CPC 4 : Vibrations longitudinales dans un cristal 1D

1 Cas général

1.1 Énergie potentielle et équations du mouvement

L'énergie potentielle en approximation harmonique est donnée par:

$$U(\dots x_{ni} \dots) = U(\dots x_{ni}^0 \dots) + \frac{1}{2} \sum_{ni,mj} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x_{ni} \partial x_{mj}} \right) u_{ni} u_{mj}$$

Il est sous-entendu que les dérivées secondes de U sont calculées en correspondance de la position d'équilibre du système.

Équations du mouvement :

$$M_i \ddot{u}_{ni} = -\sum_{mj} W_{ni,mj} u_{mj}$$

où

$$W_{ni,mj} = \frac{\partial^2 U}{\partial x_{ni} \partial x_{mj}}$$

La matrice W est parfois appelée *matrice des constantes de force.*

1.2 Changement de variables

$$\ddot{\tilde{u}}_{ni} = -\sum_{mj} \frac{W_{ni,mj}}{\sqrt{M_i M_j}} \, \tilde{u}_{mj}$$

1.3 Fréquences des modes normaux

D' après le cours, les modes normaux s'écrivent:

$$u_{ni} = A_i \, e^{i(kna - \omega t)}$$

En termes de nouvelles variables:

$$\tilde{u}_{ni} = \tilde{A}_i \, e^{i(kna - \omega t)}$$

En remplaçant dans les équations du mouvement on obtient:

$$-\omega^2 \tilde{A}_i = -\sum_{mj} \frac{W_{ni,mj}}{\sqrt{M_i M_j}} \, \tilde{A}_j e^{i[k(m-n)a]}$$

$$\omega^2 \tilde{A}_i = \sum_j \left\{ \sum_m \frac{W_{ni,mj}}{\sqrt{M_i M_j}} e^{i[k(m-n)a]} \right\} \tilde{A}_j$$

L'équation ci-dessus est identique pour toutes les valeurs de n. On peut alors la réécrire de la façon suivante:

$$\boxed{\sum_j \left(D_{ij} - \omega^2 \delta_{ij}\right) \tilde{A}_j = 0}$$

où:

$$\boxed{D_{ij} = \sum_m \frac{W_{0i,mj}}{\sqrt{M_i M_j}}\, e^{ikma}}$$

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

2.1 Matrice dynamique

L'énergie potentielle est donnée par:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ \frac{1}{2} K \left(u_{n2} - u_{n1}\right)^2 + \frac{1}{2} K \left(u_{(n+1)1} - u_{n2}\right)^2 \right\}$$

Les constantes de force non nulles sont:

$$W_{n1,n1} = 2K \qquad ; \qquad W_{n2,n2} = 2K$$

$$W_{n1,n2} = -K \qquad ; \qquad W_{n2,n1} = -K$$

$$W_{n1,(n-1)2} = -K \qquad ; \qquad W_{n2,(n+1)1} = -K$$

En tenant compte du fait que le paramètre du réseau est $2a$ au lieu que a, on obtient pour les éléments de la matrice dynamique:

$$D_{11} = \frac{2K}{M_1}$$

$$D_{22} = \frac{2K}{M_2}$$

$$D_{12} = -\frac{K}{\sqrt{M_1 M_2}} \left(1 + e^{-ik(2a)}\right)$$

$$D_{21} = -\frac{K}{\sqrt{M_1 M_2}} \left(1 + e^{ik(2a)}\right)$$

2.2 Relation de dispersion

On a:

$$\begin{vmatrix} \frac{2K}{M_1} - \omega^2 & -\frac{K}{\sqrt{M_1 M_2}} \left(1 + e^{-ik(2a)}\right) \\ -\frac{K}{\sqrt{M_1 M_2}} \left(1 + e^{ik(2a)}\right) & \frac{2K}{M_2} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$\left(1 + e^{-ik(2a)}\right)\left(1 + e^{ik(2a)}\right) = 2 + 2\cos(2ka) = 2 + 2[\cos^2(ka) - \sin^2(ka)] = 4\cos^2(ka)$$

$$\omega^4 - 2K\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)\omega^2 + \frac{4K^2}{M_1 M_2}[1 - \cos^2(ka)] = 0$$

