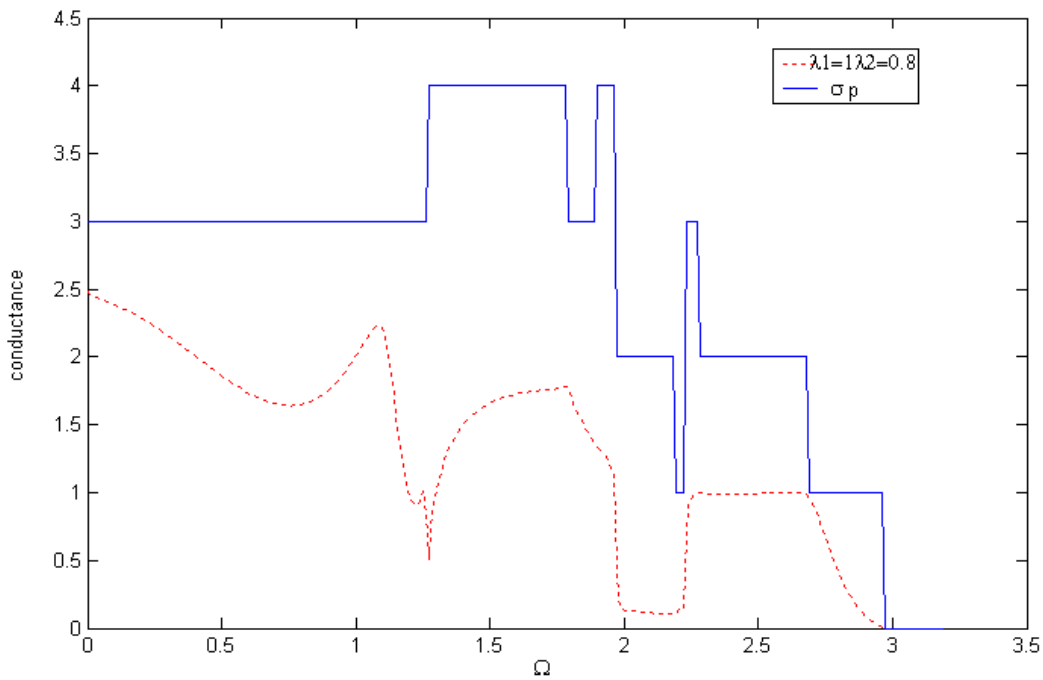


Figure 3.1.7: Courbe de conductance en fonction de Ω , en trait continu celle d'un réseau parfait en tirets pour $\lambda_1=1, \lambda_2=0.8$

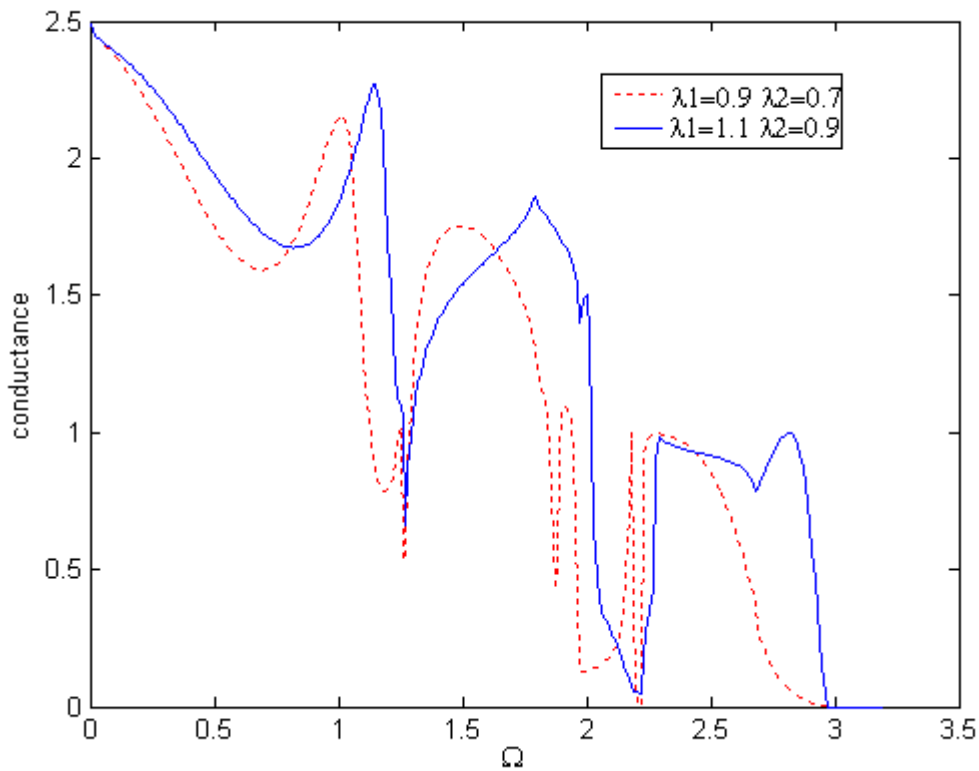


Figure 3.1.6 : Courbe de conductance en fonction de la fréquence normalisée en trait continu pour $\lambda_1=1.1, \lambda_2=0.9$ en tirets pour $\lambda_1=0.9, \lambda_2=0.7$

Partie 2

diffusion de phonons par un défaut étendu

Introduction

Dans cette partie, nous généraliserons l'étude menée dans la partie précédente à un autre défaut de structure à un défaut étendu qui s'apparente au défaut isolé. Ceci consiste principalement à l'élargissement de la taille de l'échantillon .

L'élargissement de la taille de l'échantillon comprenant les défauts ne pose pas de problème particulier, l'ajout de puits atomiques se traduit par l'augmentation de la taille du système linéaire (3.1.13)

3.2.1. Défaut non symétrique

3.2.1.1. Système modèle

Le système à étudier est formé de deux plans infinis superposés l'un par rapport à l'autre ayant deux défauts qui sont des puits infinis espacés d'un paramètre du réseau.

Figure (3.2.1)

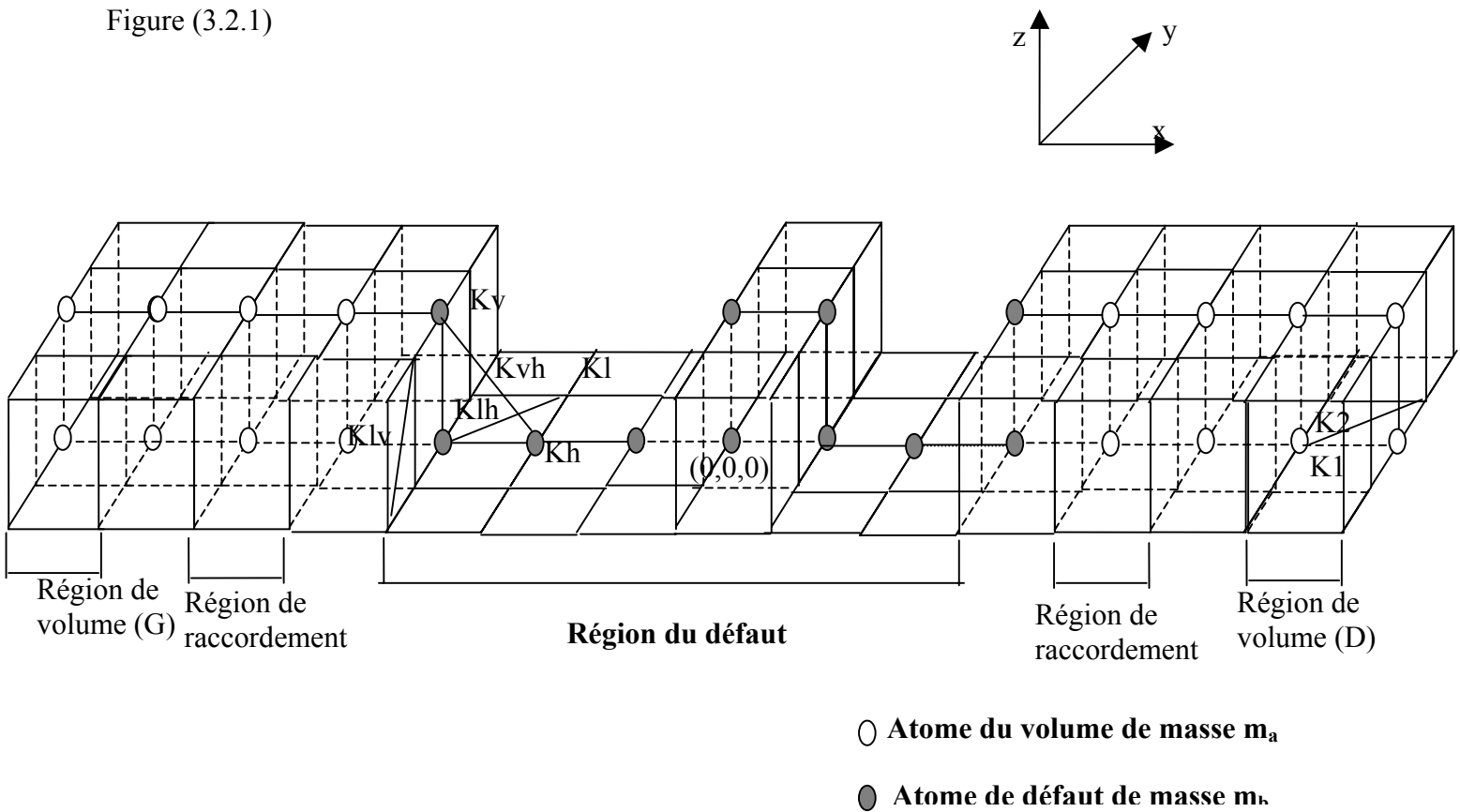


Figure 3.2.1 : Schéma d'un système modèle de deux puits atomiques espacés d'un paramètre du réseau insérés entre deux plans atomiques superposés l'un par rapport à l'autre.

3.2.1.2- Formulation du problème :

La formulation principale du problème de diffusion relative à ce genre de défaut est analogue à celle du guide d'onde perturbé par un seul défaut étudié dans la partie précédente par conséquent, la même étude sera reprise.

La matrice défaut [D] est formé de 45 lignes et de 57 colonnes obtenus en écrivant les équations du mouvement pour l'ensemble des sites irréductibles (0,0,0), (0,0,1), (1,0,0), (1,0,1), (-1,0,0), (2,0,1), (-2,0,0), (3,0,0), (3,0,1), (-3,0,0), (-3,0,1) de la zone du défaut E ainsi que les sites voisins (4,0,0), (4,0,1) et (-4,0,0), (-4,0,1) de raccordement possédant un environnement du guide d'onde parfait. Les éléments composant cette matrice sont données dans l'annexe C3. Ce système peut alors s'écrire :

$$[D]u = 0$$

$$\text{avec } \dim[D] = 45 \times 57$$

$$\dim|u\rangle = 57 \times 1$$

$$\dim|0\rangle = 45 \times 1$$

3.2.1.3 -résultats et discussions

La figure (3.2.2) représente les courbes de réflexion et de transmission dans les six modes de vibration pour $\varphi_y = 0$, $r_2 = 0.8$ et pour $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0.8$

le défaut non symétrique nous renseigne que le coefficient de réflexion est plus important que le coefficient de transmission presque pour tous les modes, sauf pour les modes 2 et 3. Pour le mode 2 le coefficient de transmission est important dans l'intervalle de fréquence $0 \leq \Omega \leq 0.3$. Pour le mode 3 dans les basses fréquences $0 \leq \Omega \leq 0.4$ et dans les hautes fréquences pour $2.2 \leq \Omega \leq 2.9$. Pour le mode 1 quand $0 \leq \Omega \leq 1.2$ la réflexion est totale, le défaut se comporte comme un miroir.

La figure (3.2.3) représente l'évolution de la transmission totale (conductance) du système perturbé par le défaut non symétrique en fonction de la fréquence Ω . Pour comparaison on a représenté aussi la conductance idéale σ_p du cristal parfait, on remarque que les résonances des coefficients de transmission des 6 modes se retrouvent sur la courbe de conductance phononique. La marche sur la courbe de conductance du système parfait correspond au nombre de modes propagateurs.

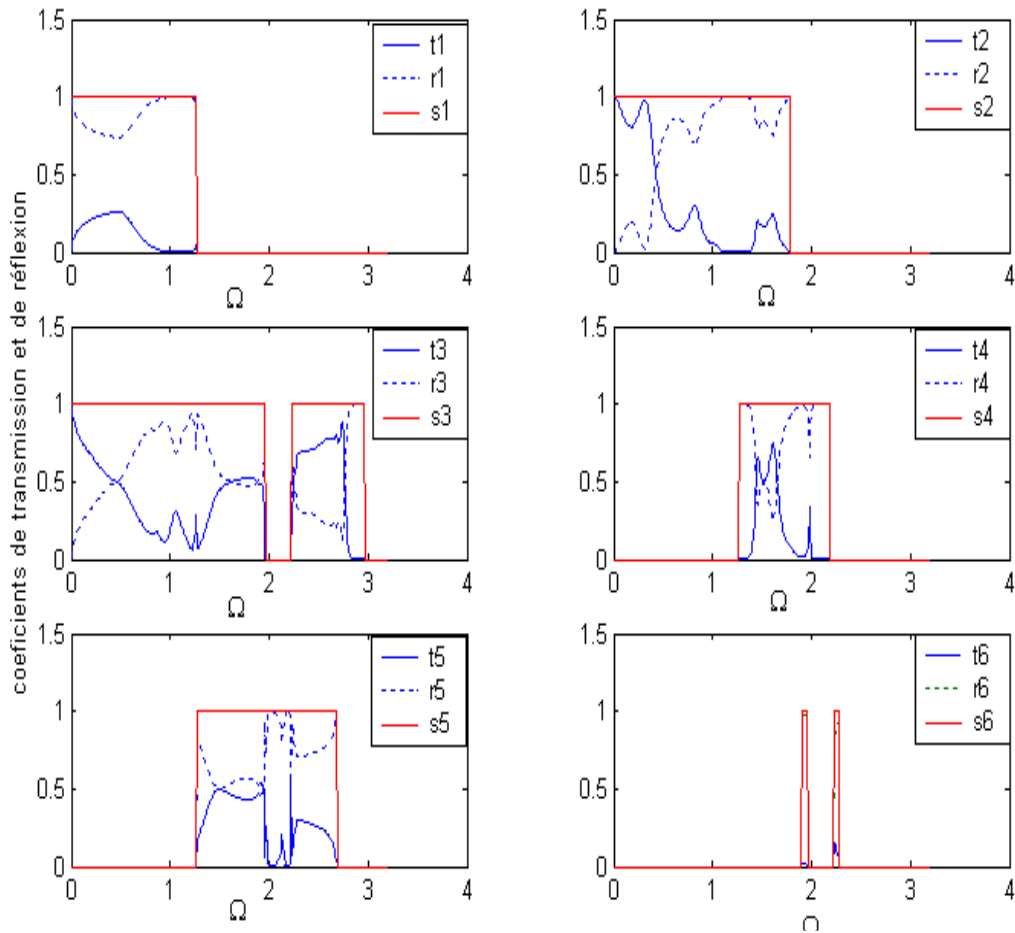


Figure.3.2.2 : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes pour $r_2 = 0.8$, $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0.8$, sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$

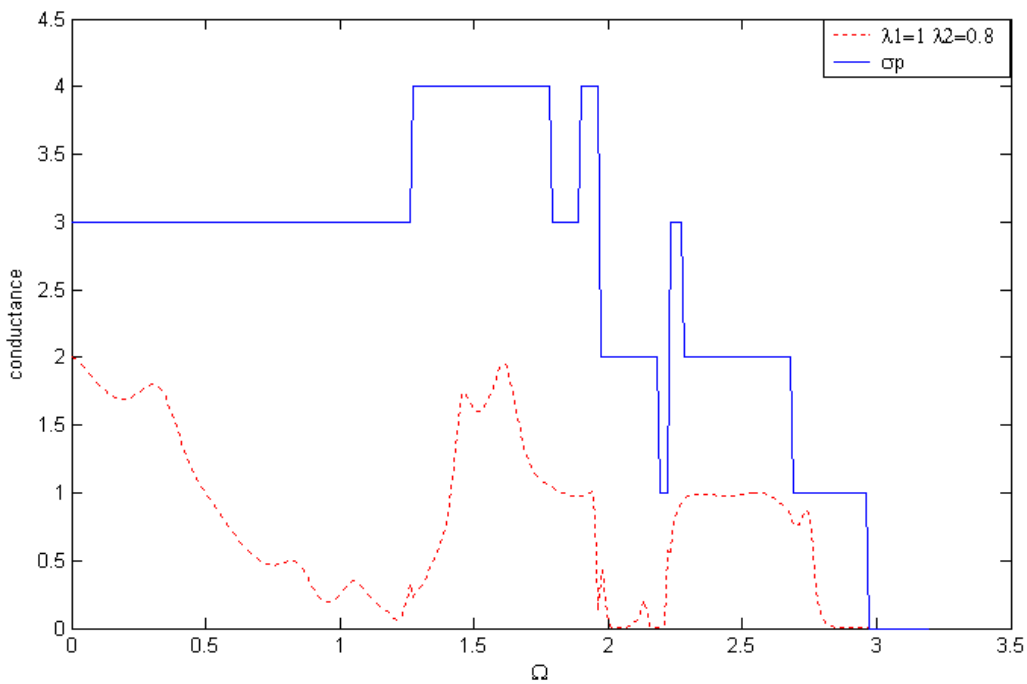


Figure.3.2.3 : Courbe de conductance en fonction de la fréquence normalisée en trait continu celle d'un réseau parfait en tirets pour $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0.8$ pour le défaut non symétrique

3.2.2. Défaut symétrique :

3.2.2.1- Formulation du problème :

Le système à étudier est formé de deux plans infinis superposés l'un par rapport à l'autre ayant deux défauts qui sont des puits infinis espacés de deux paramètres du réseau. Voir figure(3.2.4)

