



Structure de bande de chaînes atomiques harmoniques et anharmoniques couplées

B. Dubus^a, J. Vasseur^b, N. Swintec^c, K. Muralidharan^c et P. Deymier^c

^aIEMN, Lille, UMR 8520 CNRS, ISEN, 41 Boulevard Vauban, 59800 Lille, France

^bIEMN, Lille, UMR 8520 CNRS, ISEN, 41 Boulevard Vauban, 59046 Lille, France

^cDept of Materials Science and Engineering, University of Arizona, 1235 E. James E. Rogers Way Room

141 P.O. Box 210012, Tucson, AZ 85721, USA

bertrand.dubus@isen.fr

Les progrès récents des nanotechnologies permettent d'envisager la fabrication de métamatériaux acoustiques et de cristaux phononiques constitués d'atomes et de molécules. En particulier, le contrôle des propriétés des phonons acoustiques par structuration de la matière à l'échelle nanométrique peut conduire à des modifications notables des propriétés thermiques. Dans ce cadre, la propagation des ondes acoustiques dans des chaînes d'atomes et plus particulièrement les effets non linéaires associés à cette propagation sont étudiés de manière à identifier des phénomènes physiques inhabituels susceptibles d'applications. La géométrie étudiée est constituée de deux chaînes rectilignes d'atomes identiques décrites par un ensemble de masses ponctuelles interconnectées par des ressorts pouvant présenter une non-linéarité quadratique. Les deux chaînes sont couplées par des ressorts linéaires qui relient les masses de chaque chaîne situées à la même abscisse. La propagation des ondes acoustiques dans cet ensemble de chaînes couplées est résolue par une méthode de perturbation au deuxième ordre basée sur une analyse aux échelles de temps multiples. Ce modèle ne prend en compte que les interactions phonon-phonon ayant le même nombre d'onde. Deux solutions sont trouvées pour le problème linéaire, correspondant à des ondes dont les vibrations sur les deux chaînes sont en opposition de phase (courbe de dispersion de plus basse énergie) ou en phase (courbe de plus haute énergie). Lorsque la symétrie de la géométrie est rompue par l'introduction d'une non-linéarité quadratique sur l'une des chaînes, une perturbation de la courbe de dispersion apparaît sous la forme d'une résonance au voisinage d'un nombre d'onde critique k_c . Ce phénomène s'explique par une interaction à trois phonons impliquant deux phonons k_c de la bande de basse énergie et un phonon $2k_c$ de la bande de haute énergie. Les simulations par dynamique moléculaire associées à un calcul de la densité d'énergie spectrale permettent de calculer les phonons à l'équilibre thermodynamique en considérant toutes les interactions à trois phonons et sans les limitations du modèle de perturbation. Les phonons se positionnent sur les courbes de dispersion linéaires lorsque l'énergie vibratoire est peu élevée. A plus forte énergie, trois phénomènes sont remarqués : 1) l'élargissement de la distribution des phonons sur des pics satellites autour des courbes de dispersion ; 2) l'absence d'interaction résonante ; 3) l'apparition d'une branche supplémentaire dont le lien possible avec l'interaction résonante à trois phonons identifiée dans le modèle analytique reste à établir.

1 Introduction

Les progrès récents des nanotechnologies permettent d'envisager la fabrication de métamatériaux acoustiques et de cristaux phononiques constitués d'atomes et de molécules. En particulier, le contrôle des propriétés des phonons acoustiques par structuration de la matière à l'échelle nanométrique peut conduire à des modifications notables des propriétés thermiques. Dans ce cadre, la propagation des ondes acoustiques dans des chaînes d'atomes et plus particulièrement les effets non linéaires associés à cette propagation sont étudiés de manière à identifier des phénomènes physiques inhabituels susceptibles d'applications. L'auto-interaction d'une onde se propageant dans une chaîne rectiligne monoatomique a été étudiée dans le cas de forces non linéaires cubiques [1] et quadratiques [2]. Elle induit un décalage en fréquence des courbes de dispersion dépendant de l'amplitude de l'onde. L'interaction entre deux ondes dans une chaîne monoatomique anharmonique à non-linéarité cubique [3] conduit à la formation de branches supplémentaires dépendant de la fréquence et de l'amplitude.