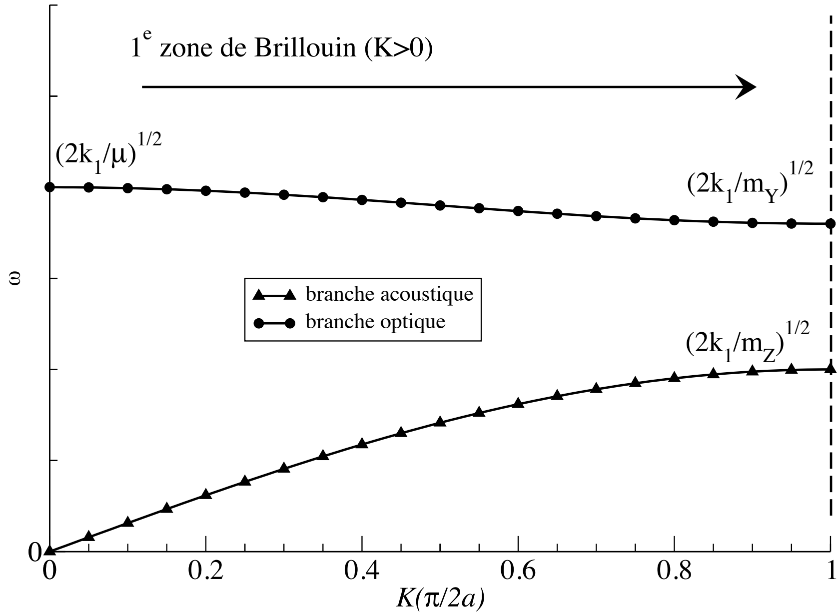

Figure 1: Représentation des branches acoustique et optique (pour $k > 0$). Une bande interdite est observée entre la "bande" acoustique et la "bande" optique. Il faudra faire les identifications suivantes: $k_1 = K$, $m_Y = M_1$, $m_Z = M_2$, $K = k$.
.

$$\omega^4 - \frac{2K}{\mu}\omega^2 + \frac{4K^2}{M_1 M_2}\sin^2(ka) = 0$$

$$\omega^2 = K\left[\frac{1}{\mu} \pm \sqrt{\frac{1}{\mu^2} - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2(ka)}\right]$$

On obtient ainsi deux fréquences pour chaque valeur de k. Le signe $+$ correspond à la branche optique, le signe $-$ à la branche acoustique. Pour $k > 0$, la relation de dispersion est représentée en Fig. 1.

2.3 Calcul du rapport u_{n2}/u_{n1}

$$\frac{u_{n2}}{u_{n1}} = \sqrt{\frac{M_1}{M_2}}\,\frac{\tilde{u}_{n2}}{\tilde{u}_{n1}} = \sqrt{\frac{M_1}{M_2}}\,\frac{\tilde{A}_{n2}}{\tilde{A}_{n1}}$$

$$\left(D_{11} - \omega^2\right)\tilde{A}_{n1} + D_{12}\tilde{A}_{n2} = 0$$
$$D_{21}\tilde{A}_{n1} + \left(D_{22} - \omega^2\right)\tilde{A}_{n2} = 0$$

$$\frac{\tilde{A}_{n2}}{\tilde{A}_{n1}} = -\frac{\left(D_{11} - \omega^2\right)}{D_{12}}$$

$\boxed{\text{Pour } k = 0 \text{ et } \omega = 0 :}$

$$\frac{\tilde{A}_{n2}}{\tilde{A}_{n1}} = -\frac{D_{11}}{D_{12}} = \frac{\sqrt{M_1 M_2}}{M_1} = \sqrt{\frac{M_2}{M_1}} \qquad \Longrightarrow \qquad \boxed{\frac{u_{n2}}{u_{n1}} = 1}$$

Les deux atomes oscillent en phase avec des amplitudes identiques. La cristal se comporte comme un unique objet rigide.