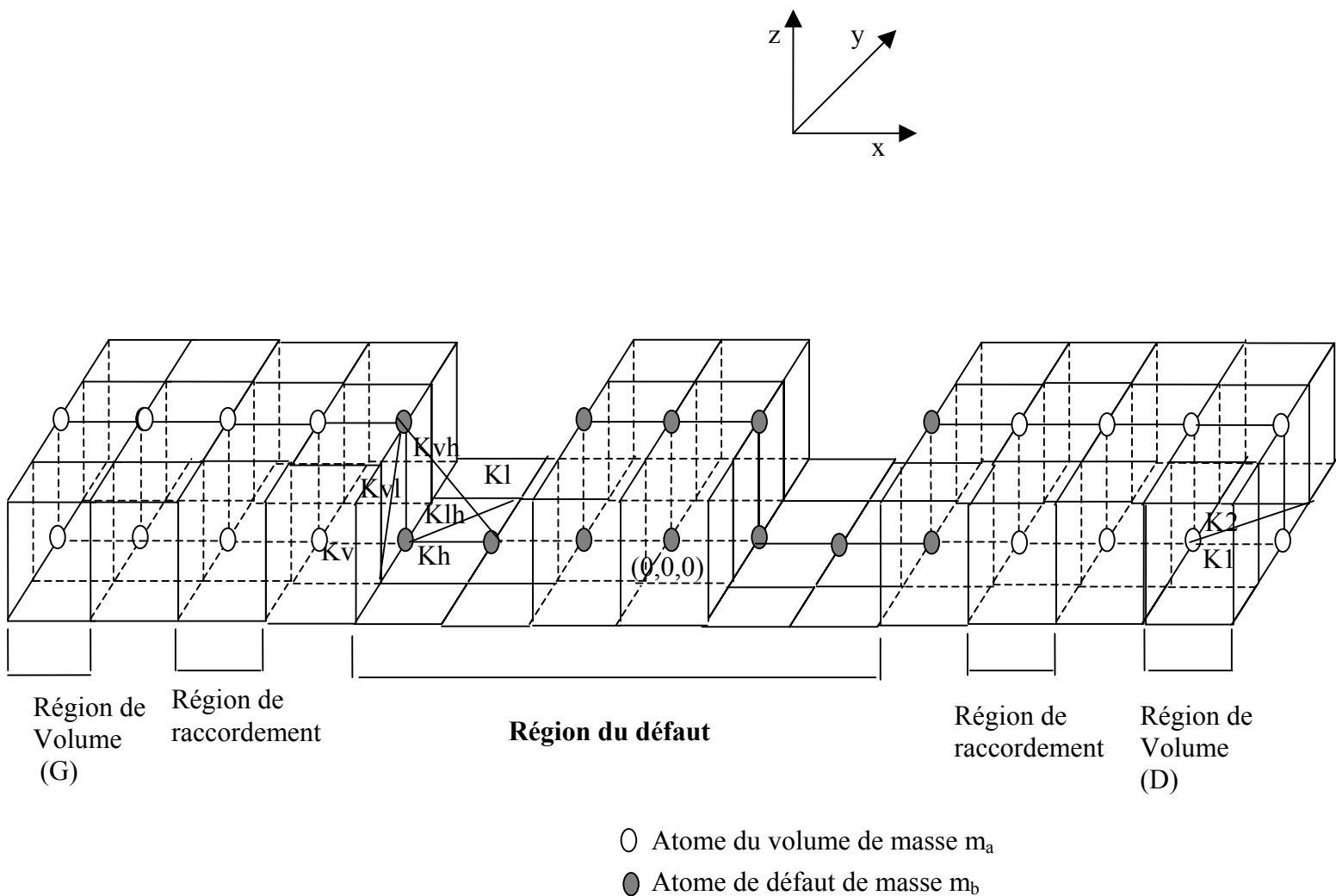


Figure.3.2.4 : Système mésoscopique illustré à partir de deux puits atomiques espacés de deux paramètres du réseau insérés entre deux plans atomiques superposés l'un par rapport à l'autre.

La matrice défaut [D] est formé de 48 lignes et de 60 colonnes obtenus en écrivant les équations du mouvement pour l'ensemble des sites irréductibles $(0,0,0)$, $(0,0,1)$, $(1,0,0)$, $(1,0,1)$,

$(-1,0,0)$, $(-1,0,1)$, $(2,0,0)$, $(-2,0,0)$, $(3,0,0)$, $(3,0,1)$, $(-3,0,0)$, $(-3,0,1)$ de la zone du défaut E ainsi que les sites voisins $(4,0,0)$, $(4,0,1)$ et $(-4,0,0)$, $(-4,0,1)$) de raccordement possédant un environnement du guide d'onde parfait. Les éléments composant cette matrice sont données dans l'annexe C4 .Ce système peut alors s'écrire :

$$[D]|u\rangle=0$$

$$\text{avec } \dim[D]=48\times 60$$

$$\dim|u\rangle=60\times 1$$

$$\dim|0\rangle=48\times 1$$

3.2.2.2.résultats et discussions

Sur la figure (3.2.5) sont représentées les courbes de réflexion et de transmission dans les six modes de vibration pour $\varphi_y=0$, $r_2=0.8$ et pour $\lambda_1=1,\lambda_2=0.8$, on remarque quelques structures caractéristiques de résonance de Fano résultantes d'un couplage cohérent entre les états localisés du défaut et les modes propageants du guide d'onde. Ainsi que de nombreuses oscillations, issues des interférences entre les ondes incidentes et réfléchies. Ces dernières peuvent s'identifier aux oscillations de Fabry-Pérot.

La figure (3.2.6) montre l'allure de la courbe de conductance phononique du système en fonction de la fréquence Ω pour $r_2=0.8$ $\lambda_1=1,\lambda_2=0.8$ et pour une incidence normale $\varphi_y=0$, nous retrouvons également les pics de résonance respectifs exactement aux mêmes positions que dans les figures(3.2.5), on a représenté aussi la conductance phononique du guide d'onde parfait courbe en continu. On note que les marches correspondent au changement dans les modes propageants à une fréquence donnée.

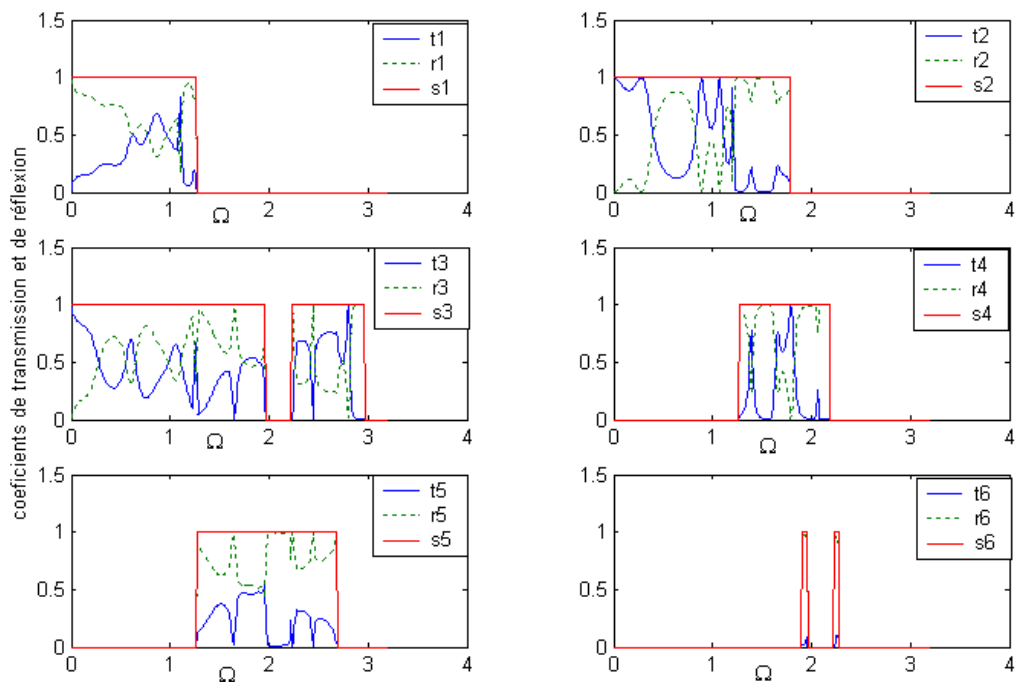


Figure 3.2.5 : Courbes de réflexion et de transmission totale lors de la diffusion des 6 modes de vibration pour $r_2 = 0.8$, $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0.8$, et sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$

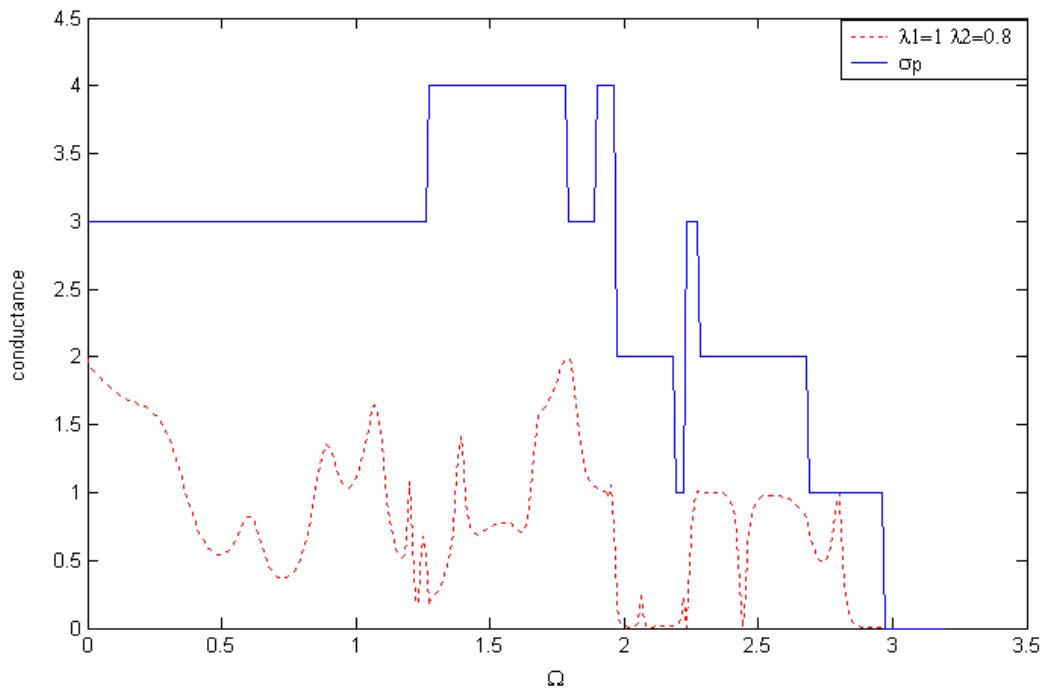


Figure 3.2.6 : Courbe de conductance en fonction de la fréquence normalisée en trait continu celle d'un réseau parfait en tirets pour $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0.8$ sous l'angle d'incidence $\varphi_y = 0$

Densités spectrales et densités d'états au niveau du puits atomique

4.1-Matrice des fonctions de Green

La matrice dynamique D constitue l'outil de base pour l'étude des états vibrationnels, elle peut être utilisée aussi à la description des densités spectrales et d'états. En effet ces dernières grandeurs peuvent être calculée plus facilement à l'aide de la matrice $G(\omega^2)$ des fonctions de Green [38,41]

$$G(\omega^2) = [\omega^2 I - D]^{-1} \quad (4.1)$$

Pour expliciter les éléments des matrices D et $G(\omega^2)$, de rang $3N$, nous choisissons la base des $3N$ vecteurs $|e_n\rangle$ qu'on définit par :

$$|e_n\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ \delta_{nm} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\text{soit } \langle e_n| = (\dots \delta_{nm} \dots)$$

avec $n, m = 1, \dots, 3N$.

Désignons par $\langle e_n | e_m \rangle$ le produit scalaire des vecteurs $|e_n\rangle$ et $|e_m\rangle$

$$\langle e_n | e_m \rangle = \sum_i \delta_{ni} \delta_{im}$$

on en déduit la relation d'orthonormalisation des vecteurs des vecteurs $|e_n\rangle$

$$\langle e_n | e_m \rangle = \delta_{nm} \quad (4.2)$$

et l'équation suivante :

$$I = \sum_k |e_k\rangle \langle e_k| \quad (4.3)$$

En effet, en utilisant (4.2) les éléments de $\sum_k |e_k\rangle \langle e_k|$, dans la base des vecteurs $|e_n\rangle$, s'écrivent :

$$\begin{aligned} \langle e_n | \left(\sum_k |e_k\rangle \langle e_k| \right) | e_m \rangle &= \sum_k \langle e_n | e_k \rangle \langle e_k | e_m \rangle = \sum_k \delta_{nk} \delta_{km} \\ &= \delta_{nm} \end{aligned}$$

soit $|u_p\rangle$, ($p=1,\dots,3N$) les vecteurs propres de la matrice dynamique D et ω_p^2 les valeurs propres correspondantes. Nous considérons par la suite que cette base est normalisée :

$$\langle u_p | u_p \rangle = 1$$

D'après la définition de ces vecteurs , on peut écrire :

$$\langle u_p | D | u_p \rangle = \omega_p^2 \langle u_p | u_p \rangle$$

Comme D est diagonale dans la base des vecteurs propres, le produit scalaire $\langle u_{p'} | u_p \rangle$ est nul si :

$|u_{p'}\rangle \neq |u_p\rangle$. D'où l'égalité :

$$\langle u_{p'} | u_p \rangle = \delta_{pp'} \quad (4.4)$$

4.2- Calcul des éléments de $G(\omega^2)$

Dans le but d'exprimer les éléments $\langle e_n | G(\omega^2) | e_n \rangle$ de la matrice $G(\omega^2)$ en fonction des valeurs et des vecteurs propres de D , nous introduisons la matrice B de passage entre les deux bases $(|e_n\rangle)$ et $(|u_p\rangle)$

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ |u_p\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} \vdots \\ |e_n\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (4.5.a)$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ |e_n\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = B^{-1} \begin{pmatrix} \vdots \\ |u_p\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (4.5.b)$$

D'après (4.5.a) un vecteur propre $|u_p\rangle$ est une combinaison linéaire des $3N$ vecteurs $|e_n\rangle$:

$$|u_p\rangle = \sum_{n=1}^{3N} \langle e_p | B | e_n \rangle |e_n\rangle \quad (4.6)$$

ou l'élément $\langle e_p | B | e_n \rangle$ de la matrice B représente la projection du vecteur propre $|u_p\rangle$ sur le vecteur $|e_n\rangle$.

En effet, d'après (4.6) :

$$\langle e_k | u_p \rangle = \sum_{n=1}^{N_0} \langle e_p | B | e_n \rangle \langle e_k | e_n \rangle$$

$$\langle e_k | u_p \rangle = \sum_{n=1}^{N_0} \langle e_p | B | e_n \rangle \delta_{kn}$$

D'où l'équation :

$$\langle e_k | u_p \rangle = \langle e_p | B | e_k \rangle \quad (4.7)$$

Pour montrer que la matrice B est unitaire ($B^+ = B^{-1}$) nous allons exprimer, en utilisant (4.3) et

(4.6), le produit scalaire $\langle u_{p'} | u_p \rangle$ en fonction de B et B^+ :

$$\langle u_{p'} | u_p \rangle = \sum_n \sum_{n'} \langle e_n | B^+ | e_{p'} \rangle \langle e_{p'} | B | e_m \rangle \delta_{nm}$$

$$\Rightarrow \langle u_{p'} | u_p \rangle = \sum_n \langle e_{p'} | B | e_m \rangle \langle e_m | B^+ | e_p \rangle$$

$$\Rightarrow \langle u_{p'} | u_p \rangle = \langle e_{p'} | BB^+ | e_p \rangle$$

D'après (4.4) on obtient :

$$\langle e_{p'} | BB^+ | e_p \rangle = \delta_{pp'} \quad (4.8)$$

on en déduit que la matrice B , définie par (4.5.a), vérifié la relation :

$$BB^+ = I$$

$$\Rightarrow B^+ = B^{-1} \quad (4.9)$$

cette propriété de la matrice B permet d'établir pour la base propre, la relation de fermeture qui s'écrit :

$$I = \sum_p |u_p\rangle\langle u_p| \quad (4.10)$$

En effet, d'après (4.7) et (4.8) on peut écrire :

$$\begin{aligned} \langle e_n | \left(\sum_p |u_p\rangle\langle u_p| \right) | e_m \rangle &= \sum_p \langle e_n | u_p \rangle \langle u_p | e_m \rangle \\ &= \sum_p \langle e_p | B | e_n \rangle \langle e_p | B | e_m \rangle^* \\ &= \sum_p \langle e_m | B^+ | e_p \rangle \langle e_p | B | e_n \rangle = \langle e_m | B^+ B | e_n \rangle \\ &= \delta_{nm} \end{aligned}$$

Soit L la matrice diagonale, dont les éléments sont définis par :

$$\langle e_n | L | e_m \rangle = \omega_n^2 \delta_{nm} \quad (4.11)$$

En utilisant l'équation (4.3), on explicite les éléments de la matrice $B^+ L B$ de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \langle e_n | B^+ L B | e_m \rangle &= \langle e_n | B^+ I L B | e_m \rangle \\ &= \sum_i \sum_j \langle e_n | B^+ | e_i \rangle \langle e_i | L | e_j \rangle \langle e_j | B | e_m \rangle \\ &= \sum_i \sum_j \langle e_i | B | e_n \rangle^* \omega_i^2 \delta_{ij} \langle e_j | B | e_m \rangle \\ &= \sum_i \omega_i^2 \langle e_i | B | e_n \rangle^* \langle e_i | B | e_m \rangle \end{aligned}$$

En utilisant (4.7) et (4.10) et la définition des vecteurs $|u_p\rangle$, on obtient :

$$\begin{aligned} \langle e_n | B^+ L B | e_m \rangle &= \sum_i \omega_i^2 \langle e_m | u_i \rangle \langle e_i | e_n \rangle \\ &= \sum_i \langle e_m | D | u_i \rangle \langle u_i | e_n \rangle \\ &= \langle e_m | D | e_n \rangle \end{aligned}$$

