Université de Strasbourg

TD2

Bernard Doudin

Transcrit par

Pierre Guichard

L3 Semestre 6 2021

2.1 Vibration d'une chaine 1D, influence des seconds voisins

On généralise le cas du cours, d'atomes identiques, équidistants, en position d'équilibre $x_n = na$ avec $n \in \mathbb{Z}$ de masses identiques m. On suppose une interaction harmonique de constante κ_1 avec les premiers voisins, et κ_2 avec les seconds voisins.

a) Établir l'équation régissant le déplacement δx_n de l'atome n, en fonction des déplacements de ses premiers et seconds voisins.

On peut écrire le potentiel total V_{tot} :

$$\begin{aligned} V_{\text{tot}} &= \sum_i V(x_{i+1} - x_i) + \sum_i V(x_{i+2} - x_i) \\ &= V_0 + \sum_i \frac{\kappa_1}{2} (\delta x_{i+1} - \delta x_i)^2 + \sum_i \frac{\kappa_2}{2} (\delta x_{i+2} - \delta x_i)^2 \end{aligned}$$

Et on peut définir la force F_n :

$$F_n = -\frac{\partial V_{\text{tot}}}{\partial x_n} = \kappa_1 (\delta x_{n+1} + \delta x_{n-1} - 2\delta x_n) + \kappa_2 (\delta x_{n+2} + \delta x_{n-2} - 2\delta x_n)$$

Et alors on trouve l'équation régissant le déplacement δx_n :

$$\boxed{m\delta \ddot{x}_n = \kappa_1 (\delta x_{n+1} + \delta x_{n-1} - 2\delta x_n) + \kappa_2 (\delta x_{n+2} + \delta x_{n-2} - 2\delta x_n)}$$

b) Établir la relation de dispersion des phonons longitudinaux $\omega = f(k)$ à partir d'une hypothèse de solution de la forme $\delta x_n(t) = A \exp(i\omega t - ikna)$.

On injecte la forme de l'hypothèse dans l'équation précédente, alors

$$-m\omega^2 = 2\kappa_1 (\cos(ka) - 1) + 2\kappa_2 (\cos(2ka) - 1)$$

Et on se rappelle de la relation trigonométrique

$$1 - \cos(x) = 2\sin^2\left(\frac{x}{2}\right)$$

Et ainsi

$$\begin{aligned} \omega^2 &= \frac{2\kappa_1}{m} (1 - \cos(ka)) + \frac{2\kappa_2}{m} (1 - \cos(2ka)) \\ &= \frac{4\kappa_1}{m} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \frac{4\kappa_2}{m} \sin^2(ka) \end{aligned}$$

d'où

$$\boxed{\omega = \frac{2}{\sqrt{m}} \sqrt{\kappa_1 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \kappa_2 \sin^2(ka)}}$$

c) Quel est le signe de κ_1 ? Donner une justification physique. Les mêmes considérations fixent-elles aussi le signe de κ_2 ? Comment peut-on avoir un κ_2 négatif ?

Par hypothèse de stabilité des liaisons chimique entre premiers voisins, $\kappa_1 > 0$. Cependant κ_2 lui peut-être négatif, dans la mesure que dans l'équation précédente, ce qui est sous la racine reste positif ou nul.

d) Calculer la vitesse du son pour $k_2 = 0$, $k_2 > 0$ et $-k_1/4wk_2 < 0$. Expliquez pourquoi la vitesse du son pour $k_2 > 0$ est plus grande que dans le cas $k_2 = 0$. Expliquez ce qui se passe pour $-k_1/4 = k_2$.

On sait que pour k petit :

$$\omega = v_{\text{son}} k$$

Alors :

$$\boxed{v_{\text{son}} = 2a\sqrt{\frac{\frac{\kappa_1}{4} + \kappa_2}{m}}}$$

Dans le cas $\kappa_2 = 0$, on retrouve la vitesse du son qu'on connait v^0_{son} :

$$v^0_{\text{son}} = a\sqrt{\frac{\kappa_1}{m}}$$

Si $\kappa_2 > 0$, alors

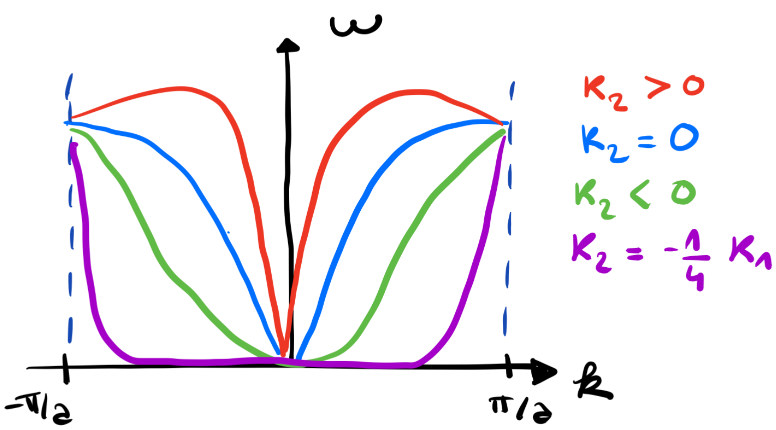
$$v_{\text{son}} > v^0_{\text{son}}$$

Si $\kappa_2 < 0$, alors

$$v_{\text{son}} < v^0_{\text{son}}$$

Et on remarque v_{son} tend vers 0 pour κ_2 qui tend vers $-\kappa_1/4$.

e) Représenter la relation de dispersion pour les cas $k_2 > 0$, $-k_1/4 < k_2 < 0$, que se passe-t-il quand $-k_1/4 > k_2$?



