ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Exercices de Physique du Solide — Prof. H. Brune

Série No. 3 — **4 Mars 2025**

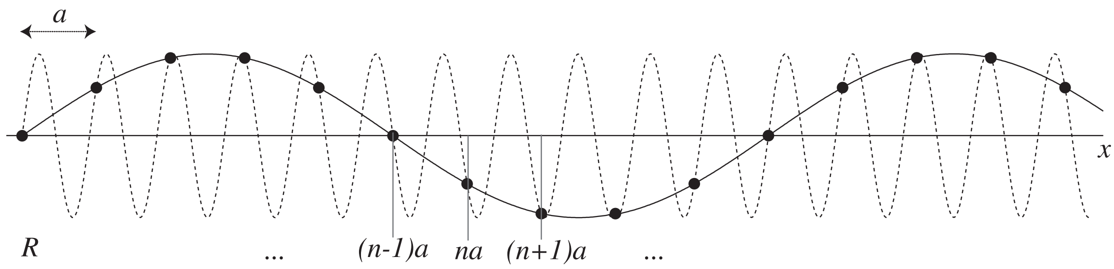
But de cette série : comprendre les relation de dispersion $\omega(k)$ de systèmes unidimensionnels

1. Relation de dispersion et k indépendants

La figure ci-dessous montre la position instantanée des atomes d'une chaîne de paramètre de réseau a. La position de chaque atome est décrite aussi bien par l'onde de longueur d'onde $\lambda = 10a$ en trait continu que par l'onde de longueur d'onde $\lambda' = \frac{10}{11}a$ en pointillé.

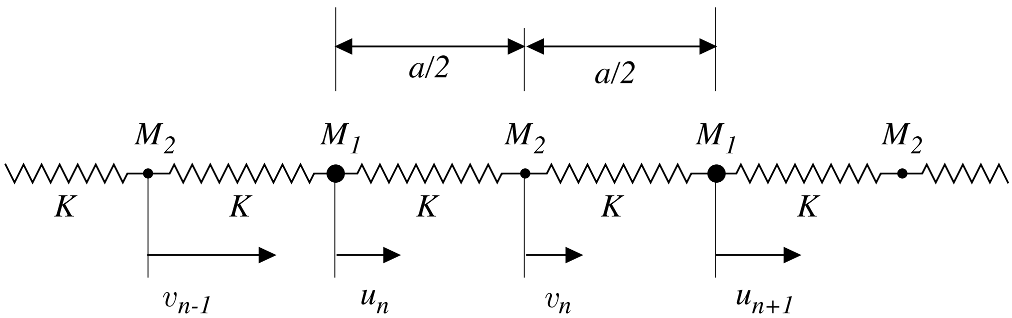
Montrer que les vecteurs d'onde k et k' correspondants aux deux ondes sont égaux à un vecteur du réseau réciproque près.

Note : pour illustrer le concept nous avons pris une onde transverse, c'est-à-dire que le déplacement des atomes est perpendiculaire à la direction de propagation, mais autrement pour les systèmes unidimensionnels nous avons considéré uniquement des ondes longitudinales, avec déplacement des atomes dans la direction de la propagation de l'onde.



2. Chaîne avec deux atomes par maille

On considère une chaîne dans laquelle les atomes successifs ont une masse M_1 et M_2 ; seuls les plus proches voisins interagissent. Cette interaction est décrite par un ressort de constante K. a est la distance à l'équilibre entre deux masses consécutives de même type, et $a/2$ la distance entre deux masses différentes.



(a) On note u_n et v_n les déplacements des masses M_1 et M_2 respectivement. Ecrire les équations du mouvement pour u_n et v_n.

(b) En utilisant l'Ansatz suivant pour les déplacements (on a laissé tomber l'indice ν qui identifie chaque k et chaque ω, et on utilise k comme indice pour les amplitudes ; on considère un déplacement qui est composé d'un seul mode normal)

$$u_n(t) = a_k e^{i(kna - \omega t)} \qquad v_n(t) = b_k e^{i(kna + ka/2 - \omega t)}$$

montrer que la relation de dispersion est donnée par :

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

(c) Considérer $M_1 > M_2$. Représenter graphiquement $\omega(k)$ dans la première zone de Brillouin. Indiquer les valeurs de $\omega(k)$ pour $k = 0$ et pour k en bord de zone, pour les branches acoustique et optique.