Ainsi si la matrice D est symétrique, elle vérifie

$$D = B^+ L B \quad (4.12)$$

D'après (4.1) et (4.10), la matrice $G(\omega^2)$ peut s'exprimer en fonction de B , B^+ et L :

$$\begin{aligned} G(\omega^2) = [\omega^2 I - D]^{-1} &\Rightarrow G(\omega^2) = [\omega^2 I - B^+ L B]^{-1} \\ &\Rightarrow G(\omega^2) = [B^+ (\omega^2 I - L) B]^{-1} \end{aligned}$$

On en déduit :

$$G(\omega^2) = B^+ [(\omega^2 I - L)]^{-1} B \quad (4.13)$$

D'après (4.11), les éléments $\langle e_n | (\omega^2 I - L)^{-1} | e_m \rangle$ de la matrice $[(\omega^2 I - L)]^{-1}$ s'écrivent :

$$\langle e_n | (\omega^2 I - L)^{-1} | e_m \rangle = \frac{\delta_{nm}}{(\omega^2 - \omega_n^2)} \quad (4.14)$$

En utilisant les équations (4.3), (4.13) et (4.14) les éléments de la matrice $G(\omega^2)$ peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{e}_n | \mathbf{G}(\omega^2) | \mathbf{e}_m \rangle &= \sum_p \sum_{p'} \langle \mathbf{e}_n | \mathbf{u}_p \rangle \frac{\delta_{pp'}}{(\omega^2 - \omega_p^2)} \langle \mathbf{e}_m | \mathbf{u}_{p'} \rangle \\ \Rightarrow \langle \mathbf{e}_n | \mathbf{G}(\omega^2) | \mathbf{e}_m \rangle &= \sum_p \frac{\langle \mathbf{e}_n | \mathbf{u}_p \rangle \langle \mathbf{e}_m | \mathbf{u}_p \rangle}{(\omega^2 - \omega_p^2)} \end{aligned} \quad (4.15)$$

4.3-Densités spectrales et d'états au niveau du puits

Désignons par $\gamma(\omega)$ le spectre de fréquence (densité d'états) du système

$$\gamma(\omega) = \sum_p \delta(\omega^2 - \omega_p^2) \quad (4.16)$$

$\gamma(\omega)$ représente physiquement le nombre d'états vibrationnels dont la fréquence est égale à ω .
comme la matrice B est unitaire, $\gamma(\omega)$ peut être exprimée par l'équation suivante :

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{3N} \sum_n \gamma_n(\omega) \quad (4.17)$$

ou $\gamma_n(\omega)$ est la densité spectrale définie par :

$$\gamma_n(\omega) = \sum_p \langle \mathbf{e}_n | \mathbf{u}_p \rangle \delta(\omega^2 - \omega_p^2) \quad (4.18)$$

$\gamma_n(\omega)$ représente physiquement la somme des carrés des amplitudes des vibrations, excité sur un atome suivant une direction cartésienne, de tous les modes propres de fréquence $\omega_p = \omega$

En utilisant l'équation :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\frac{\varepsilon/\pi}{(\omega^2 - \omega_p^2) + \varepsilon^2}}{1} = \delta(\omega^2 - \omega_p^2) \quad (4.19)$$

On trouve :

$$\gamma_n(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \langle \mathbf{e}_n | \mathbf{G}(\omega^2) | \mathbf{e}_n \rangle \quad (4.20)$$

D'après (4.15), les valeurs propres ω_p^2 de D représentent les pôles de $G(\omega^2)$. Afin d'éviter toute divergence dans les calculs, nous pouvons ajouter une infime partie imaginaire ε à la variable ω^2 , ce qui donne :

$$\gamma_n(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[\text{Im} \langle \mathbf{e}_n | \mathbf{G}(\omega^2 + j\varepsilon) | \mathbf{e}_n \rangle \right] \quad (4.21)$$

Pour un vecteur d'onde donné, le moyen le plus direct pour calculer les densités spectrales est l'opérateur de Green associé à la méthode de raccordement [42]

$$G(\Phi_Y, \Omega^2 + i\varepsilon) = [(\Omega^2 + i\varepsilon)I - S(\Phi_Y, r_2, \lambda, \{z_l\})]^{-1} \quad (4.22)$$

Pour notre étude, cet opérateur est obtenu à partir de la matrice S produit de la matrice de défaut et la matrice de raccordement. La matrice des densités spectrales pour un vecteur d'onde parallèle au défaut et à la surface est alors donnée par la relation suivante :

$$\rho_{(\alpha, \beta)}^{(l, l')}(\Phi_Y, \Omega) = 2\Omega \sum_m P_{\alpha m}^l P_{\beta m}^{l'} \delta(\Omega^2 - \Omega_m^2) = 2\Omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ \text{Im} \left[G_{\alpha\beta}^{l, l'}(\Phi_Y, \Omega^2 + i\varepsilon) \right] \right\} \quad (4.23)$$

Où l et l' représente deux atomes différents, α et β deux direction cartésiennes et $P_{\alpha m}^l$, la composante α du vecteur déplacement de l'atome l pour le mode Ω_m . la densité d'état qui correspond à la somme sur Φ_Y de la trace des matrices de densité spectrale peut alors se mettre ainsi sous la forme :

$$N(\Omega) = \sum_{\Phi_Y} \sum_{l\alpha} \rho_{(\alpha, \alpha)}^{(l, l')}(\Phi_Y, \Omega) = \frac{-2\Omega}{\pi} \sum_{\Phi_Y} \sum_{l\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ \text{Im} \left[G_{\alpha\alpha}^{l, l'}(\Phi_Y, \Omega^2 + i\varepsilon) \right] \right\} \quad (4.24)$$

4.3.1-Densité spectrale

L'évolution des courbes des densités spectrales des différents atomes constituant le minimum des sites nécessaires à la description de la dynamique de la zone de défaut suivant les trois directions de l'espace (ox , oy , oz) montre que les pics de résonance dues à un couplage entre les états localisés du puits et ceux du continuum, s'étalent sur une plage de fréquence de 0 à 3. En effet, cet intervalle correspond au domaine de fréquence des bandes de volume du double plan. On remarque que, le nombre, la hauteur et la largeur des pics dépendent fortement des paramètres du système.

Les résultats numériques sont obtenus pour les atomes (e), (f), (g), (figure 3.1.1) pour $\Phi_Y=0$, $r_2=0.8$ et λ prenant les valeurs croissantes $\lambda_1=0.9$, $\lambda_2=0.7$ dans le cas d'un adoucissement des contraintes au niveau de puits, $\lambda_1=1$, $\lambda_2=0.8$ pour un système homogène et enfin pour $\lambda_1=1.1$, $\lambda_2=0.9$ pour un durcissement des constantes de force au niveau du puits

Suivant la direction ox :

Les figures (4.1a, 4.2a, 4.3a) représentent la densité spectrale suivant la direction ox . Nous pouvons noter sur ces figures la présence d'un certain nombre de résonances à des fréquences caractéristiques, on note une augmentation de hauteur des pics pour des valeurs décroissantes de λ à des basses fréquences. Pour les valeurs croissantes de λ les pics sont significatifs à des fréquences

élevées, sauf pour la tome (e) on remarque la présence d'un pic important en amplitude à $\Omega=2.6$ pour $\lambda_1=1$, $\lambda_2 =0.8$ et pour l'atome (g) on note la présence d'un pic simple à la fréquence $\Omega=1.7$ plus important en amplitude pour la valeur décroissante de λ .

suivant la direction oy :

Les figures (4.1b, 4.2b, 4.3b) donnent les composantes oy des densités spectrales pour les trois atomes, on constate la présence d'un ensemble de pics de résonances de caractéristique différentes qui s'étale sur une bande de fréquence de $0 \leq \Omega \leq 3$.

pour l'atome (e) on observe sur le spectre la présence de deux pics importants en amplitude à la fréquence $\Omega=0.5$, on note la disparition de ces résonances à des fréquences supérieur à 2.5. Pour l'atome (f), notons que les amplitudes des pics sont peu sensible à la variation de λ . Pour l'atome (g) on remarque pour les valeurs croissantes de λ un pic important en amplitude à la fréquence $\Omega=1.3$.

Suivant la direction oz:

Les figures (4.1c , 4.2c , 4.3c) donnent les composantes suivant oz des densités spectrales des trois atomes, pour l'atome (e) on remarque un pic $\Omega=1.6$ d'amplitude important pour la valeur décroissante de λ . On remarque la disparition de ces résonances à des fréquences supérieur à 2.

Pour l'atome (f) les pics de résonances s'étalent sur l'intervalle de fréquence $0 \leq \Omega \leq 2.5$, et dont les caractéristique sont aussi peu sensible à la variation de λ .

Pour l'atome (g) on remarque un certaine nombre de pics qui se trouvent sur la bande de fréquence $1 \leq \Omega \leq 2.5$, on note l'apparition de ces pics pour l'ensemble des valeurs de λ , le plus important en amplitude est donné pour $\lambda=0.9$ à la fréquence $\Omega=1.6$.

En conclusion, on peut souligner que pour les différents atomes les densités spectrales présentent un ensemble de pics de résonances à des mêmes fréquences. Ce résultat indique que ce sont les mêmes phonons qui excitent des modes résonants dans les deux espaces semi infinis que sont le double et le simple plan, mais les pics sont de formes variées et différente d'un atome à un autre, car la réponse des résonateurs que sont les atomes et différente aussi, compte tenu de leurs environnements et de leurs champ de force. On note la présence d'un certain nombre de pics qui n'apparaissent qu'à certaines valeurs particuliers de λ sur les graphes.

4.3.2-Densité d'état :

les figures (4.4a- 4.4b- 4.4c) donnent les courbes des densités d'états respectivement pour les atomes (e), (f), (g) en fonction des paramètres du système. On note la présence de nombreux pics de résonances qui s'étalent sur un domaine de fréquence de 0 à 3.

On peut dire que les densités d'états sont très sensible au changement des paramètres du système notamment pour les atomes (e) et (g) et peu pour l'atome (f), et que les réactions des trois atomes sont différentes, à cause de la différence de leurs environnement atomique et de leurs champ de force respectif.

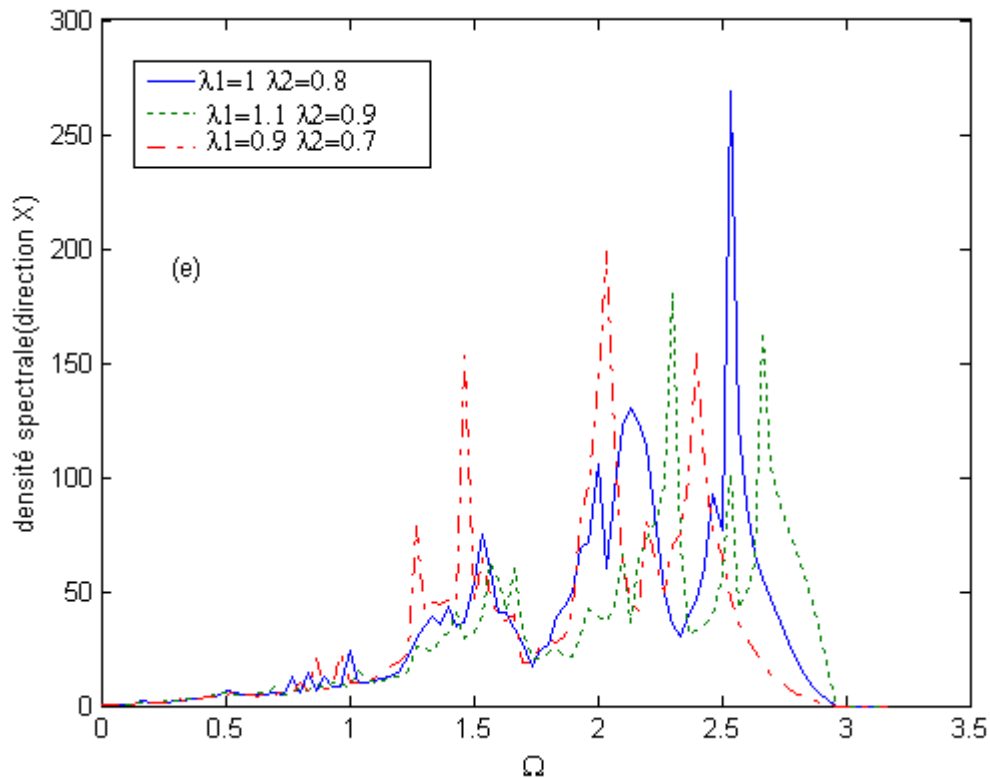


Figure 4.1a : Evolution des courbes des densités spectrales des modes de vibration localisés de l'atome (e) dans la direction ox, pour $r_2 = 0.8$ et $\phi_y = 0$ et pour les différentes valeurs de λ

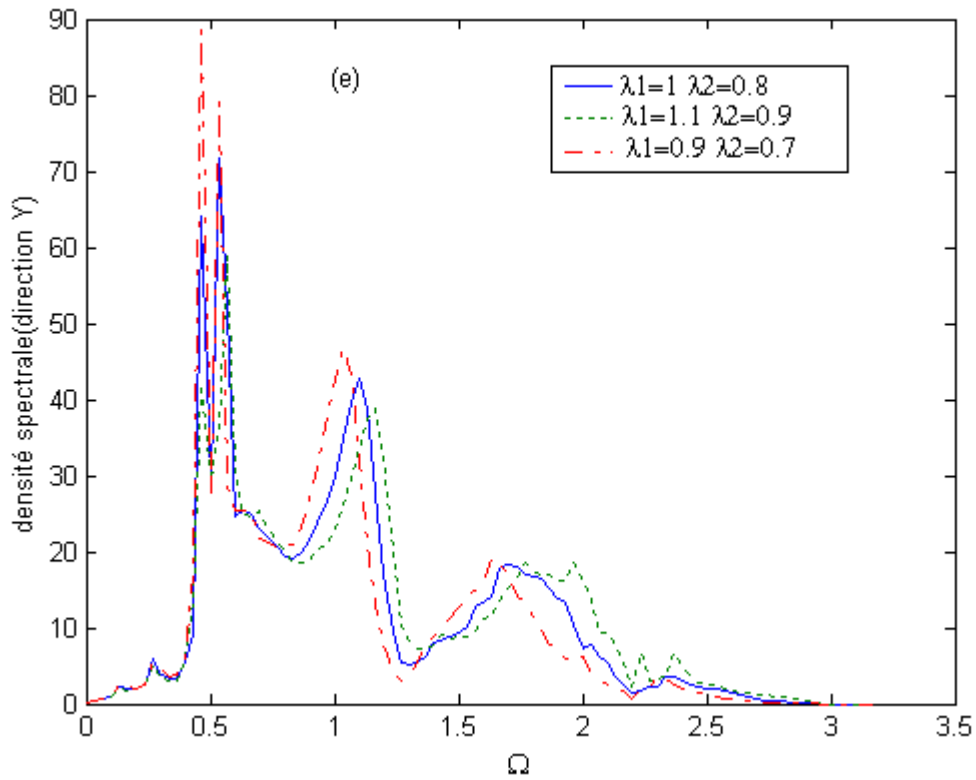


Figure 4.1b : Evolution des courbes des densités spectrales des modes de vibration localisés de l'atome (e) dans la direction oy, pour $r_2=0.8$ et $\varphi_y=0$ et pour les différentes valeurs de λ

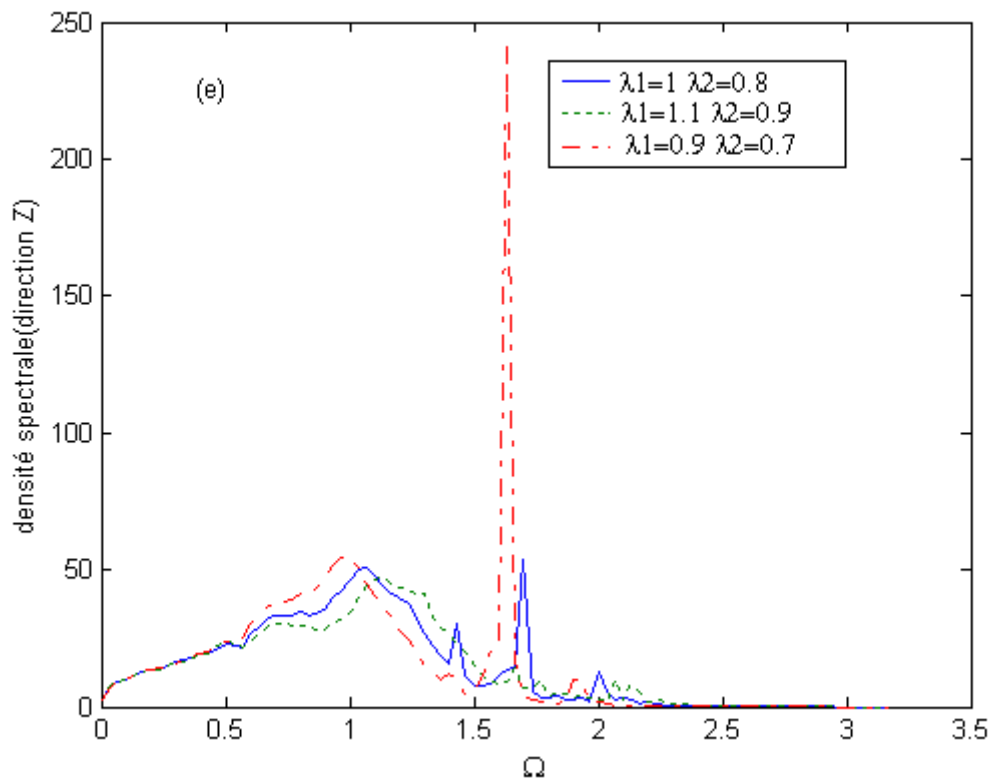


Figure 4.1c : Evolution des courbes des densités spectrales des modes de vibration localisés de l'atome (e) dans la direction oz, pour $r_2=0.8$ et $\varphi_y=0$ et pour les différentes valeurs de λ

