

Le système étudié est constitué par une chaîne linéaire d'atomes de carbone identiques avec une alternance de simple et double liaison (figure 1). Les électrons libres dans un système conjuguée (alternance de simple et double liaison) sont en mouvement tout au long de la chaîne ; la double liaison ne peut être localisée : c'est l'instabilité de Peierls dans un système unidimensionnel. On se propose d'étudier l'effet de l'instabilité sur les fréquences de vibration dans un tel système.

On suppose que la distance entre deux atomes de carbone voisins est la même quel que soit le type de liaison (simple ou double). La constante de force de rappel est différente selon le type de liaison : γ_1 pour la simple liaison et γ_2 pour la double liaison.

On désignera par u_n et v_n les écarts par rapport aux positions d'équilibre des atomes de carbone de cette chaîne linéaire.

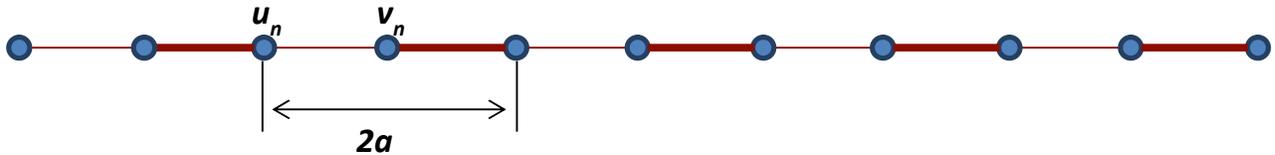


Figure 1

Partie 1

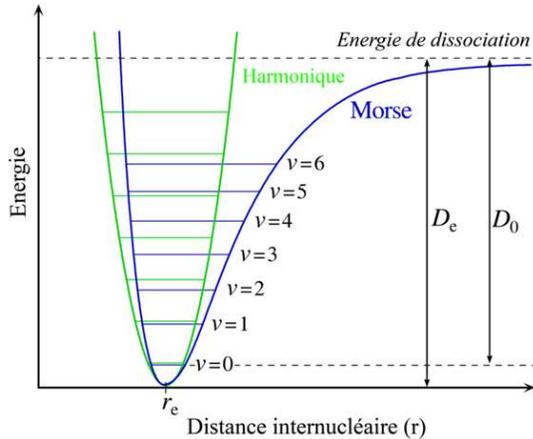


Figure 2

1. Interpréter ce schéma ;
2. Expliquer pourquoi les interactions atomiques peuvent être approximées par un potentiel harmonique de type :

$$V(r) = \frac{\gamma}{2}(r - r_e)^2$$

Partie 2

1. Donner la valeur du paramètre de la maille de cette chaîne linéaire ; en déduire les limites de la 1^{ère} zone de Brillouin ;
2. Combien y-a-t-il d'atomes par maille élémentaire ; justifier votre réponse ;

3. On ne s'intéresse qu'aux interactions entre 1ers voisins. Donner l'expression du potentiel d'interaction pour chaque espèce d'atomes ;
4. Etablir les équations de mouvement relatives à chaque espèce d'atomes ;
5. Pour résoudre le système d'équations trouvés précédemment, nous chercherons des solutions de la forme : $u_n = ue^{i(2kna-)}$ $v_n = ve^{i(2kna-)}$
 - a. Résoudre ce système d'équations ; montrer qu'il possède deux (02) solutions différentes ;
 - b. Les deux solutions précédentes correspondent à deux branches : branche acoustique et branche optique ; tracer ses deux branches sur un schéma en précisant la nature de chaque branche ; on se limitera à la 1^{ère} zone de Brillouin ;
 - c. Déterminer la vitesse du son ainsi que les vitesses de groupe (au centre et aux bords de la 1^{ère} zone de Brillouin) ;
 - d. Déterminer la valeur du gap optique observé dans un tel système ;
- 5- On considère maintenant que $\gamma_1 = \gamma_2$;
 - a- Donner les nouvelles valeurs des pulsations de vibrations ;
 - b- Retracer sur un schéma les branches acoustique et optique ;
 - c- Interpréter ce résultat ;