$\boxed{\text{Pour } k = 0 \text{ et } \omega = \sqrt{\frac{2K}{\mu}} :}$

$$\frac{\tilde{A}_{n2}}{\tilde{A}_{n1}} = -\frac{\left(\frac{2K}{M_1} - \frac{2K}{\mu}\right)}{-\frac{2K}{\sqrt{M_1 M_2}}} = -\frac{\frac{1}{M_2}}{\frac{1}{\sqrt{M_1 M_2}}} = -\sqrt{\frac{M_1}{M_2}} \qquad \Longrightarrow \qquad \boxed{\frac{u_{n2}}{u_{n1}} = -\frac{M_1}{M_2}}$$

Les deux atomes oscillent en anti-phase avec des amplitudes inversement proportionnelles à leurs masses. Le centre de masse des deux atomes reste immobile.

$\boxed{\text{Pour } k = \frac{\pi}{2a} :}$

$$D_{12} = D_{21} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\left(D_{11} - \omega^2\right) \tilde{A}_{n1} = 0$$

$$\left(D_{22} - \omega^2\right) \tilde{A}_{n2} = 0$$

$\boxed{\text{Pour } k = \frac{\pi}{2a} \text{ et } \omega = \sqrt{\frac{2K}{M_1}}:}$

$$D_{11} - \omega^2 = 0 \qquad\qquad D_{22} - \omega^2 \neq 0$$

$$\Downarrow$$

$$\tilde{A}_{n1} \text{ est arbitraire} \qquad\qquad \tilde{A}_{n2} = 0$$

L'atome moins massif oscille, l'atome plus massif est immobile.

$\boxed{\text{Pour } k = \frac{\pi}{2a} \text{ et } \omega = \sqrt{\frac{2K}{M_2}}:}$

$$D_{11} - \omega^2 \neq 0 \qquad\qquad D_{22} - \omega^2 = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\tilde{A}_{n1} = 0 \qquad\qquad \tilde{A}_{n2} \text{ est arbitraire}$$

L'atome plus massif oscille, l'atome moins massif est immobile.

2.4 $M_1 = M_2 = M$

Le point clé est la taille de la ZdB qui, dans le cas monoatomique, est le double de celle du cas diatomique. On observe, en outre, que les deux fréquences correspondantes à $k = \frac{\pi}{2a}$ se réduisent à une seule: $\omega = \sqrt{\frac{2K}{M}}$.

$$\omega^2 = K\left[\frac{2}{M} \pm \sqrt{\frac{4}{M^2} - \frac{4}{M^2}\sin^2(ka)}\,\right]$$

$$\omega^2 = \frac{2K}{M}\left[1 \pm \sqrt{1 - \sin^2(ka)}\,\right] = \frac{2K}{M}\left[1 \pm \cos(ka)\right]$$

Rappel: $k \in \left]-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right]$ donc $\cos(ka) \geq 0$.

$$\omega^2 = \frac{2K}{M}\left[1 \pm 1 \mp 2\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)\right]$$

$$\boxed{\text{Branche acoustique}}$$

$$\omega^2 = \frac{4K}{M}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

La relation de dispersion est identique à celle du cas monoatomique pour $k \in \left]-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right]$.

$$\boxed{\text{Branche optique}}$$

$$\omega^2 = \frac{4K}{M}\left[1 - \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)\right] = \frac{4K}{M}\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

Pour $k \in \left]-\frac{\pi}{2a}, 0\right]$:

$$\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = \sin\left(\frac{ka}{2} + \frac{\pi}{2}\right) = \sin\left[\frac{\left(k + \frac{\pi}{a}\right)a}{2}\right]$$

La relation de dispersion est identique à celle du cas monoatomique pour $k \in \left]\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{a}\right]$.

L'allure de la relation de dispersion est représentée en Fig. 2 pour $k > 0$.