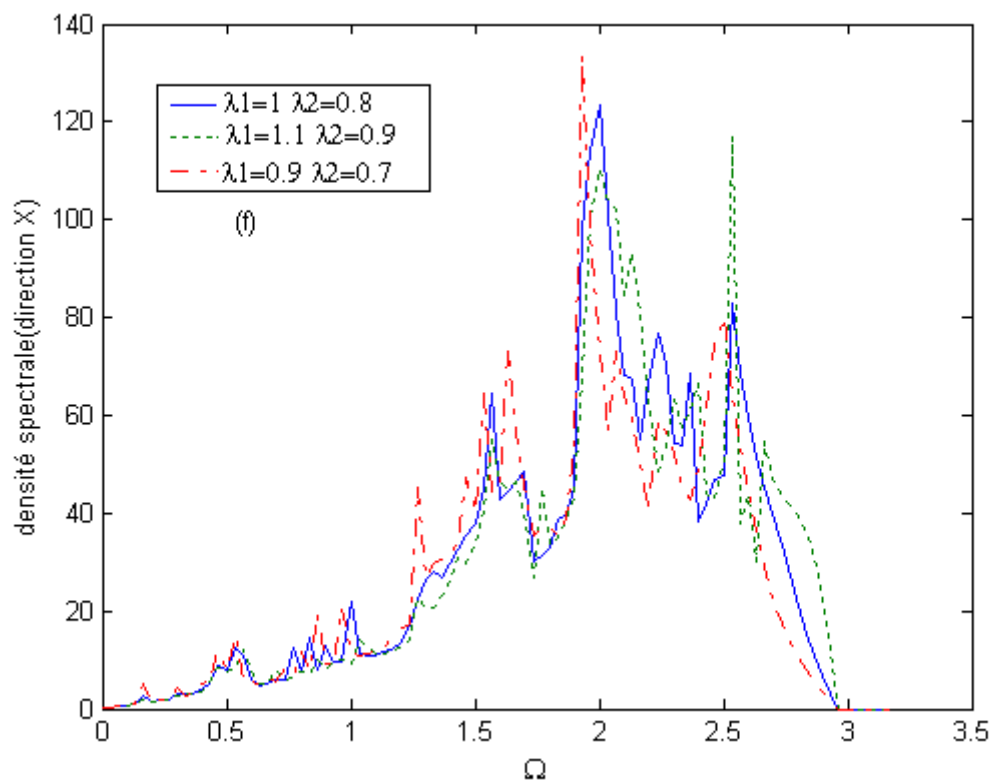


Figure 4.2a : Evolution des courbes des densités spectrales des modes de vibration localisés de l'atome (f) dans la direction ox , pour $r_2 = 0.8$ et $\varphi_y = 0$ et pour les différentes valeurs de λ

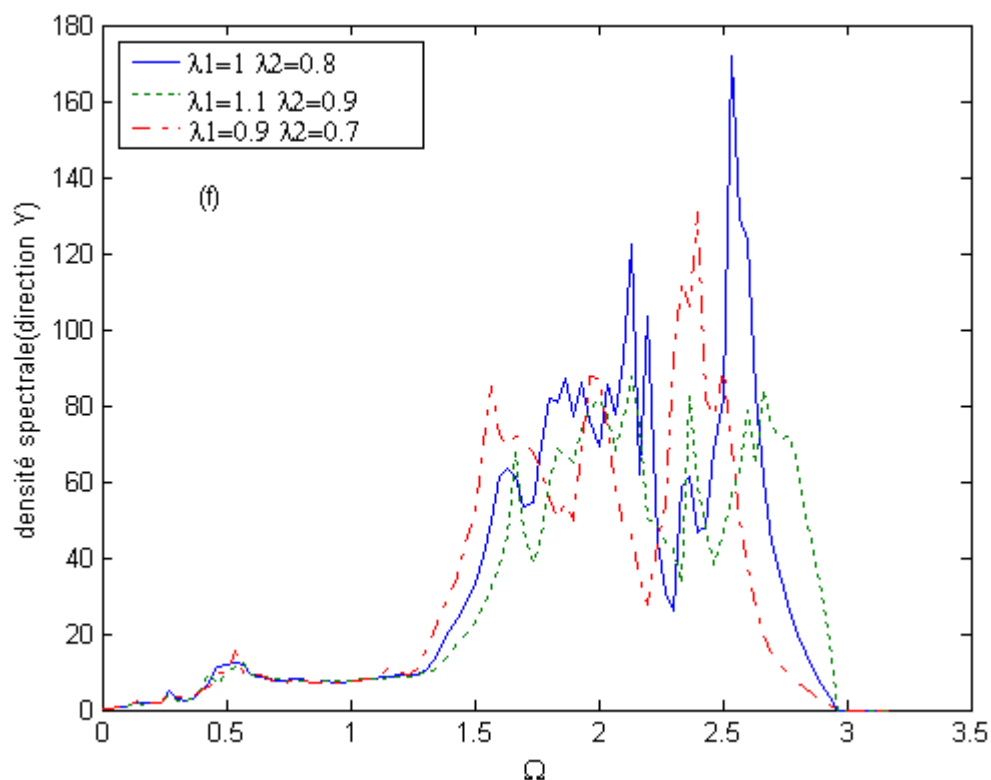


Figure 4.2b : Evolution des courbes des densités spectrales des modes de vibration localisés de l'atome (f) dans la direction oy , pour $r_2 = 0.8$ et $\varphi_y = 0$ et pour les différentes valeurs de λ

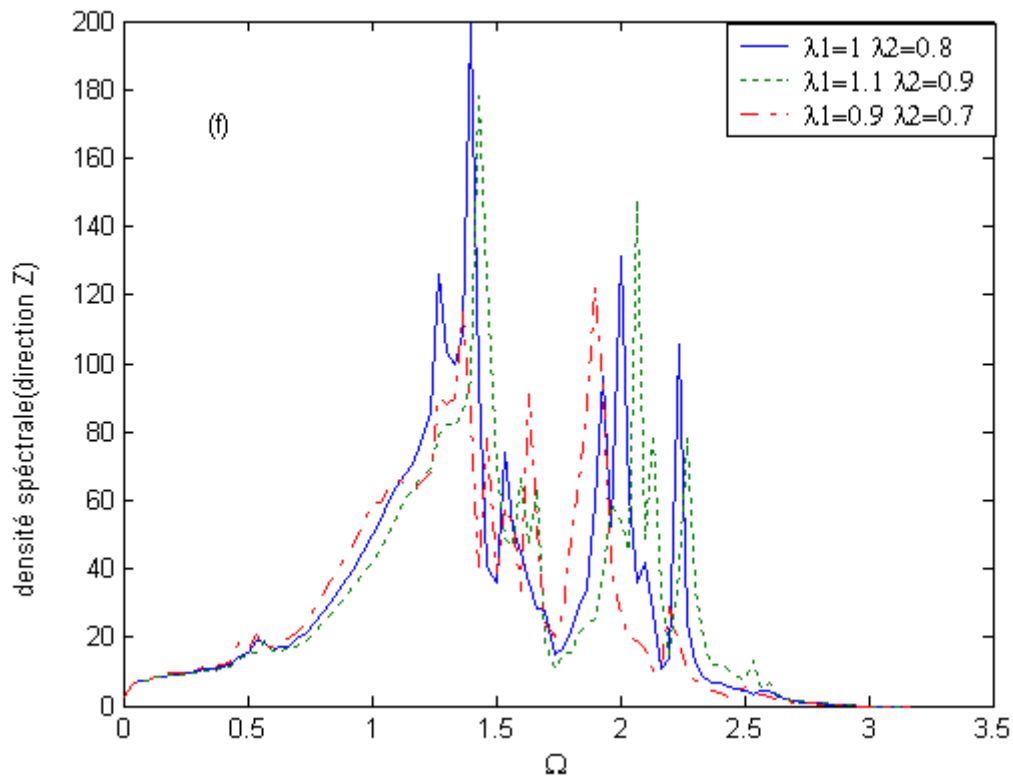


Figure 4.2c : Evolution des courbes des densités spectrales des modes de vibration localisés de l'atome (f) dans la direction oz, pour $r_2 = 0.8$ et $\varphi_y = 0$ et pour les différentes valeurs de λ

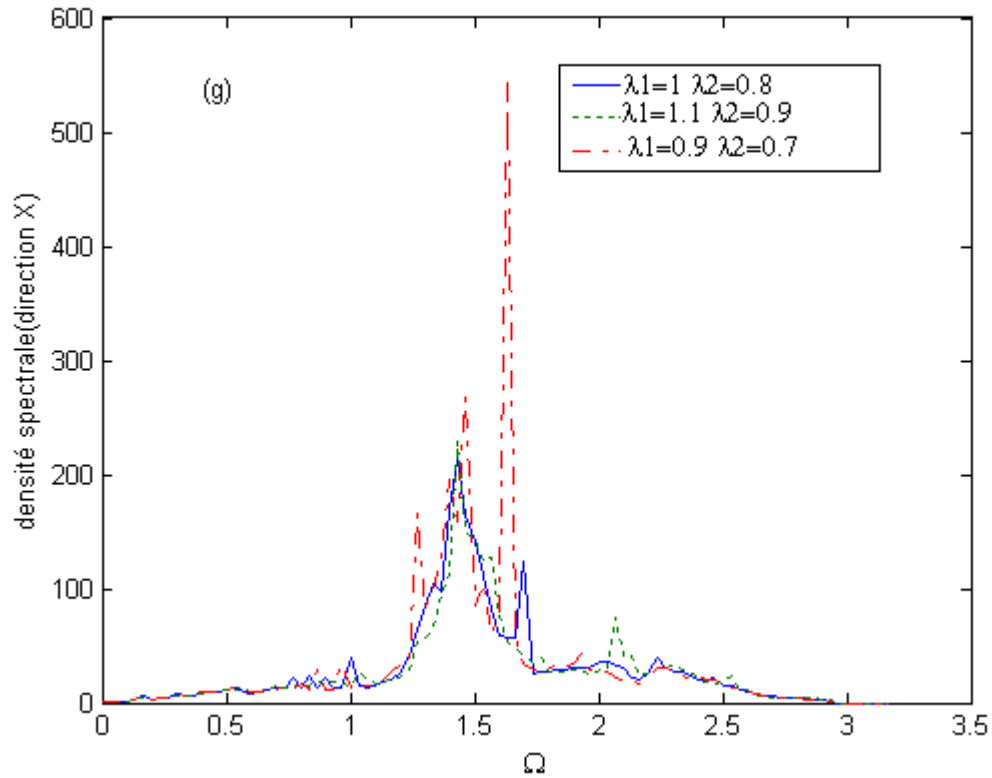


Figure 4.3a : Evolution des courbes des densités spectrales des modes de vibration localisés de l'atome (g) dans la direction ox, pour $r_2 = 0.8$ et $\varphi_y = 0$ et pour les différentes valeurs de λ

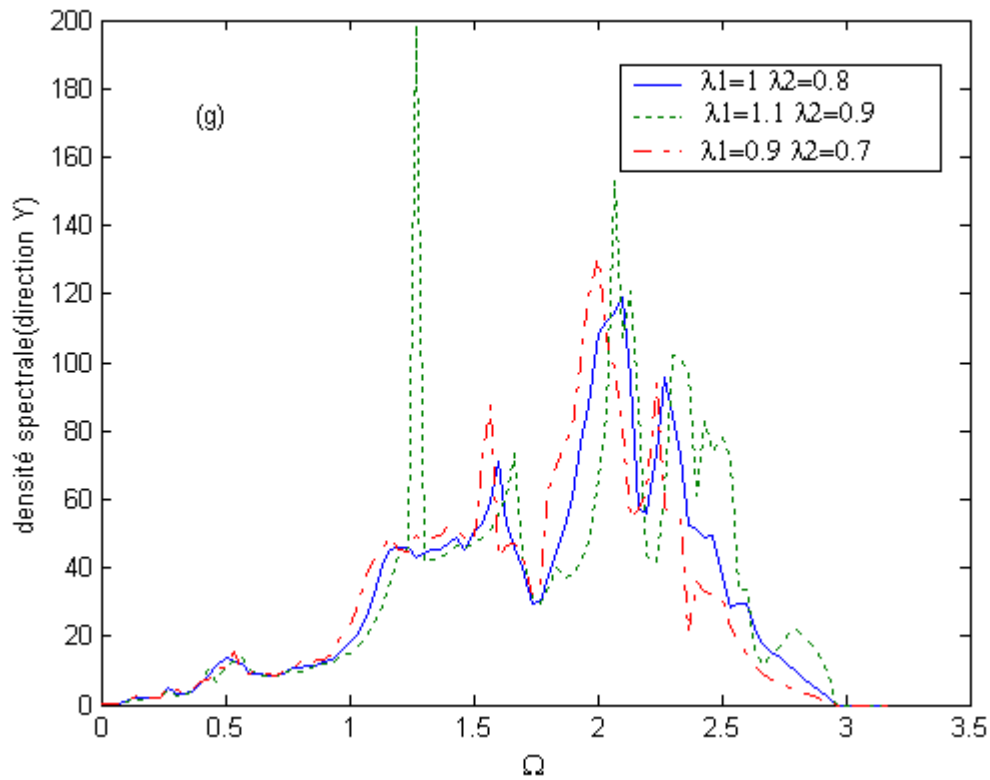


Figure 4.3b : Evolution des courbes des densités spectrales des modes de vibration localisés de l'atome (g) dans la direction oy , pour $r_2 = 0.8$ et $\varphi_y = 0$ et pour les différentes valeurs de λ

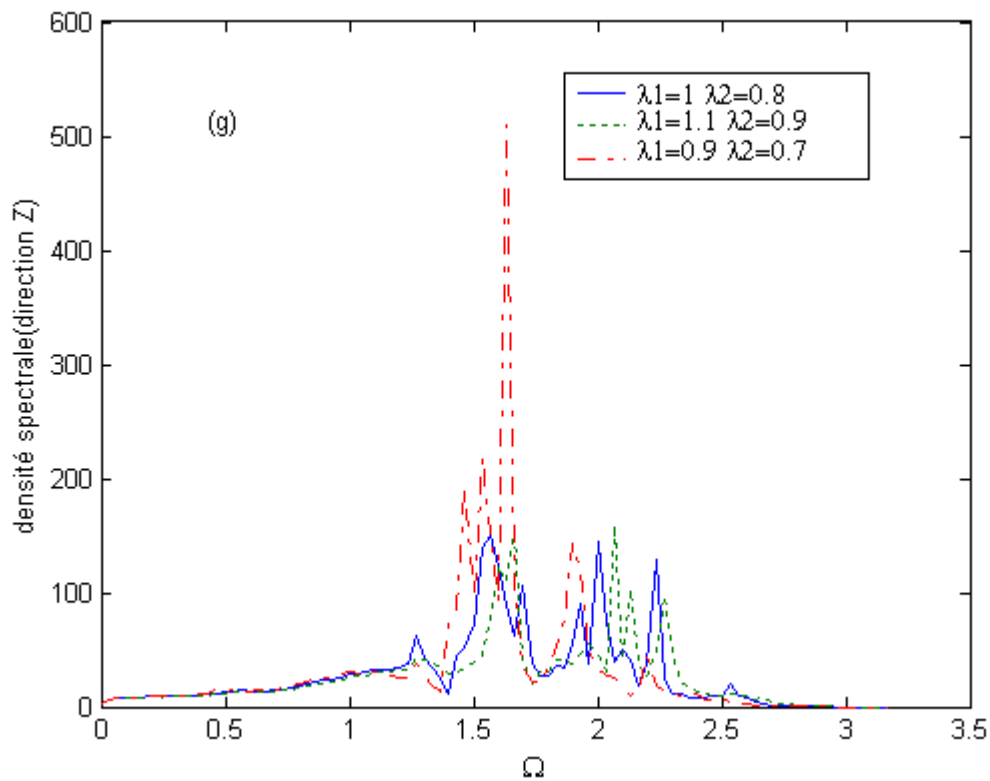


Figure 4.3c : Evolution des courbes des densités spectrales des modes de vibration localisés de l'atome (g) dans la direction oz , pour $r_2 = 0.8$ et $\varphi_y = 0$ et pour les différentes valeurs de λ

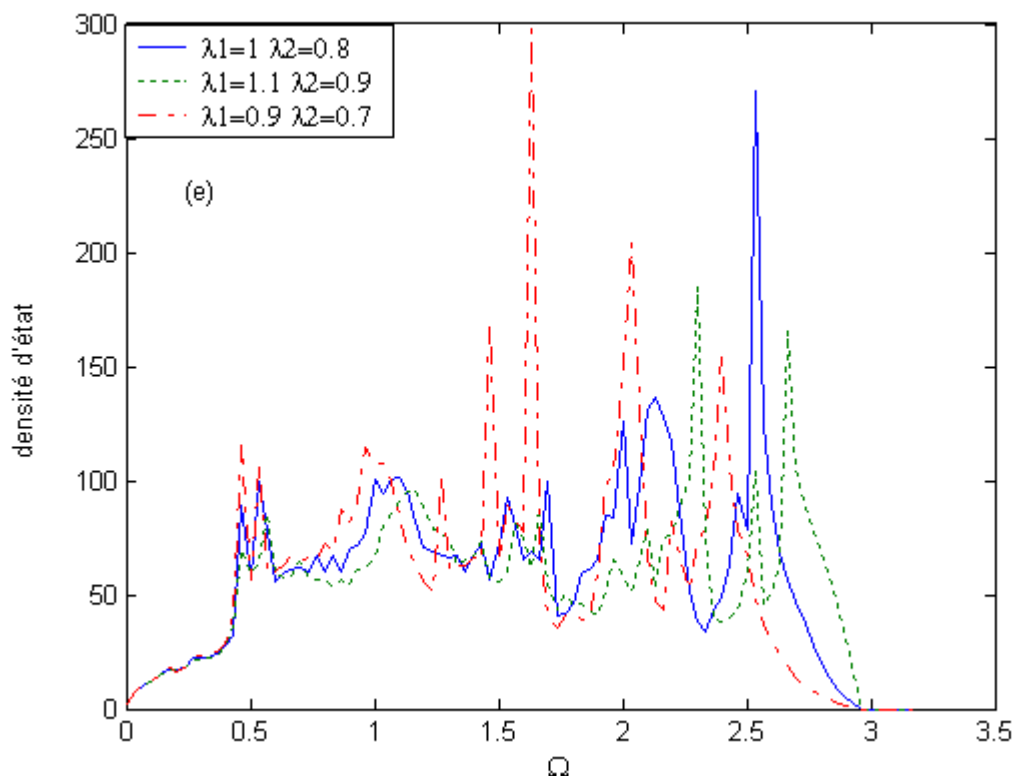


Figure 4.4a : Evolution des courbes des densités d'états des modes de vibration localisés pour l'atome (e), $r_2=0.8$, pour les différentes valeurs de λ