(d) Considérer $M_1 \gg M_2$. Montrer que la relation de dispersion peut être exprimée comme :

$$\omega^2(k) \approx \frac{K}{M_2}\left(1 + \frac{M_2}{M_1}\right) \pm \frac{K}{M_2}\left(1 + \frac{M_2}{M_1}\left(1 - 2\sin^2(\frac{ka}{2})\right)\right)$$

Indication : $\sqrt{1+x} \approx 1 + x/2$ pour $x \ll 1$.

Ensuite, déduire l'expression des branches acoustique et optique dans cette limite.

(e) On imagine maintenant que M_1 et M_2 tendent vers une même valeur M. Décrire qualitativement comment on passe d'une courbe de dispersion ayant deux branches à une courbe n'en comportant qu'une. Comparer le résultat avec celui obtenu pour une chaîne avec un atome par maille.

3. De u_n comme superposition de N modes normaux à u_n composé d'un seul mode normal pour trouver ω

Nous avons vu en cours que la solution générale de l'équation du mouvement pour l'atome n (en $R = na$) d'une chaîne monoatomique est donnée par

$$u_n(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu=0}^{N-1} a_\nu \exp\left[i\left(k_\nu na - \omega_\nu t\right)\right] + c.c.$$

L'équation du mouvement dans l'approximation des premiers voisins est (avec m la masse de l'atome et C la constante qui décrit l'interaction)

$$\ddot{u}_n = -\frac{C}{m}\left(-u_{n-1} + 2u_n - u_{n+1}\right)$$

Montrer que si, l'on utilise l'expression générale de u_n dans l'équation du mouvement, on obtient une équation pour chaque ω_ν^2 en fonction de k_ν, a, C et m.

Ceci signifie que, lorsque on cherche les solutions de l'équations du mouvement, par simplicité on peut considérer un déplacement u_n qui est composé d'un seul mode normal.

1. Relation de dispersion et k indépendants

$\lambda = 10a \quad \rightarrow \quad k = \dfrac{2\pi}{10a}$

$\lambda' = \dfrac{10}{11}a \quad \rightarrow \quad k' = \dfrac{2\pi\, 11}{10a} = \dfrac{2\pi}{10a} + \dfrac{2\pi}{a}$

$\dfrac{2\pi}{a}$ est par définition un vecteur du réseau réciproque (dans ce cas c'est le vecteur primitif b).

Comme visible dans la figure de l'énoncé, ce résultat découle du fait que les déplacements u_n sont définis uniquement aux sites du réseau de Bravais, qui coincident avec le positions d'équilibre des atomes dans ce cas monoatomique. L'amplitude des ondes pour des x qui ne correspondent pas à des sites du réseau n'est pas relevante.

Voir l'animation, qui correspond à de longueurs d'onde différentes de celle de l'exercice, à la page `https://i.sstatic.net/LWFQe.gif`

2. Chaîne avec deux atomes par maille

(a) Equations du mouvement :

$$M_1 \ddot{u}_n = K(v_n - 2u_n + v_{n-1}) \tag{1}$$
$$M_2 \ddot{v}_n = K(u_{n+1} - 2v_n + u_n) \tag{2}$$

(b) On considère des déplacements du type :

$$u_n(t) = a_k e^{i(kna - \omega t)}$$
$$v_n(t) = b_k e^{i(kna + ka/2 - \omega t)}$$

En substituant dans (1) et (2) on trouve

$$(-\omega^2 + 2\frac{K}{M_1})\, a_k - 2\frac{K}{M_1} \cos(\frac{ka}{2})\, b_k = 0 \tag{3}$$
$$-2\frac{K}{M_2} \cos(\frac{ka}{2})\, a_k + (-\omega^2 + 2\frac{K}{M_2})\, b_k = 0 \tag{4}$$

Pour les solutions non triviales :

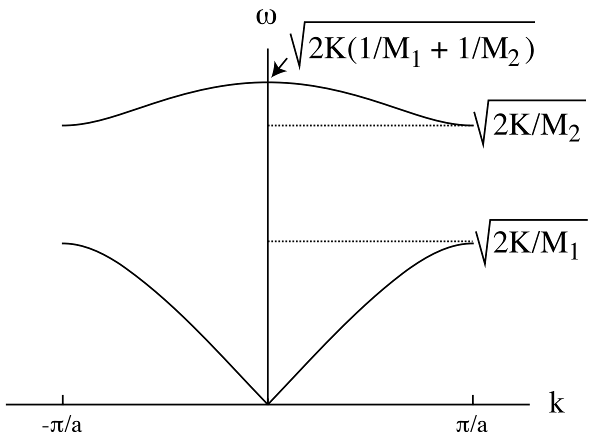
$$(-\omega^2 + 2\frac{K}{M_1})\,(-\omega^2 + 2\frac{K}{M_2}) - 4\frac{K^2}{M_1\, M_2} \cos^2(\frac{ka}{2}) = 0$$

soit

$$\omega^2(k) = K\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \pm K\sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1\, M_2}\sin^2(\frac{ka}{2})} \tag{5}$$

(c) $M_1 > M_2$

Dans ce système 1D, le vecteurs du réseau réciproque sont définis par $G = \frac{2\pi}{a} n$, avec $n \in \mathbb{Z}$. La 1ère zone de Brillouin est donc la région de l'espace réciproque comprise entre $-\frac{\pi}{a}$ et $\frac{\pi}{a}$.