3 Cristal monoatomique avec interactions entre les plus proches el les seconds plus proches voisins.

3.1 Relation de dispersion

L'énergie potentielle est donnée par:

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{1}{2}K_1\left(u_{(n+1)} - u_n\right)^2 + \frac{1}{2}K_2\left(u_{(n+2)} - u_n\right)^2\right\}$$

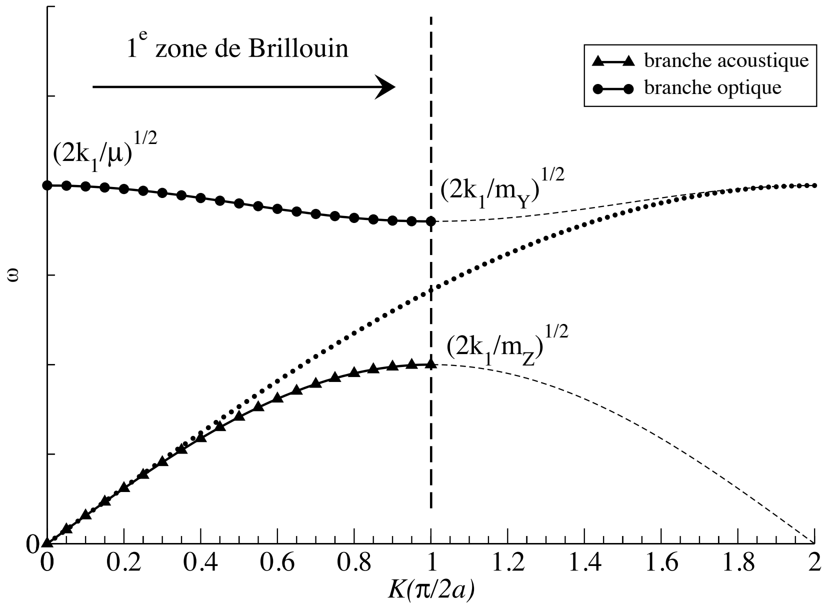

Figure 2: Représentation des branches acoustique et optique (pour $k > 0$). Une bande interdite est observée. Ce gap en bord de zone se referme lorsque M_1 et $M_2 \rightarrow \frac{M_1+M_2}{2}$. (Identifications: $k_1 = K$, $m_Y = M_1$, $m_Z = M_2$, $K = k$)

Les constantes de force non nulles sont:

$$W_{n,n} = 2K_1 + 2K_2$$

$$W_{n,(n+1)} = -K_1 \qquad ; \qquad W_{n,(n-1)} = -K_1$$

$$W_{n,(n+2)} = -K_2 \qquad ; \qquad W_{n,(n-2)} = -K_2$$

d'où l'expression de D:

$$D = \frac{1}{M}\left[2K_1 + 2K_2 - K_1 e^{ikna} - K_1 e^{-ikna} - K_2 e^{ikn(2a)} - K_2 e^{-ikn(2a)}\right]$$

$$D = \frac{1}{M}\left\{2K_1\left[1-\cos\left(ka\right)\right] + 2K_2\left[1-\cos\left(2ka\right)\right]\right\}$$

$$D = \omega^2 = \frac{1}{M}\left\{4K_1\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + 4K_2\sin^2\left(ka\right)\right\}$$

(cf. Fig. 3)

Si on pose:

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{K_1}{M}} \qquad \text{and} \qquad \omega_2 = \sqrt{\frac{K_2}{M}}$$

on obtient:

$$\omega = 2\omega_1\left|\sin\frac{ka}{2}\right| \cdot \sqrt{1 + \frac{4\omega_2^2}{\omega_1^2}\cos^2\frac{ka}{2}}$$