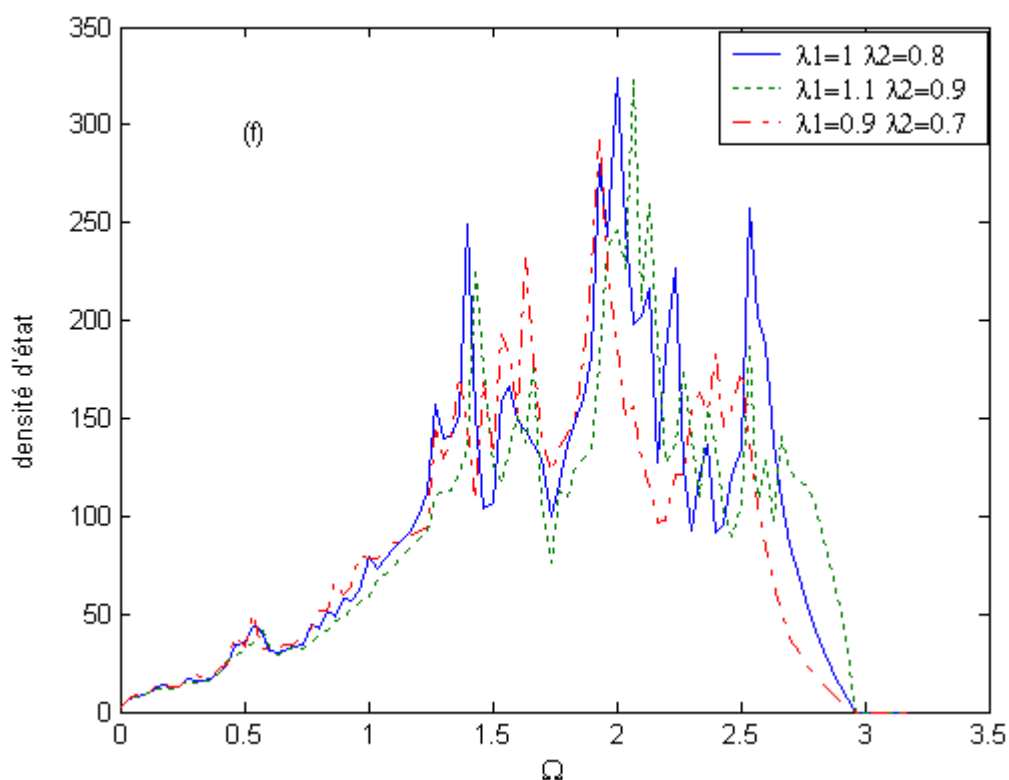


Figure 4.4b : Evolution des courbes des densités d'états des modes de vibration localisés pour l'atomes (f), $r_2=0.8$, pour les différentes valeurs de λ

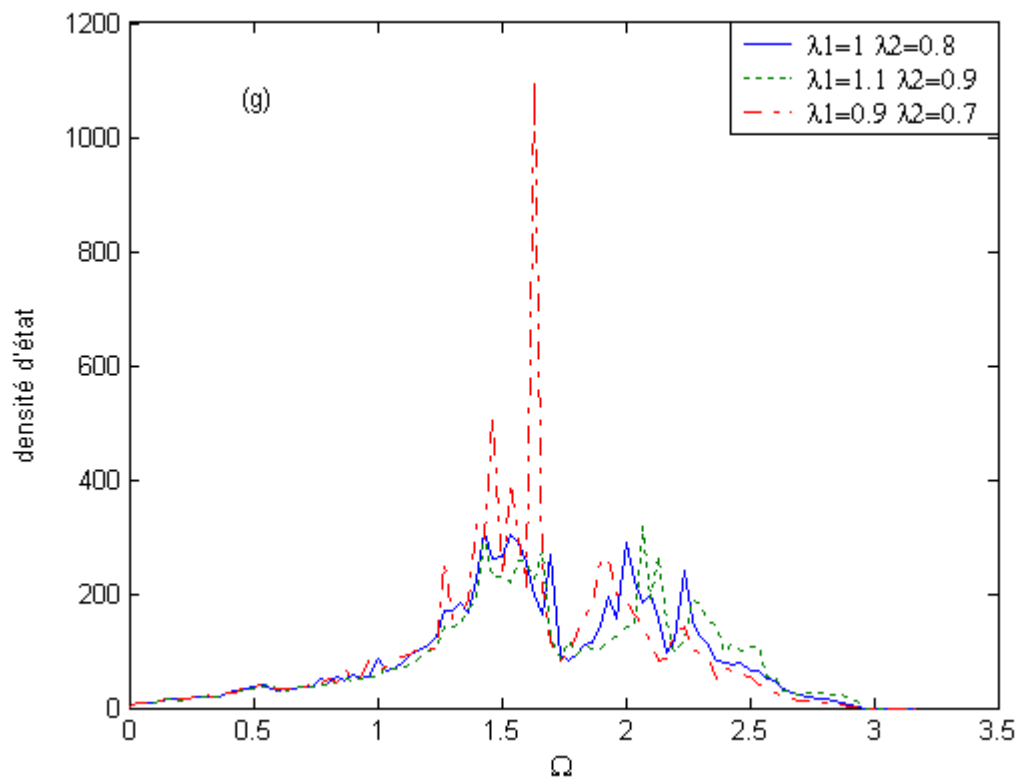


Figure 4.4c : Evolution des courbes des densités d'états des modes de vibration localisés pour l'atomes (g), $r_2=0.8$, pour les différentes valeurs de λ

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons développé une approche théorique qui permet de traiter la diffusion dans les systèmes de basses dimensions présentant des défauts de structure. L'investigation des ondes de diffusion s'effectue en résolvant directement l'équation dynamique avec des conditions aux limites fixées au préalable. Bien que la méthode présentée dérive de travaux menés sur les guides d'ondes électroniques, le cas des ondes vibratoires est beaucoup plus compliqué, la différence essentielle provient du fait que les fonctions d'ondes dans l'équation de Schrödinger sont des scalaires complexes, alors que les fonctions d'onde vibratoires sont décrits, quand à elle par des vecteurs complexes.

La méthode de raccordement s'applique à des systèmes de basses dimensions contenant des défauts variés. Elle est directement extensible à l'étude de la dynamique vibrationnelle en surface des solides cristallins présentant des différents défauts nanométriques. Par ailleurs, cette technique combinée aux fonctions de Green permet, aussi de calculer les densités spectrales et densités d'états.

La méthode élaborée dans le domaine de la dynamique vibrationnelle, peut être appliqué dans l'approximation des liaisons fortes, à l'étude des états électroniques associés à des défauts nanométriques similaires dans des matériaux semi-conducteurs. Cette étude attend de nombreuses applications futures, surtout dans le domaine des semi-conducteurs et des cavités supra-conductrices ou les champs électromagnétiques intenses sont provoqués par les défauts de structures.

Nous avons effectué une reconnaissance très partielle des phénomènes de transport, en étudiant la transmission d'ondes de vibration dans un système de taille mésoscopique. Elle nous a permis de mettre en évidence un certain nombre de phénomènes intéressants telle l'interaction des états localisés et du continuum. Nous avons montré, aussi que la brisure de symétrie laisse une empreinte caractéristique dans les courbes de transmission. Autrement dit, les spectres obtenus par des expériences de diffusion à travers un échantillon contiennent une information sur la structure détaillée du système.

Les structures les plus remarquables dans les courbes de transmission et de conductance ont la forme de résonances de Fano et nous avons pu montrer que l'emploi de ce terme, dans un domaine purement classique éloigné de la mécanique quantique ou on l'utilise généralement n'est pas abusif. Aussi ces structures sont une conséquence de l'interaction entre un continuum d'états et un mode résonant créé par le défaut.

Les résultats numériques que nous obtenons montrent qu'entre la diffusion électronique et la diffusion vibrationnelle, il existe certaines similarités aussi bien dans la formulation mathématique du problème que l'interprétation des résultats qui peuvent être décrits en terme de résonances de type Fano qui couple un mode propageant incident et un mode localisé induit par le défaut et des oscillations de type Fabry-Perot qui impliquent une diffusion multiple d'ondes propageantes. Ces similarités conduisent ainsi à définir une grandeur appelée conductance phononique caractéristique du modèle qui est une grandeur accessible expérimentalement. Néanmoins, du fait du caractère vectoriel et des possibilités de couplage entre les différents modes dûs aux défauts, la diffusion des phonons est plus complexe.

La connaissance du champ vibrationnel est très importante, elle peut être utilisée pour la réalisation des sondes non destructives pour caractériser les défauts de structure dans les matériaux. L'étude de la diffusion contribue au développement de la maîtrise des dépôts de quelques couches atomiques sur les surfaces des substrats. Les couches miniatures déposées ont des intérêts pratiques telles que la lutte contre la corrosion, l'isolation électrique et mécanique. On peut également citer des applications potentielles dans divers domaines technologiques tels que l'isolation phonique, l'amélioration des transducteurs, l'imagerie médicale.

Les perspectives offertes par ce travail consiste à calculer le spectre de phonons d'interfaces pour des films minces de différents épaisseurs. D'autre part, il faudrait appliquer la méthode de raccordement à des systèmes plus étendus en introduisant un défaut, à deux, voire à trois dimensions. Il serait intéressant aussi de calculer les chaleurs spécifiques pour aborder les problèmes de transport thermique de ces films en fonction de l'épaisseur. L'approche théorique présentée dans ce travail peut s'appliquer éventuellement à l'étude d'autres effets électroniques ou magnétiques, liés aux nanostructures des surfaces qui brisent la symétrie translationnelle à deux ou trois dimensions.

APPROXIMATIONS HARMONIQUE DES FORCES CENTRALES EQUATIONS DE MOUVEMENTS

Considérons, dans un référentiel galiléen muni d'un repère cartésien $(0, \vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$, un solide composé de N atomes et dont le centre de gravité est supposé immobile. A un instant t , la position du l -ème atome, (figure A.1), sera désigné par le vecteur $\vec{r}(l, t)$:

$$\vec{r}(l, t) = \vec{r}_0(l, t) + \vec{u}(l, t) \quad (A.1)$$

Où $\vec{r}_0(l, t)$ représente la position de l'atome l . Dans la configuration d'équilibre, et $\vec{u}(l, t)$ son déplacement par rapport à cette position. Nous choisirons par la suite les déplacements $\vec{u}(l, t)$ comme variables dynamiques dans le cadre d'une approximation adiabatique, c'est à dire en supposant que le système électronique n'est pas perturbé par les vibrations atomiques .

Si Φ désigne l'énergie potentielle des interactions atomiques du solide, la force de rappel $\vec{F}(l, t)$ exercée sur le l -ème atome par le reste du système s'écrit :

$$\vec{F}(l, t) = -\vec{\nabla}_l \Phi \quad (A.2)$$

Cette équation traduit le fait que chaque atome se trouve dans le champ qui assure la cohésion du solide et entretient les vibrations atomiques. Elle peut être décomposée, dans l'approximation des forces centrales, en une somme d'énergie potentielle à deux atomes :

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} \sum_l \Phi(l, l') \quad (A.3)$$

Chaque terme $\Phi(l, l')$ ne dépend que des positions relatives des deux atomes l et l' , et sera considéré comme fonction explicite des trois composantes cartésiennes $r_\alpha(l, l', t)$

($\alpha = x, y, z$) du vecteur $\vec{r}_\alpha(l, l', t)$ qu'on définit par :

$$\vec{r}(l, l', t) = \vec{r}(l', t) - \vec{r}(l, t) \quad (A.4)$$

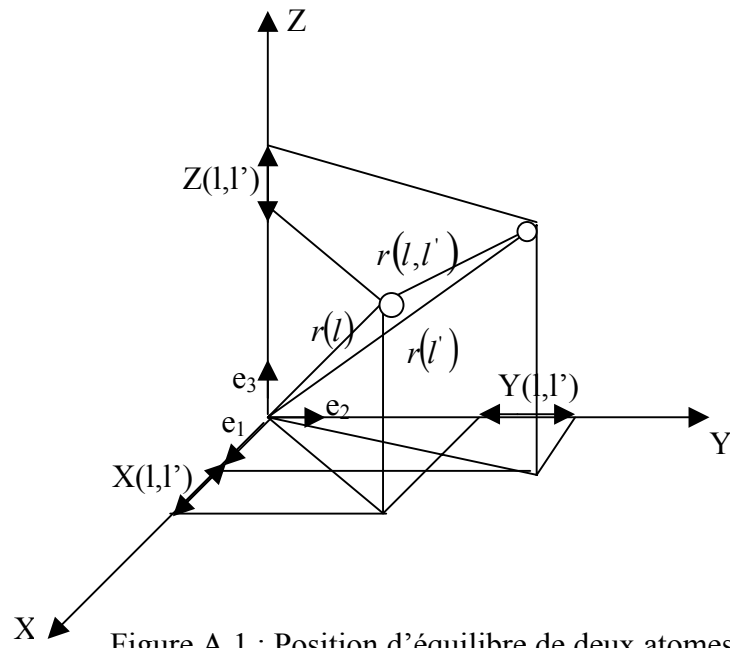


Figure A.1 : Position d'équilibre de deux atomes l et l' relative à une origine dans un repère cartésien (o,e₁,e₂,e₃)

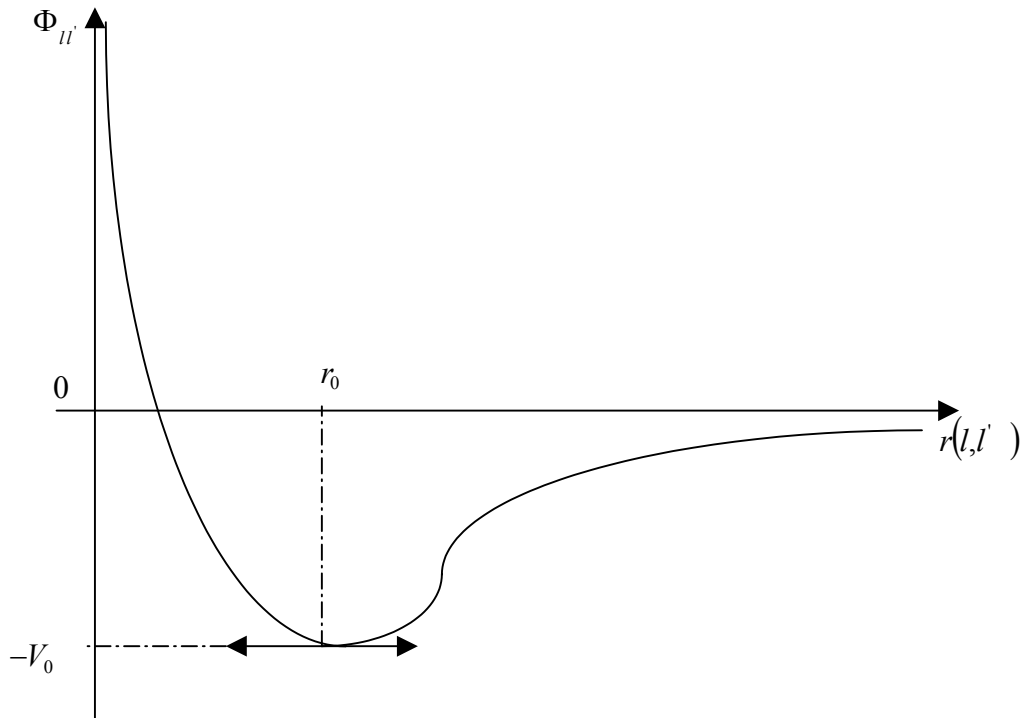


Figure A.2 : Energie d'interaction entre deux atomes

On déduit l'expression d'une variation élémentaire $dr(l,l',t)$ du vecteur $\vec{r}(l,l',t)$ en fonctions des déplacements respectifs des atomes l et l' .

$$d\vec{r}(l,l',t) = \vec{u}(l',t) - \vec{u}(l,t) \quad (A.5)$$

Nous supposons par la suite que les déplacements atomiques autour de leurs position d'équilibre sont suffisamment petits, quel que soit le couple (l,l') , pour que l'on puisse traiter les variables $u_\alpha(l,t)$ dans l'hypothèse de l'approximation harmonique. Cette approximation consiste à négliger les termes d'ordre supérieur à deux dans les développements de Taylor des fonctions $\Phi(l,l')$:

$$\Phi(l,l') = \Phi_0(l,l') + \sum_{\alpha} \Phi'_{\alpha}(l,l') [u_{\alpha}(l',t) - u_{\alpha}(l,t)] + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \Psi_{\alpha, \beta}(l,l') [u_{\alpha}(l',t) - u_{\alpha}(l,t)] [u_{\beta}(l',t) - u_{\beta}(l,t)] \quad (A.6)$$

avec

$$\Phi'_{\alpha}(l,l') = \left[\frac{d\Phi(l,l')}{dr_{\alpha}(l,l')} \right]_0 \quad (A.7a)$$

et

$$\Psi_{\alpha, \beta}(l,l') = \left[\frac{d^2\Phi(l,l')}{dr_{\alpha}(l,l') dr_{\beta}(l,l')} \right] \quad (A.7b)$$

$(\alpha, \beta = x, y, z)$

L'indice zéro indique que les fonctions sont calculées pour la configuration d'équilibre, ce qui annule les constantes $\Phi_{\alpha, \beta}(l,l')$

Le premier terme $\Phi_0(l,l')$ étant constant, il est sans intérêt pour la description des vibrations atomiques.

