

4 Vibrations longitudinales dans un cristal 1D

4.1 Cas général.

On considère un cristal 1D ayant q atomes par maille primitive. Soit a le paramètre du réseau. On indiquera par x_{ni} la position instantanée de l' i -ème atome dans la n -ème maille primitive, par x_{ni}^0 sa position d'équilibre, par $u_{ni} = x_{ni} - x_{ni}^0$ son déplacement par rapport à la position d'équilibre et par M_i sa masse.

1. Écrire l'énergie potentielle en approximation harmonique. En déduire les équations du mouvement.
2. Réécrire les équations du mouvement en termes de nouvelles variables $\tilde{u}_{ni} = \sqrt{M_i} u_{ni}$.
3. Déterminer les fréquences des modes normaux de vibration. Montrer qu'elles s'obtiennent en diagonalisant une matrice symétrique (appelée *matrice dynamique D*) dont on donnera l'expression.

4.2 Cristal diatomique avec interactions entre les seuls plus proches voisins.

On suppose à présent que :

- $q = 2$.
- Les deux atomes sont différents : $M_1 < M_2$.
- Les atomes sont équidistants. On appellera a la distance entre l'atome 1 et l'atome 2. Par conséquent, le paramètre du réseau est $2a$.
- Seulement les forces entre les plus proches voisins sont non négligeables. En approximation harmonique, le cristal devient alors équivalent à un système masses-ressorts. On appellera K la constante de rigidité des ressorts.

1. Écrire la matrice dynamique.
2. Déterminer les fréquences des modes normaux de vibration et tracer l'allure de la relation de dispersion $\omega(k)$.
3. Calculer le rapport $\frac{u_{n2}}{u_{n1}}$ dans les situations suivantes :
 - k au centre de la première zone de Brillouin.
 - k sur le bord de la première zone de Brillouin.
4. Montrer comment on passe d'une courbe de dispersion à deux branches à une courbe de dispersion n'en comportant qu'une, lorsqu'on suppose que les valeurs de M_1 et M_2 sont identiques : $M_1 = M_2 = M$.

4.3 Cristal monoatomique avec interactions entre plus proches et seconds plus proches voisins.

On considère un cristal monoatomique de paramètre de réseau a . Soit M la masse de l'atome. Seulement les interactions entre plus proches et seconds plus proches voisins sont supposées être non négligeables. On assimilera le cristal à un système masses-ressorts. Soit K_1 la constante de rigidité des ressorts connectant les plus proches voisins et K_2 celle des ressorts entre seconds plus proches voisins.

1. Déterminer la relation de dispersion $\omega(k)$.
2. Discuter la forme de la relation de dispersion par rapport au cas d'interactions entre les seuls premiers voisins ($K_2 = 0$).
3. Calculer la vitesse du son dans ce cristal (typiquement $\sqrt{\frac{K_1}{M}} \approx 10^{13} \text{ rad s}^{-1}$).