Mines Deuxième année
Physique de la matière condensée et des nano-objets
TD7-2011

Vibration d'une chaine semi-infinie : notions de mode localisé [1]

Résumé

On se propose d'étudier les modes de vibrations (phonons) d'une chaîne linéaire semi-infinie dans l'approximation harmonique. Nous verrons que sous certaines conditions il existe un mode vibrationnel localisé. à l'extrémité de la chaîne

1 Approximation harmonique

On considère une chaîne linéaire d'atomes en interaction dont l'énergie totale s'écrit :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m \\ n \neq m}} V(x_m - x_n)$$

où $x_n = na + u_n$, u_n étant un petit déplacement autour de la position d'équilibre $x_n^0 = na$.

Question no 1 : Développer l'énergie E au second ordre en $(u_n - u_m)$ et montrer que l'on peut écrire :

$$E = E_0 + E_{\text{harm}}$$

Où :

$$E_{\text{harm}} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{n,m \\ n \neq m}} C_{n,m} (u_m - u_n)^2$$

et

$$C_{n,m} = V''(x_n^0 - x_m^0) \quad ; \quad E_0 : \text{énergie à l'équilibre.}$$

Par la suite on limite les interactions aux atomes premiers voisins et l'on posera $C = V''(a)$.

Question no 2 : Montrer que l'on peut écrire :

$$E_{\text{harm}} = \frac{C}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2$$

2 Chaîne linéaire semi-infinie

On considère une chaîne linéaire semi-infinie c'est à dire coupée et l'on s'intÃl'resse au cas où la masse de l'atome en bout de chaîne M_0 est différente de celle des autres atomes de la chaîne.

1. Inspiré du livre de M.-C. Desjonquère et D. Spanjaard "Concepts in surface physics".

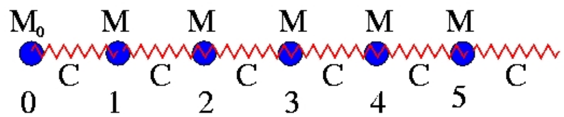

FIGURE 1 – Chaîne linéaire semin-infinie d'atomes de masse M ($M_0 \neq M$) reliés par des "ressorts" de raideur C.

2.1 Equations du mouvement

Question no 3 : Ecrire les équations du mouvement pour les déplacements $u_n(t)$. On cherchera les solutions sous la forme $u_n(t) = u_n exp(i\omega t)$ et l'on distinguera les cas a) $n = 0$ et b) $n \geq 1$

2.2 Rappels sur la chaîne linéaire infinie

Dans le cas d'une chaîne infinie les modes de vibrations peuvent s'écrire sous la forme $u_n = u_0 \exp(ikna)$

Question no 4 : Rappeler la relation de dispersion de la chaîne infinie. Vérifier que le spectre vibrationel s'étend de $\omega = 0$ à $\omega = (4C/M)^{1/2}$. Montrer que dans limite des grandes longueurs d'onde ($k \to 0$), ω devient proportionnel à k, $\omega = vk$, avec $v = a(C/M)^{1/2}$. Quelle est la signification de v ?

2.3 Chaîne linéaire semi-infinie : recherche générale de solutions

Pour une chaîne semi-infinie on s'attend à ce que pour n grand (loin de la surface) les déplacements et fréquences prennent la même forme que pour la chaîne infinie. En revanche on va également chercher des solutions exponentiellement décroissante de la forme : $u_n = u_0 \exp(-kna)$, où k est un complexe de partie réelle positive.

Question no 5 : Montrer en utilisant la relation du cas b) ($n > 1$) que $M\omega^2 = 2C[1 - \cosh(ka)]$

Question no 6 : Utiliser la relation du cas a) ($n = 0$) pour montrer que $r = \exp(ka)$ est solution d'une équation du second degré dont les solutions sont :
i) $\exp(ka) = 1$
ii) $\exp(ka) = 1 - M/M0$
A quoi correspond la première solution ?

2.4 Solutions localisées

On s'intéresse à la solution de l'équation ii. On distingue alors les cas où $M < M_0$ et $M > M_0$

Question no 7 : Montrer qu'il n'existe pas de solution de la forme $u_n = u_0 \exp(-kna)$ pour $M < M_0$

Question no 8 : Montrer que lorsque $M > M_0$, on peut écrire $ka = k_0a + i\pi$ avec $\exp(k_0a) = M/M_0 - 1$. En déduire que seul lorsque $M_0 < M/2$ un mode exponentiellement décroissant existe. Montrer que dans ce cas :

$$u_n = u_0(-1)^n \exp(-k_0na)$$

de fréquence correspondante :

$$\omega_s = (2C/M)^{1/2}(1+\cosh(k_0a))^{1/2}$$

Comment est située la fréquence correspondante par rapport au spectre de la chaîne infinie ?

3 Modes localisés

Ce type de mode exponentiellement décroissant à partir de la surface est appelé mode de surface qui correspond à des vecteurs d'onde complexes. On peut montrer que de tels modes peuvent également apparaître lorsque la "raideur du ressort" qui lie l'atome de surface aux autres atomes est renforcée par rapport au volume. Plus exactement lorsque $C_0 > 4/3C$ un mode localisé à la surface apparaît. La notion de mode de surface joue un rôle extrêmement important en physique. Un phénomène tout à fait similaire existe en structure électronique. Les fameux "quantum corrals" en sont un exemple frappant.

Cependant le modèle unidimensionnel est réducteur. En effet on peut montrer que pour une vraie surface bidimensionnelle (et non réduite à un atome !) il peut exister des modes localisés à la surface sans modifier les paramètres de surface (masse ou constante de force). De plus ces modes possèdent une dispersion bidimensionnelle. Il s'agit de véritables ondes de surface.

4 Ondes de Rayleigh

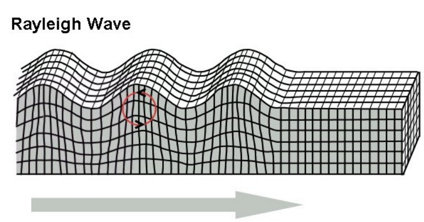

FIGURE 2 – Onde de Rayleigh

Il existe en particulier des modes de vibration de surface de grande longueur d'onde dÃľcouvertes initialement par Lord Rayleigh. Pour dÃľmontrer leur existence il faut utiliser les équations des ondes élastiques (limite du continuum) et chercher les solutions exponentiellement décroissante en volume.

Question no 9 : Montrer que pour les grandes longueurs d'onde les équations du mouvement unidimensionelles peuvent s'écrire :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Les ondes de Rayleigh jouent un rôle très important non seulement en physique des surfaces mais aussi en géophyique car elles sont à l'origine d'un mode très efficace de propagation des tremblements de terre.
Technologiquement on peut également utiliser ces modes : certains écrans tactiles sont basés sur ce principe.