D'après la loi fondamentale de la dynamique, la α -ème composante cartésienne F_{α} de la force de rappel qu'exerce les atomes du système sur le l -ème atome de masse $m(l)$ s'écrit :

$$F_{\alpha}(l,t) = m(l) \frac{d^2 u_{\alpha}(l,t)}{dt^2} \quad (A.8)$$

D'après (A.2), (A.3) et (A.6) la même composante $F_{\alpha}(l,t)$ s'exprime par :

$$F_{\alpha}(l,l') = \sum_{l \neq l'} \sum_{\beta} \Psi_{\alpha\beta}(l,l') [u_{\beta}(l',t) - u_{\beta}(l,t)] \quad (\text{A.9})$$

Dans cette équation $\Psi_{\alpha\beta}(l,l')$ a la même dimension qu'une constante de force $K(l,l')$ définie en général par :

$$K(l,l') = \left[\frac{d^2 \Phi(l,l')}{dr^2(l,l')} \right]_0 \quad (l \neq l') \quad (\text{A.10})$$

pour établir la relation entre les deux constantes $\Psi_{\alpha\beta}(l,l')$ et $K(l,l')$, nous procéderons par décomposition des dérivées de (A.7.a) A fin d'alléger les équations, nous ôterons provisoirement les indices l et l' des composantes cartésiennes r_{α} ($\alpha=x,y,z$) et du module $r = (r_x^2 + r_y^2 + r_z^2)^{1/2}$ de $\vec{r}(l,l')$ en utilisant la relation :

$$\frac{d}{dr_{\beta}} = \left(\frac{dr}{dr_{\beta}} \right) \frac{d}{dr}$$

Nous obtenons successivement :

$$\frac{d^2 \Phi(l,l')}{dr_{\alpha} dr_{\beta}} = \frac{d}{dr_{\alpha}} \left(\frac{d\Phi(l,l')}{dr} \frac{dr}{dr_{\beta}} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \Phi(l,l')}{dr_{\alpha} dr_{\beta}} = \frac{r_{\beta}}{r} \frac{d}{dr_{\alpha}} \left(\frac{d\Phi(l,l')}{dr} \right) + \left(\frac{d\Phi(l,l')}{dr} \right) \frac{d}{dr_{\alpha}} \left(\frac{r_{\beta}}{r} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \Phi(l,l')}{dr_{\alpha} dr_{\beta}} = \frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r} \left(\frac{d^2 \Phi(l,l')}{dr^2} \right) + \left(\frac{d\Phi(l,l')}{dr} \right) \frac{d}{dr_{\alpha}} \left(\frac{r_{\beta}}{r} \right)$$

En prenant les deux membres à la configuration d'équilibre ; le deuxième terme contenant

$\left[\frac{d\Phi(l,l')}{dr(l,l')} \right]$ s'annule et on obtient la relation suivante :

$$\Psi_{\alpha\beta}(l,l') = \left[\frac{r_{\alpha} r_{\beta}}{r^2} \right]_0 K(l,l') \quad (\text{A.11})$$

D'après les relations (A.8) et (A.9), l'équation de mouvements du l -ème atome suivant la direction cartésienne α , ($\alpha=x,y,z$) peut donc s'écrire :

$$m(l) \frac{d^2 u_\alpha(l,t)}{dt^2} = \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} \left(\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right)_0 K(l,l') [u_\beta(l',t) - u_\beta(l,t)] \quad (\text{A.12})$$

Dans le cadre d'une approximation harmonique, L'excitation d'un mode propre de fréquence angulaire ω au sein du solide donne lieu à des oscillations régulières qu'on peut d'écrire, pour une température donnée, par les équations de la forme :

$$u_\alpha(l,t) = u_\alpha(l,\omega) \exp(j\omega t) \quad (\text{A.13})$$

Où $u_\alpha(l,t)$ est l'amplitude de vibration de l'atome l suivant la direction cartésienne. En insérant l'équation (A.13) dans (A.12), nous déduisons pour chaque fréquence ω une équation indépendante du temps qui s'écrit :

$$\omega^2 m(l) u_\alpha(l,\omega) - \sum_{l' \neq l} \sum_{\beta} K(l,l') \left(\frac{r_\alpha r_\beta}{r^2} \right) [u_\beta(l',\omega) - u_\beta(l,\omega)] = 0 \quad (\text{A.14})$$

Cette équation traduit ainsi, dans l'approximation harmonique associée au modèle des forces centrales, les corrélations entre les déplacements atomiques induits par l'agitation thermique .

Calcul de la vitesse de groupe

La vitesse de groupe V_g est définie seulement pour des vecteurs d'ondes q réels .

$$V_g = \frac{\partial \omega}{\partial q} \quad (\text{B.1})$$

si non, on impose $V_g = 0$.

Pour calculer cette dérivée, on peut appliquer les routines standard existantes, basées sur un schéma <<différences finies>> plus ou moins compliqué. Nous utiliserons cependant une méthode, qui semble a priori moins directe, mais qui se révélera au bout du compte plus simple et même plus avantageuse en termes de nombre de calculs .

On part du problème du guide d'ondes parfait,

$$D(q)\vec{u} = -\omega^2 \vec{u} \quad (\text{B.2})$$

La similitude formelle entre l'équation (B.2) et l'équation de Schrödinger stationnaire

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{B.3})$$

nous pousse à tenter une approche que nous appellerons perturbative, puisqu'elle est calquée sur le traitement des perturbations indépendantes du temps en mécanique quantique .

Supposons connus tous les éléments de l'équation

$$D(q_0)\vec{u}(q_0) = -\omega^2(q_0)\vec{u}(q_0) \quad (\text{B.4})$$

le rôle de perturbation est joué par accroissement infinitésimal Δq tel que :

$$q = q_0 + \Delta q \quad (\text{B.5})$$

si l'on se limite au premier ordre, on considère que le vecteur propre est constant.

$$\vec{u}(q) = \vec{u}(q_0) \quad (\text{B.6})$$

Par contre ;

$$D(q) = D(q_0) + \Delta q \frac{\partial D}{\partial q} \quad (\text{B.7})$$

Et

$$\omega^2(q) = \omega^2(q_0) + \Delta q \frac{\partial \omega^2}{\partial q} \quad (\text{B.8})$$

on écrit l'équation (B.2) en tenant compte de ces approximations, ce qui nous donne successivement :

$$\begin{aligned} & \left[D(q_0) + \omega^2(q_0) + \Delta q \frac{\partial D}{\partial q} + \Delta q \frac{\partial \omega^2}{\partial q} \right] \bar{u}(q_0) = 0 \\ \Rightarrow & \frac{\partial D}{\partial q} \bar{u} = - \frac{\partial \omega^2}{\partial q} \bar{u} \\ \Rightarrow & \bar{u}' \frac{\partial D}{\partial q} \bar{u} = - \frac{\partial \omega^2}{\partial q} \bar{u}' \bar{u} = - \frac{\partial \omega^2}{\partial q} \\ \Rightarrow & \frac{\partial \omega}{\partial q} = - \frac{1}{2\omega} \bar{u}' \frac{\partial D}{\partial q} \bar{u} \quad (\text{B.9}) \end{aligned}$$

La matrice D étant connue, il est possible d'en faire la dérivée analytique (B.9) nous permet de calculer la vitesse de groupe de façon élégante.

Nous donnons ci-dessous la forme explicite de cette dérivée pour le cas d'un double plan.

$$\left[\frac{\partial D}{\partial q} \right] = \begin{bmatrix} M_1 & M_4 & 0 & M_5 & 0 & M_6 \\ M_4 & M_2 & 0 & 0 & M_7 & M_8 \\ 0 & 0 & M_3 & M_6 & M_8 & M_9 \\ M_5 & 0 & -M_6 & M_1 & M_4 & 0 \\ 0 & M_7 & -M_8 & M_4 & M_2 & 0 \\ -M_6 & -M_8 & M_9 & 0 & 0 & M_3 \end{bmatrix}$$

Dont les éléments sont :

$$M_1 = i\left(Z - \frac{1}{Z}\right)(1 + r_2 \cos(\varphi_y))$$

$$M_2 = ir_2 \left(Z + \frac{1}{Z}\right) \cos(\varphi_y)$$

$$M_3 = 0$$

$$M_4 = -r_2 \left(Z + \frac{1}{Z}\right) \sin(\varphi_y)$$

$$M_5 = i\frac{r_2}{2} \left(Z - \frac{1}{Z}\right)$$

$$M_6 = i\frac{r_2}{2} \left(Z + \frac{1}{Z}\right)$$

$$M_7 = 0$$

$$M_8 = 0$$

$$M_9 = i\left(Z - \frac{1}{Z}\right)$$

Annexe C1 :

Matrice à base augmentée

$$[A] = \begin{bmatrix} A_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A_4 & -A_5 & 0 & A_6 & 0 & -A_6 \\ 0 & A_2 & 0 & 0 & A_7 & A_5 & -A_5 & A_7 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_3 & 0 & A_5 & A_4 & 0 & 0 & 0 & -A_6 & 0 & A_6 \\ 0 & 0 & 0 & A_1 & 0 & 0 & A_6 & 0 & A_6 & A_4 & -A_5 & 0 \\ 0 & A_7 & -A_5 & 0 & A_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -A_5 & A_7 & 0 \\ 0 & -A_5 & A_4 & 0 & 0 & A_3 & A_6 & 0 & A_6 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

dont les éléments sont :

$$A_1 = \Omega^2 - 2 - 3r_2$$

$$A_2 = \Omega^2 - 2 - 3r_2 + 2\cos(\varphi_y)$$

$$A_3 = \Omega^2 - 1 - 2r_2$$

$$A_4 = 1 + r_2 \cos(\varphi_y)$$

$$A_5 = ir_2 \sin(\varphi_y)$$

$$A_6 = \frac{r_2}{2}$$

$$A_7 = r_2 \cos(\varphi_y)$$

$$[B] = \begin{bmatrix} B_1 & B_4 & 0 & B_5 & 0 & B_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B_4 & B_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_3 & B_5 & 0 & B_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B_5 & 0 & -B_5 & B_1 & B_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_4 & B_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -B_5 & 0 & B_5 & 0 & 0 & B_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

dont les éléments sont :

$$B_1 = -(1 + r_2 \cos(\varphi_y))$$

$$B_2 = -r_2 \cos(\varphi_y)$$

$$B_3 = 0$$

$$B_4 = -i \sin(\varphi_y)$$

$$B_5 = -\frac{r_2}{2}$$

Annexe C2

Matrice défaut du puits atomique : tous les autres éléments qui ne sont pas donnés sont nuls.

$$\begin{aligned}
 d(1,1) &= \Omega^2 - 2\lambda_h - \lambda_{vh} - 2\lambda_{lh} & d(1,4) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y & d(1,5) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y & d(1,7) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} \\
 d(1,9) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} & d(1,10) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y & d(1,11) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y & d(1,13) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} & d(1,15) &= -\frac{\lambda_{vh}}{2} \\
 \dots\dots\dots & & & & & & & & & \\
 d(2,2) &= \Omega^2 - 2\lambda_l (\cos\varphi_y - 1) - 2\lambda_{lh} & d(2,4) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y & d(2,5) &= \lambda_{lh} \cos\varphi_y & d(2,10) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y \\
 d(2,11) &= \lambda_{lh} \cos\varphi_y & & & & & & & & \\
 \dots\dots\dots & & & & & & & & & \\
 d(3,3) &= \Omega^2 - \lambda_{vh} & d(3,7) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} & d(3,9) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} & d(3,13) &= -\frac{\lambda_{vh}}{2} & d(3,15) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} \\
 \dots\dots\dots & & & & & & & & & \\
 d(4,4) &= \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh} & d(4,1) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y & d(4,2) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y & d(4,6) &= -\frac{r_2}{2} \\
 d(4,16) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y & d(4,17) &= ir_2 \sin\varphi_y & d(4,19) &= \frac{r_2}{2} & d(4,21) &= \frac{r_2}{2} \\
 \dots\dots\dots & & & & & & & & & \\
 d(5,5) &= \Omega^2 - 2\lambda_l (\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2 & d(5,2) &= \lambda_{lh} \cos\varphi_y & d(5,1) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y \\
 d(5,8) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y & d(5,9) &= i\lambda_{vl} \sin\varphi_y & d(5,16) &= ir_2 \sin\varphi_y & d(5,17) &= r_2 \cos\varphi_y \\
 \dots\dots\dots & & & & & & & & & \\
 d(6,6) &= \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \lambda_{vl} & d(6,8) &= i\lambda_{vl} \sin\varphi_y & d(6,9) &= \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y \\
 d(6,4) &= -\frac{r_2}{2} & d(6,19) &= \frac{r_2}{2} & d(6,21) &= \frac{r_2}{2} \\
 \dots\dots\dots & & & & & & & & & \\
 d(7,7) &= \Omega^2 - 1 - \frac{\lambda_{vh}}{2} - \frac{3}{2}r_2 & d(7,1) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} & d(7,3) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} & d(7,9) &= \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}) \\
 d(7,19) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y & d(7,17) &= ir_2 \sin\varphi_y & d(7,16) &= \frac{r_2}{2} & d(7,18) &= -\frac{r_2}{2} \\
 \dots\dots\dots & & & & & & & & & \\
 d(8,8) &= \Omega^2 - 2\lambda_l (\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{vl} - r_2 & d(8,5) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y & d(8,6) &= -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y \\
 d(8,19) &= ir_2 \sin\varphi_y & d(8,20) &= r_2 \cos\varphi_y & & & & & & \\
 \dots\dots\dots & & & & & & & & & \\
 d(9,9) &= \Omega^2 - r_v - \frac{\lambda_{vh}}{2} - r_{vl} & d(9,1) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} & d(9,3) &= \frac{\lambda_{vh}}{2} & d(9,5) &= i\lambda_{vl} \sin\varphi_y \\
 d(9,6) &= \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y & d(9,7) &= \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}) & d(9,16) &= -\frac{r_2}{2} & d(9,16) &= \frac{r_2}{2} \\
 \dots\dots\dots & & & & & & & & &
 \end{aligned}$$

$$d(10,10)=\Omega^2-1-\lambda_h-\frac{3}{2}r_2-\lambda_{lh} \quad d(10,1)=\lambda_h+\lambda_{lh}\cos\varphi_y \quad d(10,2)=i\lambda_{lh}\sin\varphi_y$$

$$d(10,12)=\frac{r_2}{2} \quad d(10,22)=1+r_2\cos\varphi_y \quad d(10,23)=-ir_2\sin\varphi_y \quad d(10,25)=\frac{r_2}{2} \quad d(10,27)=-\frac{r_2}{2}$$

$$d(11,11)=\Omega^2-2\lambda_l(\cos\varphi_y-1)-\lambda_{lh}-\lambda_{vl}-r_2 \quad d(11,2)=\lambda_{lh}\cos\varphi_y \quad d(11,1)=i\lambda_{lh}\sin\varphi_y$$

$$d(11,14)=\lambda_{vl}\cos\varphi_y \quad d(11,15)=i\lambda_{vl}\sin\varphi_y \quad d(11,22)=-ir_2\sin\varphi_y \quad d(11,23)=r_2\cos\varphi_y$$

$$d(12,12)=\Omega^2-\lambda_v-\frac{r_2}{2}-\lambda_{vl} \quad d(12,10)=\frac{r_2}{2} \quad d(12,14)=i\lambda_{vl}\sin\varphi_y$$

$$d(12,15)=\lambda_v+\lambda_{vl}\cos\varphi_y \quad d(12,25)=-\frac{r_2}{2} \quad d(12,27)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(13,13)=\Omega^2-1-\frac{\lambda_{vh}}{2}-\frac{3}{2}r_2 \quad d(13,1)=\frac{\lambda_{vh}}{2} \quad d(13,3)=-\frac{\lambda_{vh}}{2} \quad d(13,15)=-\frac{1}{2}(r_2-\lambda_{vh})$$

$$d(13,25)=1+r_2\cos\varphi_y \quad d(13,26)=ir_2\sin\varphi_y \quad d(13,22)=\frac{r_2}{2} \quad d(13,24)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(14,14)=\Omega^2-2\lambda_l(\cos\varphi_y-1)-\lambda_{vl}-r_2 \quad d(14,11)=\lambda_{vl}\cos\varphi_y \quad d(14,12)=-i\lambda_{vl}\sin\varphi_y$$

$$d(14,25)=-ir_2\sin\varphi_y \quad d(14,26)=r_2\cos\varphi_y$$

$$d(15,15)=\Omega^2-r_v-\frac{\lambda_{vh}}{2}-r_{vl} \quad d(15,1)=-\frac{\lambda_{vh}}{2} \quad d(15,3)=\frac{\lambda_{vh}}{2} \quad d(15,11)=-i\lambda_{vl}\sin\varphi_y$$

$$d(15,12)=\lambda_v+\lambda_{vl}\cos\varphi_y \quad d(15,13)=-\frac{1}{2}(r_2-\lambda_{vh}) \quad d(15,22)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(15,24)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(16,16)=\Omega^2-2-3r_2 \quad d(16,4)=1+r_2\cos\varphi_y \quad d(16,5)=-ir_2\sin\varphi_y \quad d(16,7)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(16,9)=-\frac{r_2}{2} \quad d(16,28)=1+r_2\cos\varphi_y \quad d(16,29)=ir_2\sin\varphi_y \quad d(16,31)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(16,31)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(17,17)=\Omega^2-2(\cos\varphi_y-1)-3r_2 \quad d(17,4)=-ir_2\sin\varphi_y \quad d(17,5)=r_2\cos\varphi_y$$

$$d(17,20)=r_2\cos\varphi_y \quad d(17,21)=ir_2\sin\varphi_y \quad d(17,28)=ir_2\sin\varphi_y$$

$$d(17,29)=r_2\cos\varphi_y$$

$$d(18,16)=\Omega^2-1-2r_2 \quad d(18,7)=-\frac{r_2}{2} \quad d(18,9)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(18,20)=ir_2\sin\varphi_y \quad d(18,21)=1+r_2\cos\varphi_y \quad d(18,31)=\frac{r_2}{2} \quad d(18,33)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(19,19)=\Omega^2-2-3r_2 \quad d(19,4)=\frac{r_2}{2} \quad d(19,6)=\frac{r_2}{2} \quad d(19,7)=1+r_2\cos\varphi_y$$

$$d(19,8)=-ir_2 \sin\varphi_y \quad d(19,28)=\frac{r_2}{2} \quad d(19,30)=-\frac{r_2}{2} \quad d(19,31)=1+r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(16,32)=ir_2 \sin\varphi_y$$