(d) $M_1 \gg M_2$

$$\begin{aligned}
\omega^2(k) &= K\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm K\sqrt{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1\,M_2}\,\sin^2(\frac{ka}{2})} \\
&= K\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm \frac{K}{M_2}\sqrt{\left(\frac{M_2}{M_1}+1\right)^2 - 4\frac{M_2}{M_1}\,\sin^2(\frac{ka}{2})} \\
&\cong \frac{K}{M_2}\left(1+\frac{M_2}{M_1}\right) \pm \frac{K}{M_2}\sqrt{1+2\frac{M_2}{M_1} - 4\frac{M_2}{M_1}\,\sin^2(\frac{ka}{2})} \\
&\cong \frac{K}{M_2}\left(1+\frac{M_2}{M_1}\right) \pm \frac{K}{M_2}\left(1+\frac{M_2}{M_1}\left(1-2\sin^2(\frac{ka}{2})\right)\right)
\end{aligned} \tag{6}$$

Branche acoustique (signe $-$ dans l'équation (6))

$$\omega^2 \cong 2\frac{K}{M_1}\sin^2(\frac{ka}{2}) \Longrightarrow \omega_A \cong 2\sqrt{\frac{K}{2M_1}}\left|\sin(\frac{ka}{2})\right|$$

C'est la relation de dispersion que l'on trouve pour une chaîne linéaire de période a et de constante de couplage $K' = K/2$. En fait, ce mode est entièrement déterminé par le mouvement des atomes lourds, qui sont reliés entre eux par deux ressorts de constante K (ou un ressort de constante $K/2$). Les atomes légers restent toujours au milieu entre leurs voisins : $u_{n+1} - v_n \equiv v_n - u_n$.

Branche optique (signe $+$ dans l'équation (6))

$$\omega^2 \cong 2\frac{K}{M_2} + 2\frac{K}{M_1}\left(1-\sin^2(\frac{ka}{2})\right) \Longrightarrow \omega_O \cong \sqrt{\frac{2K}{M_2}}$$

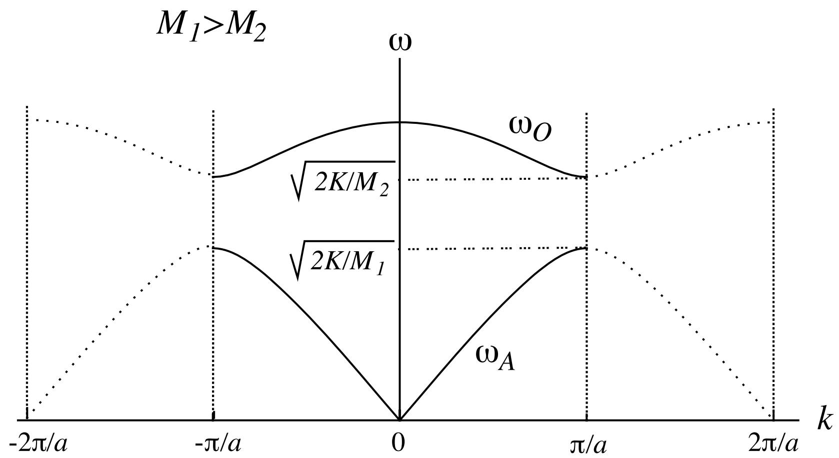
Cette branche devient alors plate. De plus (résultant de (3) et (4))