Ce travail présente l'étude de l'auto-interaction d'ondes élastiques dans des chaînes monoatomiques couplées. Les cas des couplages de deux chaînes linéaires [4], puis d'une chaîne linéaire et d'une chaîne non linéaires sont traités respectivement dans les seconde et troisième parties. Des résultats de simulation par dynamique moléculaire sont également présentés pour étudier l'effet des interactions multi-phonons.

2 Chaînes monoatomiques harmoniques couplées

Le cas de deux chaînes monoatomiques rectilignes identiques couplées est décrit à la figure 1. Les paramètres du système sont la périodicité spatiale a , la masse des atomes m et les rigidités des ressorts intra-chaînes β et

inter-chaînes β' . u_n (respectivement v_n) représente le déplacement de l'atome de la chaîne 1 (respectivement la chaîne 2) situé en $x = na$.

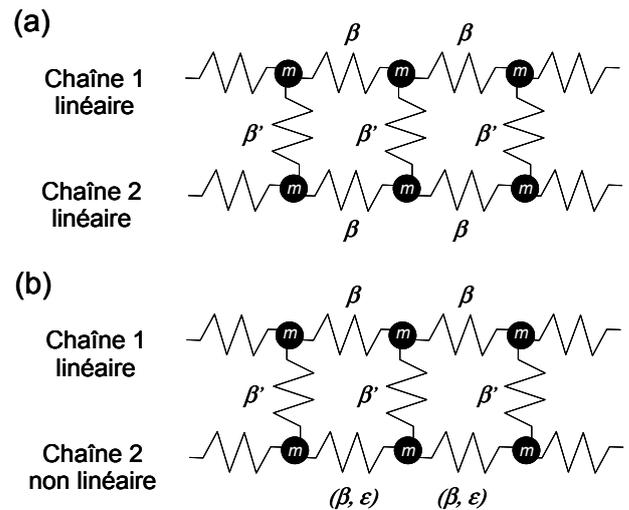


Figure 1: géométrie des systèmes étudiés :

- (a) chaînes harmoniques couplées ;
 (b) chaînes harmonique et anharmonique couplées

La relation fondamentale de la dynamique s'exprime pour ces deux atomes sous la forme

$$\begin{cases} \frac{d^2 u_n}{dt^2} - \frac{\Omega^2}{4} (u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) - \Omega'^2 (v_n - u_n) = 0 & (1a) \\ \frac{d^2 v_n}{dt^2} - \frac{\Omega^2}{4} (v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1}) - \Omega'^2 (u_n - v_n) = 0 & (1b) \end{cases}$$

avec $\Omega^2 = 4\beta/m$ et $\Omega'^2 = \beta'/m$. Les solutions harmoniques sont recherchées sous la forme

$$u_n = A_0 e^{i(kna - \omega t)} ; \quad v_n = B_0 e^{i(kna - \omega t)} \quad (2)$$

Le report de l'équation (2) dans (1a) et (1b) conduit au système d'équation

$$\begin{pmatrix} \left(\omega^2 - \Omega^2 \sin\left(\frac{ka}{2}\right) - \Omega'^2 \right) & \Omega'^2 \\ \Omega'^2 & \left(\omega^2 - \Omega^2 \sin\left(\frac{ka}{2}\right) - \Omega'^2 \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Les solutions non triviales sont obtenues par annulation du déterminant. Deux solutions, dont les structures de bande sont présentées à la figure 2, sont calculées :

- la solution de plus basse énergie vérifie

$$\omega = \omega_0^- = \Omega \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|. \quad (3)$$

Elle correspond à la solution où les deux chaînes vibrent en phase ($A_0 = B_0$). Dans ce cas, aucune énergie n'est stockée dans les ressorts de couplage et la relation de dispersion est celle d'une chaîne mono-atomique isolée [5].