$$d(20,20)=\Omega^2-2(\cos\varphi_y-1)-3r_2 \quad d(20,7)=-ir_2 \sin\varphi_y \quad d(20,8)=r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(20,17)=r_2 \cos\varphi_y \quad d(20,18)=-ir_2 \sin\varphi_y \quad d(20,31)=ir_2 \sin\varphi_y$$

$$d(20,32)=r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(21,21)=\Omega^2-1-2r_2 \quad d(21,4)=\frac{r_2}{2} \quad d(21,6)=\frac{r_2}{2} \quad d(21,17)=-ir_2 \sin\varphi_y$$

$$d(21,18)=1+r_2 \cos\varphi_y \quad d(21,28)=-\frac{r_2}{2} \quad d(21,30)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(22,22)=\Omega^2-2-3r_2 \quad d(22,10)=1+r_2 \cos\varphi_y \quad d(22,11)=ir_2 \sin\varphi_y$$

$$d(22,13)=\frac{r_2}{2} \quad d(22,15)=\frac{r_2}{2} \quad d(22,34)=1+r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(22,35)=-ir_2 \sin\varphi_y \quad d(22,37)=\frac{r_2}{2} \quad d(22,39)=-\frac{r_2}{2}$$

$$d(23,23)=\Omega^2-2(\cos\varphi_y-1)-3r_2 \quad d(23,10)=ir_2 \sin\varphi_y \quad d(23,11)=r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(23,26)=r_2 \cos\varphi_y \quad d(23,27)=ir_2 \sin\varphi_y \quad d(23,34)=-ir_2 \sin\varphi_y$$

$$d(23,35)=r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(24,24)=\Omega^2-1-2r_2 \quad d(24,13)=\frac{r_2}{2} \quad d(24,15)=\frac{r_2}{2} \quad d(24,26)=ir_2 \sin\varphi_y$$

$$d(24,27)=1+r_2 \cos\varphi_y \quad d(24,37)=-\frac{r_2}{2} \quad d(24,39)=\frac{r_2}{2}$$

$$d(25,25)=\Omega^2-2-3r_2 \quad d(25,10)=\frac{r_2}{2} \quad d(25,12)=-\frac{r_2}{2} \quad d(25,13)=1+r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(25,14)=ir_2 \sin\varphi_y \quad d(25,34)=\frac{r_2}{2} \quad d(25,36)=\frac{r_2}{2} \quad d(25,37)=1+r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(25,38)=-ir_2 \sin\varphi_y$$

$$d(26,26)=\Omega^2-2(\cos\varphi_y-1)-3r_2 \quad d(26,13)=ir_2 \sin\varphi_y \quad d(26,14)=r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(26,23)=r_2 \cos\varphi_y \quad d(26,24)=-ir_2 \sin\varphi_y \quad d(26,37)=-ir_2 \sin\varphi_y$$

$$d(26,38)=r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(27,27)=\Omega^2-1-2r_2 \quad d(27,10)=-\frac{r_2}{2} \quad d(27,12)=\frac{r_2}{2} \quad d(27,23)=-ir_2 \sin\varphi_y$$

$$d(27,24)=1+r_2 \cos\varphi_y \quad d(27,34)=\frac{r_2}{2} \quad d(27,36)=\frac{r_2}{2}$$

Annexe C3

Matrice dynamique du défaut non symétrique : tous les autres éléments qui ne sont pas donnés sont nuls.

$$\begin{aligned}
 d(1,1) &= \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh}, & d(1,3) &= -\frac{r_2}{2}, & d(1,7) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y, & d(1,8) &= ir_2 \sin\varphi_y, & d(1,10) &= \frac{r_2}{2}, \\
 d(1,12) &= \frac{r_2}{2}, & d(1,13) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, & d(1,14) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, \\
 d(2,2) &= \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2, & d(2,5) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, & d(2,6) &= i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, & d(2,14) &= \lambda_{lh} \cos\varphi_y \\
 d(2,7) &= ir_2 \sin\varphi_y, & d(2,8) &= r_2 \cos\varphi_y, & d(2,13) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, & d(2,14) &= \lambda_{lh} \cos\varphi_y \\
 d(3,3) &= \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \lambda_{vl}, & d(3,1) &= -\frac{r_2}{2}, & d(3,5) &= i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, & d(3,6) &= \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, & d(3,10) &= \frac{r_2}{2}, \\
 d(3,12) &= \frac{r_2}{2} \\
 d(4,4) &= \Omega^2 - 1 - \frac{\lambda_{vh}}{2} - \frac{3}{2}r_2, & d(4,6) &= \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), & d(4,7) &= \frac{r_2}{2}, & d(4,9) &= -\frac{r_2}{2}, & d(4,10) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y, \\
 d(4,11) &= ir_2 \sin\varphi_y, & d(4,13) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, & d(4,15) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
 d(5,2) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, & d(5,3) &= -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, & d(5,5) &= \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{vl} - r_2, & d(5,10) &= ir_2 \sin\varphi_y, \\
 d(5,11) &= r_2 \cos\varphi_y \\
 d(6,2) &= -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, & d(6,3) &= \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, & d(6,4) &= \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), & d(6,6) &= \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \frac{r_{vh}}{2} - \lambda_{vl}, \\
 d(6,7) &= -\frac{r_2}{2}, & d(6,9) &= \frac{r_2}{2}, & d(6,13) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, & d(4,15) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
 d(7,1) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y, & d(7,2) &= -ir_2 \sin\varphi_y, & d(7,4) &= \frac{r_2}{2}, & d(7,6) &= -\frac{r_2}{2}, & d(7,7) &= \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh}, \\
 d(7,9) &= \frac{r_2}{2}, & d(7,16) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, & d(7,17) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y \\
 d(8,1) &= -ir_2 \sin\varphi_y, & d(8,2) &= r_2 \cos\varphi_y, & d(8,8) &= \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2, & d(8,11) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \\
 d(8,12) &= i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, & d(8,16) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, & d(2,17) &= \lambda_{lh} \cos\varphi_y. \\
 d(9,4) &= -\frac{r_2}{2}, & d(9,6) &= \frac{r_2}{2}, & d(9,7) &= \frac{r_2}{2}, & d(9,9) &= \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \lambda_{vl}, & d(9,11) &= i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \\
 d(9,12) &= \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y. \\
 d(10,1) &= \frac{r_2}{2}, & d(10,3) &= \frac{r_2}{2}, & d(10,4) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y, & d(10,5) &= -ir_2 \sin\varphi_y \\
 d(10,10) &= \Omega^2 - 1 - \frac{\lambda_{vh}}{2} - \frac{3}{2}r_2, & d(10,12) &= \frac{1}{2}(\lambda_{vh} - r_2), & d(10,16) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, & d(10,18) &= -\frac{\lambda_{vh}}{2} \\
 d(11,4) &= -ir_2 \sin\varphi_y, & d(11,5) &= r_2 \cos\varphi_y, & d(11,11) &= \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{vl} - r_2, \\
 d(11,2) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, & d(5,3) &= -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d(12,1) &= \frac{r_2}{2}, d(12,3) = \frac{r_2}{2}, d(12,8) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(12,9) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \\
d(12,10) &= \frac{1}{2}(\lambda_{vh} - r_2), d(12,12) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \frac{r_{vh}}{2} - \lambda_{vl}, d(12,16) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(12,18) = \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
d(13,1) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(13,2) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(13,4) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(13,6) = \frac{\lambda_{vh}}{2} \\
d(13,13) &= \Omega^2 - 2r_h - \frac{\lambda_{vh}}{2} - 2r_{lh}, d(13,15) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(13,19) = \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(13,20) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y \\
d(14,1) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(14,2) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(14,14) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2, \\
d(14,19) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(14,20) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y. \\
d(15,4) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(15,6) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(16,13) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(16,15) = \Omega^2 - \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
d(16,7) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(16,8) = -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(16,10) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(16,12) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, \\
d(16,16) &= \Omega^2 - 2r_h - \lambda_{vh} - 2r_{lh}, d(16,22) = \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(16,23) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(16,25) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, \\
d(16,26) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
d(17,7) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(17,8) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(17,17) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - 2\lambda_{lh} \\
d(17,22) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(17,23) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y. \\
d(18,10) &= -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(18,12) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(18,18) = \Omega^2 - \lambda_{vh}, d(18,25) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(18,27) = \frac{\lambda_{vh}}{2} \\
d(19,13) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(19,14) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(19,18) = \Omega^2 - 2r_h - \frac{\lambda_{vh}}{2} - 2r_{lh}, d(19,21) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, \\
d(19,28) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(19,29) = -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(19,33) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, \\
d(20,13) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(20,14) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(20,20) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - 2\lambda_{lh} \\
d(20,28) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(20,29) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y. \\
d(21,19) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(21,21) = \Omega^2 - \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(21,31) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(21,33) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, \\
d(22,16) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(22,17) = -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(22,22) = \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh}, \\
d(22,24) &= -\frac{r_2}{2}, d(22,34) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, d(22,35) = ir_2 \sin\varphi_y, d(22,37) = \frac{r_2}{2}, d(22,39) = \frac{r_2}{2} \\
d(23,16) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(23,17) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(23,23) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2, \\
d(23,26) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, d(23,27) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(23,34) = ir_2 \sin\varphi_y, d(23,35) = r_2 \cos\varphi_y, \\
d(24,22) &= -\frac{r_2}{2}, d(24,24) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \lambda_{vl}, d(24,26) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(24,27) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \\
d(24,37) &= \frac{r_2}{2}, d(24,39) = \frac{r_2}{2},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d(25,16) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, \quad d(25,18) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, \quad d(25,25) = \Omega^2 - 1 - \frac{\lambda_{vh}}{2} - \frac{3}{2}r_2, \quad d(25,27) = \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), \\
d(25,34) &= \frac{r_2}{2}, \quad d(25,36) = -\frac{r_2}{2}, \quad d(25,37) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(25,38) = ir_2 \sin\varphi_y \\
d(26,23) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \quad d(26,24) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \quad d(26,26) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{vl} - r_2 \\
d(26,37) &= ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(26,38) = r_2 \cos\varphi_y, \\
d(27,16) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, \quad d(27,18) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, \quad d(27,25) = \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), \quad d(27,27) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \frac{r_{vh}}{2} - \lambda_{vl}, \\
d(27,23) &= -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \quad d(27,24) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \quad d(27,34) = -\frac{r_2}{2}, \quad d(27,36) = \frac{r_2}{2}. \\
d(28,19) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, \quad d(28,20) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, \quad d(28,28) = \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh}, \\
d(28,30) &= \frac{r_2}{2}, \quad d(28,40) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(28,41) = -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(28,43) = \frac{r_2}{2}, \quad d(28,45) = -\frac{r_2}{2} \\
d(29,19) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, \quad d(29,20) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y, \quad d(29,29) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2 \\
d(29,32) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \quad d(29,33) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \quad d(29,40) = -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(29,41) = r_2 \cos\varphi_y, \\
d(30,28) &= \frac{r_2}{2}, \quad d(30,30) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \lambda_{vl}, \quad d(30,32) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \quad d(30,33) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y \\
d(30,43) &= -\frac{r_2}{2}, \quad d(30,45) = \frac{r_2}{2}. \\
d(31,19) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, \quad d(31,21) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, \quad d(31,31) = \Omega^2 - 1 - \frac{\lambda_{vh}}{2} - \frac{3}{2}r_2, \quad d(33,27) = -\frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}) \\
d(31,40) &= \frac{r_2}{2}, \quad d(31,42) = \frac{r_2}{2}, \quad d(31,43) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(31,44) = -ir_2 \sin\varphi_y. \\
d(32,29) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \quad d(32,30) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \quad d(32,32) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{vl} - r_2 \\
d(32,43) &= -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(32,44) = r_2 \cos\varphi_y, \\
d(33,19) &= -\frac{\lambda_{vh}}{2}, \quad d(33,21) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, \quad d(33,29) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \quad d(33,30) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y \\
d(33,31) &= -\frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), \quad d(33,33) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \frac{r_{vh}}{2} - \lambda_{vl}, \quad d(33,40) = \frac{r_2}{2}, \quad d(33,42) = \frac{r_2}{2}. \\
d(34,22) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(34,23) = -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(34,25) = \frac{r_2}{2}, \quad d(34,27) = -\frac{r_2}{2} \\
d(34,34) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, \quad d(34,46) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(34,47) = ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(34,49) = \frac{r_2}{2}, \\
d(34,51) &= \frac{r_2}{2} \\
d(35,22) &= -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(35,23) = r_2 \cos\varphi_y, \quad d(35,35) = \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, \\
d(35,38) &= r_2 \cos\varphi_y, \quad d(35,39) = ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(35,46) = ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(35,47) = r_2 \cos\varphi_y \\
d(36,25) &= -\frac{r_2}{2}, \quad d(36,27) = \frac{r_2}{2}, \quad d(36,36) = \Omega^2 - 1 - 2r_2, \quad d(36,38) = ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(36,39) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(36,49) = \frac{r_2}{2}, \quad d(36,51) = \frac{r_2}{2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d(37,22) &= \frac{r_2}{2}, d(37,24) = \frac{r_2}{2}, d(37,25) = 1+r_2 \cos\varphi_y, d(37,26) = -ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(37,37) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, d(37,46) = \frac{r_2}{2}, d(37,48) = -\frac{r_2}{2}, d(37,49) = 1+r_2 \cos\varphi_y, \\
d(37,50) &= ir_2 \sin\varphi_y. \\
d(38,25) &= -ir_2 \sin\varphi_y, d(38,26) = r_2 \cos\varphi_y, d(38,35) = r_2 \cos\varphi_y, d(38,36) = -ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(38,38) &= \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, d(38,49) = ir_2 \sin\varphi_y, d(38,50) = r_2 \cos\varphi_y. \\
d(39,22) &= \frac{r_2}{2}, d(39,24) = \frac{r_2}{2}, d(39,35) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(39,36) = 1+r_2 \cos\varphi_y \\
d(39,39) &= \Omega^2 - 1 - 2r_2, d(39,46) = -\frac{r_2}{2}, d(39,49) = \frac{r_2}{2}. \\
d(40,28) &= 1+r_2 \cos\varphi_y, d(40,29) = ir_2 \sin\varphi_y, d(40,31) = \frac{r_2}{2}, d(40,33) = \frac{r_2}{2} \\
d(40,40) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, d(40,52) = 1+r_2 \cos\varphi_y, d(40,53) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(40,55) = \frac{r_2}{2}, \\
d(40,57) &= \frac{r_2}{2}. \\
d(41,28) &= ir_2 \sin\varphi_y, d(41,29) = r_2 \cos\varphi_y, d(41,41) = \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, \\
d(41,44) &= r_2 \cos\varphi_y, d(41,45) = ir_2 \sin\varphi_y, d(41,52) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(41,53) = r_2 \cos\varphi_y. \\
d(42,31) &= \frac{r_2}{2}, d(42,33) = \frac{r_2}{2}, d(42,42) = \Omega^2 - 1 - 2r_2, d(42,44) = ir_2 \sin\varphi_y \\
d(42,45) &= 1+r_2 \cos\varphi_y, d(42,55) = -\frac{r_2}{2}, d(42,57) = \frac{r_2}{2}. \\
d(43,28) &= \frac{r_2}{2}, d(43,30) = -\frac{r_2}{2}, d(43,31) = 1+r_2 \cos\varphi_y, d(43,32) = ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(43,43) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, d(43,52) = \frac{r_2}{2}, d(43,54) = -\frac{r_2}{2}, d(43,55) = 1+r_2 \cos\varphi_y, \\
d(43,56) &= -ir_2 \sin\varphi_y. \\
d(44,31) &= ir_2 \sin\varphi_y, d(44,32) = r_2 \cos\varphi_y, d(44,41) = r_2 \cos\varphi_y, d(44,42) = -ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(44,44) &= \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, d(44,55) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(44,56) = r_2 \cos\varphi_y. \\
d(45,28) &= -\frac{r_2}{2}, d(45,30) = \frac{r_2}{2}, d(45,41) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(45,42) = 1+r_2 \cos\varphi_y \\
d(45,45) &= \Omega^2 - 1 - 2r_2, d(45,52) = \frac{r_2}{2}, d(45,54) = \frac{r_2}{2}.
\end{aligned}$$

Annexe C4

Matrice dynamique du défaut symétrique : tous les autres éléments qui ne sont pas donnés sont nuls.

