

## 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  $\sqrt{\frac{K_1}{M}} \approx 10^{13} \text{ rad s}^{-1}$ ).