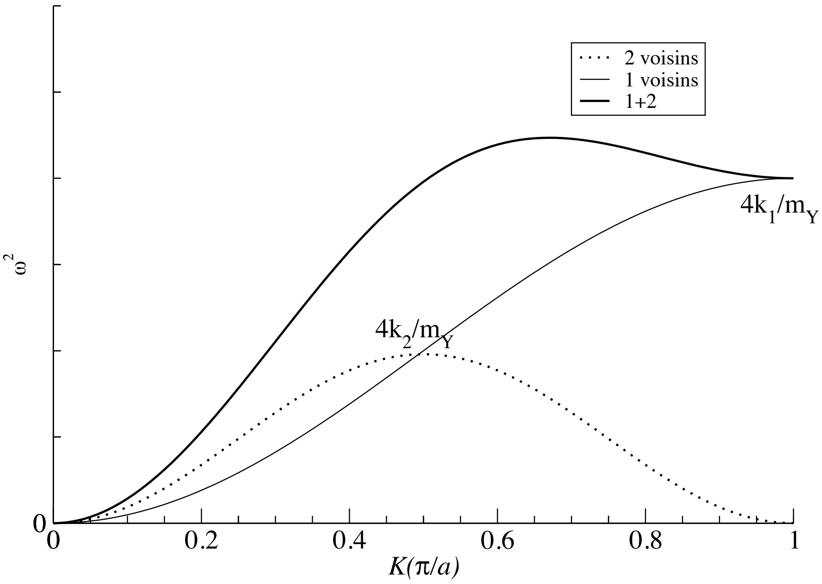

Figure 3: Représentation des contributions des premiers et deuxièmes voisins au carré de la relation de dispersion. (Identifications: $k_1 = K_1$, $k_2 = K_2$, $m_Y = M$, $K = k$)

3.2 Comparaison des deux courbes

La relation de dispersion n'est plus monotone si $K_2 > K_1/2$ (Fig. 4).

3.3 Vitesse du son

La vitesse du son est plus élevé . En effet, pour $k \to 0$:

$$\omega \to \omega_1 ka \sqrt{1 + 4\,\frac{\omega_2^2}{\omega_1^2}}$$

$$v_{son} = \omega_1 a \sqrt{1 + 4\,\frac{\omega_2^2}{\omega_1^2}} > \omega_1 a$$

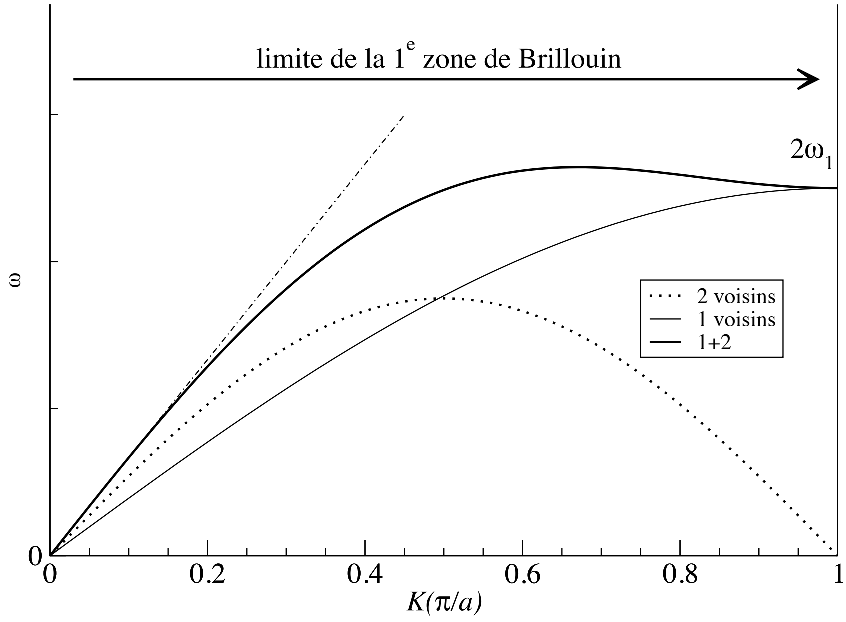

Figure 4: Représentation de la branche acoustique de la relation de dispersion pour $K > 0$. (Identification: $K = k$)