- la solution de plus haute énergie a pour relation de dispersion

$$\omega = \omega_0^+ = \sqrt{\Omega^2 \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + 2\Omega'^2}. \quad (4)$$

Dans ce cas, les deux chaînes vibrent en opposition de phase ($A_0 = -B_0$).

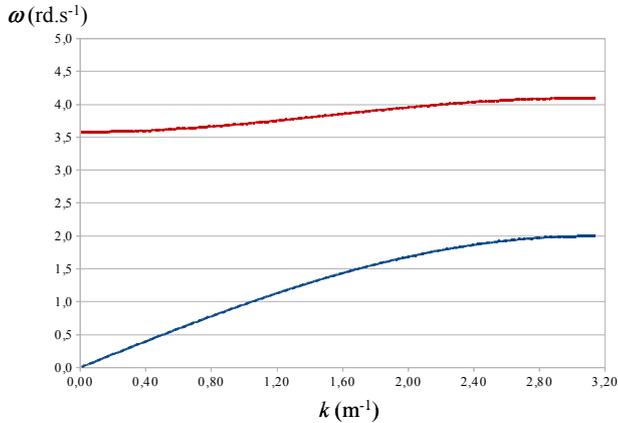


Figure 2: structures de bande du système de chaînes harmoniques identiques couplées ($a = 1$ m, $m = 1$ kg, $\beta = 1$ N.m⁻¹, $\beta' = 6,4$ N.m⁻¹)

3 Chaînes monoatomiques harmonique et anharmonique couplées

3.1 Description du problème

Dans la suite du problème, la chaîne 2 est une chaîne anharmonique dans laquelle la force d'interaction exercée par la masse $n+1$ sur la masse n s'écrit :

$$F_{n+1,n} = \beta(v_{n+1} - v_n) + \varepsilon(v_{n+1} - v_n)^2. \quad (4)$$

ε est un petit paramètre caractérisant la non-linéarité du ressort reliant les masses. L'équation (1b) est remplacée par

$$\frac{d^2 v_n}{dt^2} - \frac{\Omega^2}{4}(v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1}) - \Omega'^2(u_n - v_n) - \frac{\varepsilon}{m}[(v_{n+1} - v_n)^2 - (v_n - v_{n-1})^2] = 0. \quad (5)$$

3.2 Résolution par méthode des échelles de temps multiples

Pour calculer la structure de bande, une méthode perturbative du second ordre est utilisée, basée sur la méthode des échelles de temps multiples [2, 6, 7]. La variable t est remplacée par un ensemble de variables $\tau = (\tau_0, \tau_1, \tau_2)$ pour lesquelles $\tau_0 = t$, $\tau_1 = \varepsilon t$ et $\tau_2 = \varepsilon^2 t$. Ce changement de variable, introduit dans les équations (1a) et (5), conduit aux systèmes d'équations suivants aux ordres 0, 1 et 2 en ε