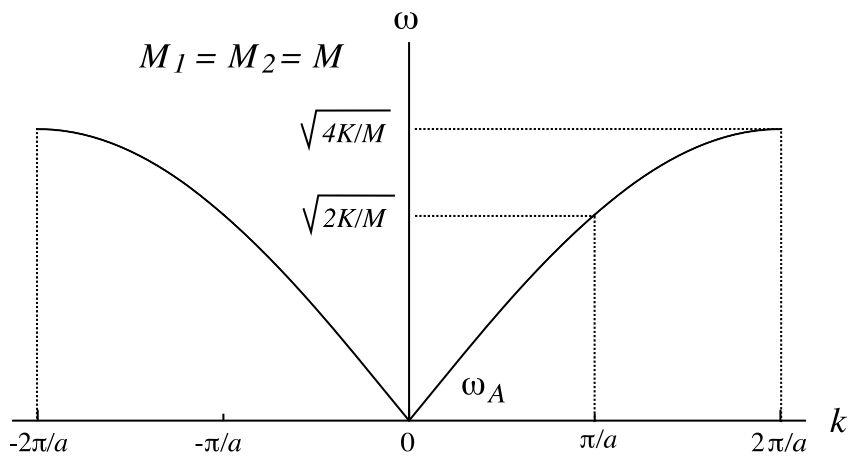
$$\frac{a_k}{b_k} = \frac{-\omega^2 M_2 + 2K}{2K\cos\left(\frac{ka}{2}\right)} \to 0 \quad \text{les atomes lourds ne bougent plus.}$$

Les vibrations optiques correspondent maintenant à des vibrations indépendantes de chaque atome de masse M_2 attaché à deux parois par l'intermédiaire de deux ressorts.

(e) Pour $M_1 > M_2$, on obtient les courbes représentées sur la figure ci-dessous. Les pointillés symbolisent le fait que le vecteur d'onde des vibrations k n'est défini qu'à un vecteur du réseau réciproque $n\frac{2\pi}{a}$ près.

Quand $M_1, M_2 \to M$, l'intervalle des fréquences interdites se resserre ; la branche acoustique tend à se prolonger par la branche optique représentée dans la deuxième zone de Brillouin.
Quand $M_1 = M_2 = M$, la partie de cette branche initialement optique est désormais acoustique et également située dans la nouvelle première zone de Brillouin, car la maille du réseau est devenue $\frac{a}{2}$ (bord de zone : $\frac{2\pi}{a}$ et non $\frac{\pi}{a}$).





Formellement, pour $M_1 = M_2 = M$

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

Le signe $(-)$ donne la branche acoustique :

$$\omega_A = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\left|\sin(\frac{ka}{4})\right|$$

ce qui correspond au résultat pour une chaîne monoatomique de périodicité $a/2$.

Avec le signe $(+)$ on obtient

$$\omega^2 = \frac{2K}{M}\left(1 + \cos(\frac{ka}{2})\right) = \frac{4K}{M}\cos^2(\frac{ka}{4}) \to \omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\left|\cos(\frac{ka}{4})\right|$$

La présence de cette branche est un artefact dû au fait qu'on a choisi une maille trop grande.

3. De u_n comme superposition de N modes normaux à u_n composé d'un seul mode normal pour trouver ω

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp\left[i\left(k_\nu na - \omega_\nu t\right)\right] + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp\left[-i\left(k_\nu na - \omega_\nu t\right)\right]$$

$$\dot{u}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu (-i\omega_\nu) \exp\left[i\left(k_\nu na - \omega_\nu t\right)\right] + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu (+i\omega_\nu) \exp\left[-i\left(k_\nu na - \omega_\nu t\right)\right]$$

$$\ddot{u}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu (-\omega_\nu^2) \exp\left[i\left(k_\nu na - \omega_\nu t\right)\right] + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu (-\omega_\nu^2) \exp\left[-i\left(k_\nu na - \omega_\nu t\right)\right]$$

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp[+] + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp[-]$$

$$u_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp\left(-ik_\nu a\right) \exp[+] + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp\left(+ik_\nu a\right) \exp[-]$$

$$u_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp\left(+ik_\nu a\right) \exp[+] + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp\left(-ik_\nu a\right) \exp[-]$$

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \{\exp[+] + \exp[-]\}(-\omega_\nu^2) = -\frac{C}{m}\left(2\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \{\exp[+] + \exp[-]\} + \right.$$
$$\left. -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp\left(-ik_\nu a\right)\{\exp[+] + \exp[-]\} - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \exp\left(+ik_\nu a\right)\{\exp[+] + \exp[-]\}\right)$$

On a $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\nu a_\nu \Big(\quad\Big) = 0$, relation qui doit être vraie pour chaque mode ν indépendamment. Donc

$$\omega_\nu^2 = \frac{C}{m}\left(2 - \exp\left(-ik_\nu a\right) - \exp\left(+ik_\nu a\right)\right) = ... = \frac{4C}{m} \sin^2 \frac{k_\nu a}{2}$$

C'est la relation qu'on obtient si l'on prend u_n composé d'un seul mode ν.