$$\begin{aligned}
 d(1,1) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, \quad d(1,7) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(1,8) = ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(1,10) = \frac{r_2}{2}, \quad d(1,12) = \frac{r_2}{2} \\
 d(1,13) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(1,14) = -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(1,16) = \frac{r_2}{2}, \quad d(1,18) = -\frac{r_2}{2}. \\
 d(2,2) &= \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, \quad d(2,5) = r_2 \cos\varphi_y, \quad d(2,6) = ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(2,7) = ir_2 \sin\varphi_y, \\
 d(2,8) &= r_2 \cos\varphi_y, \quad d(2,13) = -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(2,14) = r_2 \cos\varphi_y. \\
 d(3,3) &= \Omega^2 - 1 - 2r_2, \quad d(3,5) = ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(3,6) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(3,10) = \frac{r_2}{2}, \quad d(3,12) = \frac{r_2}{2}, \\
 d(3,16) &= \frac{r_2}{2}, \quad d(3,18) = \frac{r_2}{2}. \\
 d(4,4) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, \quad d(4,7) = \frac{r_2}{2}, \quad d(4,9) = -\frac{r_2}{2}, \quad d(4,10) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(4,11) = -ir_2 \sin\varphi_y \\
 d(4,13) &= \frac{r_2}{2}, \quad d(4,15) = \frac{r_2}{2}, \quad d(4,16) = r_2 \cos\varphi_y, \quad d(4,17) = ir_2 \sin\varphi_y, \\
 d(5,2) &= r_2 \cos\varphi_y, \quad d(5,3) = -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(5,5) = \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, \quad d(5,10) = ir_2 \sin\varphi_y, \\
 d(5,11) &= r_2 \cos\varphi_y, \quad d(5,16) = ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(5,17) = r_2 \cos\varphi_y. \\
 d(6,2) &= -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(6,3) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(6,3) = \Omega^2 - 1 - 2r_2, \quad d(6,7) = -\frac{r_2}{2}, \quad d(6,9) = \frac{r_2}{2}. \\
 d(6,13) &= \frac{r_2}{2}, \quad d(6,15) = \frac{r_2}{2}. \\
 d(7,1) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(7,2) = -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(7,4) = \frac{r_2}{2}, \quad d(7,6) = -\frac{r_2}{2}, \quad d(7,7) = \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh}, \\
 d(7,9) &= \frac{r_2}{2}, \quad d(7,19) = \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, \quad d(7,20) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y. \\
 d(8,1) &= -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(8,2) = r_2 \cos\varphi_y, \quad d(8,8) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2, \quad d(8,11) = \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \\
 d(8,12) &= i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \quad d(8,19) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, \quad d(8,20) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y. \\
 d(9,4) &= -\frac{r_2}{2}, \quad d(9,6) = \frac{r_2}{2}, \quad d(9,7) = \frac{r_2}{2}, \quad d(9,9) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \lambda_{vl}, \quad d(9,11) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \\
 d(9,12) &= \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y. \\
 d(10,1) &= \frac{r_2}{2}, \quad d(10,3) = \frac{r_2}{2}, \quad d(10,4) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, \quad d(10,5) = -ir_2 \sin\varphi_y \\
 d(10,10) &= \Omega^2 - 1 - \frac{\lambda_{vh}}{2} - \frac{3}{2}r_2, \quad d(10,12) = \frac{1}{2}(\lambda_{vh} - r_2), \quad d(10,19) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, \quad d(10,20) = -\frac{\lambda_{vh}}{2} \\
 d(11,4) &= -ir_2 \sin\varphi_y, \quad d(11,5) = r_2 \cos\varphi_y, \quad d(11,11) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{vl} - r_2, \\
 d(11,8) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \quad d(11,9) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d(12,1) &= \frac{r_2}{2}, d(12,3) = \frac{r_2}{2}, d(12,8) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(12,9) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \\
d(12,10) &= \frac{1}{2}(\lambda_{vh} - r_2), d(12,12) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \frac{r_{vh}}{2} - \lambda_{vl}, d(12,19) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(12,21) = \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
d(13,1) &= 1 + r_2 \cos\varphi_y, d(13,2) = ir_2 \sin\varphi_y, d(13,4) = \frac{r_2}{2}, d(13,6) = \frac{r_2}{2}, \\
d(13,13) &= \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh}, d(13,15) = -\frac{r_2}{2}, d(13,22) = \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, \\
d(13,23) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y. \\
d(14,1) &= ir_2 \sin\varphi_y, d(14,2) = r_2 \cos\varphi_y, d(14,14) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2, \\
d(14,17) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, d(14,18) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(14,22) = -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(14,23) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y \\
d(15,4) &= \frac{r_2}{2}, d(15,6) = \frac{r_2}{2}, d(15,15) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \lambda_{vl}, d(15,13) = -\frac{r_2}{2}, d(15,17) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \\
d(15,18) &= \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y \\
d(16,1) &= \frac{r_2}{2}, d(16,3) = -\frac{r_2}{2}, d(16,4) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, d(16,5) = ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(16,16) &= \Omega^2 - 1 - \frac{\lambda_{vh}}{2} - \frac{3}{2}r_2, d(16,18) = \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), d(16,22) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(16,24) = \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
d(17,1) &= ir_2 \sin\varphi_y, d(17,2) = r_2 \cos\varphi_y, d(17,14) = \lambda_{vl} \cos\varphi_y, d(17,15) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, \\
d(17,17) &= \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{vl} - r_2. \\
d(18,1) &= -\frac{r_2}{2}, d(18,3) = \frac{r_2}{2}, d(18,14) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(18,15) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \\
d(18,16) &= \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), d(18,18) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \frac{r_{vh}}{2} - \lambda_{vl}, d(18,22) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(18,24) = \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
d(19,7) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(19,8) = -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(19,10) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(19,12) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, \\
d(19,19) &= \Omega^2 - 2r_h - \lambda_{vh} - 2r_{lh}, d(19,25) = \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(19,26) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(19,28) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, \\
d(19,30) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
d(20,7) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(20,8) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(20,20) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - 2\lambda_{lh} \\
d(20,25) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(20,27) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y. \\
d(21,10) &= -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(21,12) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(21,20) = \Omega^2 - \lambda_{vh}, d(21,28) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(21,30) = \frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
d(22,13) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(22,14) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(22,16) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(21,18) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, \\
d(22,22) &= \Omega^2 - 2r_h - \lambda_{vh} - 2r_{lh}, d(22,31) = \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(22,32) = -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(22,34) = \frac{\lambda_{vh}}{2} \\
, d(22,36) &= -\frac{\lambda_{vh}}{2}. \\
d(23,13) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(23,14) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(23,23) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - 2\lambda_{lh} \\
d(23,31) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(23,32) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d(24,16) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(24,18) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(24,24) = \Omega^2 - \lambda_{vh}, d(24,34) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(24,36) = \frac{\lambda_{vh}}{2} \\
d(25,19) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(25,20) = -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(25,25) = \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh}, \\
d(25,27) &= -\frac{r_2}{2}, d(25,37) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, d(25,38) = ir_2 \sin\varphi_y, d(25,40) = \frac{r_2}{2}, d(25,42) = \frac{r_2}{2} \\
d(26,19) &= -i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(26,20) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(26,26) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2 \\
d(26,29) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, d(26,30) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(26,37) = ir_2 \sin\varphi_y, d(26,38) = r_2 \cos\varphi_y, \\
d(27,25) &= -\frac{r_2}{2}, d(25,27) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \lambda_{vl}, d(25,29) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(27,30) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, \\
d(27,40) &= \frac{r_2}{2}, d(27,42) = \frac{r_2}{2}. \\
d(28,19) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(28,21) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(28,28) = \Omega^2 - 1 - \frac{\lambda_{vh}}{2} - \frac{3}{2}r_2, d(28,30) = \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), \\
d(28,37) &= \frac{r_2}{2}, d(28,39) = -\frac{r_2}{2}, d(28,40) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, d(28,41) = ir_2 \sin\varphi_y. \\
d(29,26) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, d(29,27) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(29,29) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{vl} - r_2 \\
d(29,40) &= ir_2 \sin\varphi_y, d(29,41) = r_2 \cos\varphi_y. \\
d(30,19) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(30,21) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(30,28) = \frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), d(30,30) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \frac{r_{vh}}{2} - \lambda_{vl}, \\
d(30,26) &= -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(30,27) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, d(30,37) = -\frac{r_2}{2}, d(30,39) = \frac{r_2}{2}. \\
d(31,22) &= \lambda_h + \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(31,23) = i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(31,31) = \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh}, \\
d(31,33) &= \frac{r_2}{2}, d(31,43) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, d(31,44) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(31,46) = \frac{r_2}{2}, d(31,48) = -\frac{r_2}{2}. \\
d(32,22) &= i\lambda_{lh} \sin\varphi_y, d(32,23) = \lambda_{lh} \cos\varphi_y, d(32,32) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{lh} - \lambda_{vl} - r_2 \\
d(32,35) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, d(32,36) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(32,43) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(32,44) = r_2 \cos\varphi_y, \\
d(33,31) &= \frac{r_2}{2}, d(33,33) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \lambda_{vl}, d(33,35) = i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(33,36) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y \\
d(33,46) &= -\frac{r_2}{2}, d(33,48) = \frac{r_2}{2}, \\
d(34,22) &= \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(34,24) = -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(34,34) = \Omega^2 - 1 - \lambda_h - \frac{3}{2}r_2 - \lambda_{lh}, d(34,36) = -\frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}) \\
d(34,43) &= \frac{r_2}{2}, d(34,45) = -\frac{r_2}{2}, d(34,46) = 1 + r_2 \cos\varphi_y, d(34,47) = -ir_2 \sin\varphi_y. \\
d(35,32) &= \lambda_{vl} \cos\varphi_y, d(35,33) = -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(35,35) = \Omega^2 - 2\lambda_l(\cos\varphi_y - 1) - \lambda_{vl} - r_2 \\
d(35,46) &= -ir_2 \sin\varphi_y, d(35,47) = r_2 \cos\varphi_y. \\
d(36,22) &= -\frac{\lambda_{vh}}{2}, d(36,24) = \frac{\lambda_{vh}}{2}, d(36,34) = -\frac{1}{2}(r_2 - \lambda_{vh}), d(36,36) = \Omega^2 - \lambda_v - \frac{r_2}{2} - \frac{r_{vh}}{2} - \lambda_{vl}, \\
d(36,32) &= -i\lambda_{vl} \sin\varphi_y, d(36,33) = \lambda_v + \lambda_{vl} \cos\varphi_y, d(36,43) = \frac{r_2}{2}, d(36,45) = \frac{r_2}{2}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d(37,25) &= 1+r_2 \cos\varphi_y, d(37,26) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(37,28) = \frac{r_2}{2}, d(37,30) = -\frac{r_2}{2}, \\
d(37,37) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, d(37,49) = 1+r_2 \cos\varphi_y, d(37,50) = ir_2 \sin\varphi_y, d(37,52) = \frac{r_2}{2}, \\
d(37,54) &= \frac{r_2}{2}. \\
d(38,25) &= -ir_2 \sin\varphi_y, d(38,26) = r_2 \cos\varphi_y, d(38,38) = \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, \\
d(38,41) &= r_2 \cos\varphi_y, d(38,42) = ir_2 \sin\varphi_y, d(38,49) = ir_2 \sin\varphi_y, d(38,50) = r_2 \cos\varphi_y \\
d(39,28) &= -\frac{r_2}{2}, d(39,30) = \frac{r_2}{2}, d(39,39) = \Omega^2 - 1 - 2r_2, d(39,41) = ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(39,42) &= 1+r_2 \cos\varphi_y, d(39,52) = \frac{r_2}{2}, d(39,54) = \frac{r_2}{2}. \\
d(40,25) &= \frac{r_2}{2}, d(40,27) = \frac{r_2}{2}, d(40,28) = 1+r_2 \cos\varphi_y, d(40,29) = -ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(40,40) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, d(40,49) = \frac{r_2}{2}, d(40,51) = -\frac{r_2}{2}, d(40,52) = 1+r_2 \cos\varphi_y, \\
d(40,53) &= -ir_2 \sin\varphi_y. \\
d(41,28) &= -ir_2 \sin\varphi_y, d(41,29) = r_2 \cos\varphi_y, d(41,38) = r_2 \cos\varphi_y, d(41,39) = -ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(41,41) &= \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, d(41,52) = ir_2 \sin\varphi_y, d(41,53) = r_2 \cos\varphi_y. \\
d(42,25) &= \frac{r_2}{2}, d(42,27) = \frac{r_2}{2}, d(42,38) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(42,39) = 1+r_2 \cos\varphi_y \\
d(42,42) &= \Omega^2 - 1 - 2r_2, d(42,49) = -\frac{r_2}{2}, d(42,51) = \frac{r_2}{2}. \\
d(43,31) &= 1+r_2 \cos\varphi_y, d(43,32) = ir_2 \sin\varphi_y, d(43,34) = \frac{r_2}{2}, d(43,36) = \frac{r_2}{2} \\
d(43,43) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, d(43,55) = 1+r_2 \cos\varphi_y, d(43,56) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(43,58) = \frac{r_2}{2}, \\
d(43,60) &= \frac{r_2}{2}. \\
d(44,31) &= ir_2 \sin\varphi_y, d(44,32) = r_2 \cos\varphi_y, d(44,44) = \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, \\
d(44,47) &= r_2 \cos\varphi_y, d(44,48) = ir_2 \sin\varphi_y, d(44,55) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(44,56) = r_2 \cos\varphi_y. \\
d(45,35) &= \frac{r_2}{2}, d(45,36) = \frac{r_2}{2}, d(45,45) = \Omega^2 - 1 - 2r_2, d(45,47) = ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(45,49) &= 1+r_2 \cos\varphi_y, d(45,58) = -\frac{r_2}{2}, d(45,60) = \frac{r_2}{2}. \\
d(46,31) &= \frac{r_2}{2}, d(46,33) = -\frac{r_2}{2}, d(46,34) = 1+r_2 \cos\varphi_y, d(46,35) = ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(46,46) &= \Omega^2 - 2 - 3r_2, d(46,55) = \frac{r_2}{2}, d(46,57) = -\frac{r_2}{2}, d(46,58) = 1+r_2 \cos\varphi_y, \\
d(46,59) &= -ir_2 \sin\varphi_y. \\
d(47,34) &= ir_2 \sin\varphi_y, d(47,35) = r_2 \cos\varphi_y, d(47,44) = r_2 \cos\varphi_y, d(47,45) = -ir_2 \sin\varphi_y, \\
d(47,47) &= \Omega^2 - 2(\cos\varphi_y - 1) - 3r_2, d(47,58) = -ir_2 \sin\varphi_y, d(47,59) = r_2 \cos\varphi_y.
\end{aligned}$$

$$d(48,31)=-\frac{r_2}{2}, d(48,33)=\frac{r_2}{2}, d(48,44)=-ir_2 \sin\varphi_y, d(48,45)=1+r_2 \cos\varphi_y$$

$$d(48,48)=\Omega^2 -1-2r_2, d(48,55)=\frac{r_2}{2}, d(48,57)=\frac{r_2}{2}.$$

Références :

- [1] – R. Landauer, Philos B .68, 217 (1970).
- [2] – R. Landauer, Z. Phys B. 68, 217 (1987).
- [3] – Buttiker. Phys. Rev. Lett, 57. 1761 (1986)
- [4] – K. L. Shepard, M. L. Roukes, et B. P. Van dergaag, Phys. Rev. B46, 9648 (1992).
- [5] – Tekman et P. F. Bagwel, Phys. Rev. B48, 4 (1999).
- [6] – C. Berthod, F. Gagel, et K. Maschke, Phys. Rev., B50, 18299 (1994).
- [7] – A. Khater et W. Czaja, Physica. B 167, 33 (1990).
- [8] – A. Khater, N. Auby et D. Kechrakos, J. Phys. condens. Matter 4.3743 (1992).
- [9] – B. Djafari-Rouhani, P. Masri, L. Dobrzynski, Phys. Rev. B 15, 5690 (1977).
- [10] – Akjouj. A, Doberzenski L, Djafari-Rouhani B, Vasseur J. O. and Kushwaha M. S. Euro. Phys. Lett, 41 321 (1998).
- [11] – A. A. Maradudin, R. E. Wallis et L. Dobrzynski, Hand Book of surfaces and interfaces, Garland, New York Vol 3 (1980).
- [12] –R. E. Allen, G. P. Alldrege, et FW DE Wette, Phys. Rev, Vol. 4, 1648 (1971).
- [13] – J. E. Black et P. Bopp, surf. Sci. 140, 275 (1984).
- [14] – P. Knipp, Phys. Rev, B43, 6908 (1991).
- [15] – A. A. Maradudin, E. W. Montroll, G.H. Weiss et Ipatova, Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Press, New York and London P 950 (1971).
- [16] – L. Dobrzynski et Mills, J.Phys. chem. Solids 30, 1043 (1969).
- [17] – P. Masri, G. Allan et L. Dobrzynski, J. de Phys. 33, 85 (1972).
- [18] – G. Treglia et M. C. Desjonqueres, J. Physique 46, 987 (1985).
- [19] – P. Knipp et B. M. Hall, surf. Sci. 224, 983 (1989)
- [22] – A. Kara, C. S. Jayanthi, S.Y.WU et F. Encolessi, Phys. Rev. Lett.72, 2223 (1994).
- [21] –E. J. Mele et M. V. Pykhtin, Phys. Rev. Let. 75, 3878 (1995).
- [22] – G. Armand, Phys. Rev B14, 2218 (1976)
- [23] – T. E. Feuchtwang, Phys. Rev .155, 731 (1967).
- [24] – J. Szeftel et A. Khater, J. Phys. C: Solid state 20, 4725 (1987).
- [25]– J. Szeftel. A. Khater, F. Mila, S. D'addato et N. Auby, J. Phys. C: Solid State Phys 21, 2113 (1988).
- [26] – F. Gagel, et K. Maschke, Phys. Rev, B52, 2013 (1993).
- [27] – A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, P. A. Deymier, Ph. Lambin, et Dobrzynski, Phys. Rev. B, Vol. 65, 174308 (2002)

- [28] –Al-Wahsh. H, Akjouj. A, Djafari-Rouhani. B, Vasseur, J. O, et Doberzenski. L, Phys. Rev. B59, 8709 (1999).
- [29] – A. Virilouvet, A. Khater, H. Aouchiche, O. Rafil et K. Mascke Phys. Rev. B 59, 4933 (1999).
- [30] – M. Belhadi, O. Rafil , R. Tigrine, A. Khater, J. Hardy, K.Mascke, European Phys. Journal B15, 435-443 (2000)
- [31] – R. Landauer, J. Phys : condens Matter 1 , 8099 (1989)
- [32]–A. Kather. O.Rafil.Y. Labaye et Y. Pennec. Solid State Communication. Vol. 87. N1, 53 (1993).
- [33] – R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil, M. Belhadi et J. Hardy Phys. Stat. Soli. (b) 239, N1, 144-151 (2003).
- [34] – F. Fellay, F.Gagel, K. Mascke, A.Virilouvet, A. Khater. Phys. Rev. B55, 1707 (1997).
- [35] – O. Rafil, A. Lalaoui, M.Tamine, A. Khelifi, Surf. Rev Letter 9, 1387 (2002)
- [36] – A. Khater, H. Grimech, J. Lapujoulade et F. Fabre, Surf. Sci. 251/ 252, 381 (1991).
- [37] – U. Kuhl et H. J. Stockmann, Phys. Rev. Lett. Vol 80 N15 (1998).
- [38] – H. Grimech, A. Khater, Surf. Sci. 323, 198 (1995).
- [39] – M. Belhadi, R. Tigrine, A. Khater, O. Rafil, J. Hardy .Phys. chem News 8.23 (2002).
- [40] – M. Tamine, O. Rafil, H. Boumrar Surface Review and letters 11, 155-165(2004)
- [41] – H. Grimech, A. Khater, Surf. Sci. 341, 227 (1995).
- [42] – Y. Pennec et A. Khater, Surf. Sci. Lett.348.82 (1996).