2.2 Vibration d'une chaine 1D, constante de rappel asymétrique

On considère un réseau linéaire de maille a ayant un motif composé de deux atomes identiques et distants à l'équilibre de $b < a/2$. La position des atomes à l'équilibre est notée x_1, x_2,.., x_{2n}, x_{2n+1}. Leur écart par rapport à leur position d'équilibre est u_1, u_2,.., u_{2n}, u_{2n+1}.
Ce système peut correspondre, par exemple, à une chaine d'atomes de C, avec une alternance de liaisons simples et doubles, dans des systèmes polymères.

1. On considère uniquement les interactions entre premiers voisins caractérisées par les constantes de rappel β_1 et β_2. β_1 est associée à la liaison entre les atomes de carbone notés $2n$ et $2n+1$, β_2 à la liaison entre les atomes de carbone notés $2n+1$ et $2n+2$. Établir les équations du mouvement des deux espèces d'atomes constituant le motif.

   Soit M la masse des atomes de carbone

$$\begin{cases} M\ddot{u}_{2n} = \beta_1(u_{2n+1} - u_{2n}) - \beta_2(u_{2n} - u_{2n-1}) & (1) \\ M\ddot{u}_{2n+1} = \beta_2(u_{2n+2} - u_{2n+1}) - \beta_1(u_{2n+1} - u_{2n}) & (2) \end{cases}$$

2. On cherchera des solutions de la forme :

$$u_{2n} = A\exp(i\omega t - kx_{2n}) \qquad u_{2n+1} = B\exp(i\omega t - kx_{2n+1})$$

   Établir les relations de dispersion $\omega = f(k)$ des branches acoustiques et optiques longitudinales en fonction de β_1, β_2, M la masse d'un atome et a.

   On sait que

$$u_{2n+2} = u_{2n}\exp(-ika) \qquad u_{2n-1} = u_{2n+1}\exp(ika)$$

   Alors

$$\begin{cases} -M\omega^2 u_{2n} = \beta_1 u_{2n+1} - \beta_1 u_{2n} - \beta_2 u_{2n} + \beta_2\exp(ika)u_{2n+1} \\ -M\omega^2 u_{2n+1} = \beta_2\exp(-ika)u_{2n} - \beta_2 u_{2n+1} - \beta_1 u_{2n+1} + \beta_1 u_{2n} \end{cases}$$

   On peut alors encore réécrire ça

$$\begin{cases} (M\omega^2 - \beta_1 - \beta_2)u_{2n} + (\beta_1 + \beta_2\exp(ika))u_{2n+1} = 0 \\ (\beta_2\exp(-ika) + \beta_1)u_{2n} + (M\omega^2 - \beta_2 - \beta_1)u_{2n+1} = 0 \end{cases}$$

   Alors on sait que la solution est pour le déterminant de ce système égal à 0 :

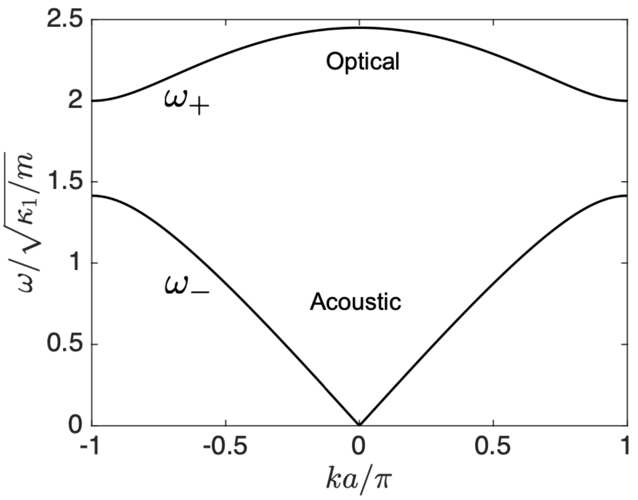
$$\begin{vmatrix} M\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) & \beta_1 + \beta_2\exp(ika) \\ \beta_2\exp(-ika) + \beta_1 & M\omega^2 - (\beta_1 + \beta_2) \end{vmatrix} = 0$$

   On trouve alors :

$$(\beta_1 + \beta_2 - M\omega^2)^2 - \left[\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2\cos(ka)\right] = 0$$

D'où

$$\boxed{\omega_{\pm} = \sqrt{\frac{\beta_1+\beta_2}{M} \pm \frac{1}{M}\sqrt{(\beta_1+\beta_2)^2 - 4\beta_1\beta_2 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}}}$$



3. Calculer la valeur du rapport A/B pour chacune des branches au centre de la zone de Brillouin ($k = 0$).

4. La vitesse du son mesurée le long de la chaîne est $v_s = 5000$ m.s^{-1} . On donne :

$$a = 5 \text{ Å} \qquad b = 1.25 \text{ Å} \qquad \frac{\beta_2}{\beta_1} = \frac{b}{a-b}$$

   Déterminer les valeurs de fréquences caractéristiques d'oscillation des atomes au centre et en limite de la zone de Brillouin. Représenter les courbes de dispersion correspondantes et mettre en évidence l'intervalle des fréquences interdites.