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u_n^{(0)}}{\partial \tau_0^2} - \frac{\Omega^2}{4}(u_{n+1}^{(0)} - 2u_n^{(0)} + u_{n-1}^{(0)}) - \Omega'^2(v_n^{(0)} - u_n^{(0)}) = 0 & (6a) \\ \frac{\partial^2 v_n^{(0)}}{\partial \tau_0^2} - \frac{\Omega^2}{4}(v_{n+1}^{(0)} - 2v_n^{(0)} + v_{n-1}^{(0)}) - \Omega'^2(u_n^{(0)} - v_n^{(0)}) = 0 & (6b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u_n^{(1)}}{\partial \tau_0^2} - \frac{\Omega^2}{4}(u_{n+1}^{(1)} - 2u_n^{(1)} + u_{n-1}^{(1)}) - \Omega'^2(v_n^{(1)} - u_n^{(1)}) = -2 \frac{\partial^2 u_n^{(0)}}{\partial \tau_0 \partial \tau_1} & (7a) \\ \frac{\partial^2 v_n^{(1)}}{\partial \tau_0^2} = \frac{\Omega^2}{4}(v_{n+1}^{(0)} - 2v_n^{(0)} + v_{n-1}^{(0)}) + \Omega'^2(u_n^{(0)} - v_n^{(0)}) = -2 \frac{\partial^2 v_n^{(0)}}{\partial \tau_0 \partial \tau_1} + \frac{1}{m}[(v_{n+1}^{(0)} - v_n^{(0)})^2 - (v_n^{(0)} - v_{n-1}^{(0)})^2] & (7b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u_n^{(2)}}{\partial \tau_0^2} - \frac{\Omega^2}{4}(u_{n+1}^{(2)} - 2u_n^{(2)} + u_{n-1}^{(2)}) - \Omega'^2(v_n^{(2)} - u_n^{(2)}) = -2 \frac{\partial^2 u_n^{(0)}}{\partial \tau_0 \partial \tau_2} - \frac{\partial^2 u_n^{(0)}}{\partial \tau_1^2} - 2 \frac{\partial^2 u_n^{(1)}}{\partial \tau_0 \partial \tau_1} & (8a) \\ \frac{\partial^2 v_n^{(2)}}{\partial \tau_0^2} = \frac{\Omega^2}{4}(v_{n+1}^{(2)} - 2v_n^{(2)} + v_{n-1}^{(2)}) + \Omega'^2(u_n^{(2)} - v_n^{(2)}) = -2 \frac{\partial^2 v_n^{(0)}}{\partial \tau_0 \partial \tau_2} - \frac{\partial^2 v_n^{(0)}}{\partial \tau_1^2} - 2 \frac{\partial^2 v_n^{(1)}}{\partial \tau_0 \partial \tau_1} + \frac{2}{m}[(v_{n+1}^{(0)} - v_n^{(0)})(v_{n+1}^{(1)} - v_n^{(1)}) - (v_n^{(0)} - v_{n-1}^{(0)})(v_n^{(1)} - v_{n-1}^{(1)})] & (8b) \end{cases}$$

Les solutions du système d'équations homogènes à l'ordre 0 (6a) et (6b) s'expriment directement à partir des solutions harmoniques du paragraphe 2

$$u_n^{(0)} = A_0^+ e^{i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} + \overline{A_0^+} e^{-i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} + A_0^- e^{i(kna - \omega_0^- \tau_0)} + \overline{A_0^-} e^{-i(kna - \omega_0^- \tau_0)}, \quad (9)$$

$$v_n^{(0)} = -A_0^+ e^{i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} - \overline{A_0^+} e^{-i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} + A_0^- e^{i(kna - \omega_0^- \tau_0)} + \overline{A_0^-} e^{-i(kna - \omega_0^- \tau_0)}, \quad (10)$$

où \overline{X} est le complexe conjugué de X et

$$A_0^+(\tau_1, \tau_2) = \alpha_0^+(\tau_1, \tau_2) e^{-i\varphi_0^+(\tau_1, \tau_2)}, \quad (11)$$

$$A_0^-(\tau_1, \tau_2) = \alpha_0^-(\tau_1, \tau_2) e^{-i\varphi_0^-(\tau_1, \tau_2)}. \quad (12)$$

Les solutions du système d'équation à l'ordre 1 s'écrivent comme la somme d'une solution générale de l'équation homogène similaire aux solutions (9) et (10) (qui modifie l'amplitude de la solution à l'ordre 0 sans modifier la courbe de dispersion) et d'une solution particulière fonction de la solution à l'ordre 0. Différentes fréquences sont présentes dans l'expression de la solution particulière. Les termes ayant une dépendance temporelle en $\pm \omega_0^+$ et $\pm \omega_0^-$ sont associés aux termes $\partial^2 u_n^{(0)}/\partial \tau_0 \partial \tau_1$ et $\partial^2 v_n^{(0)}/\partial \tau_0 \partial \tau_1$ du second membre de (7a) et (7b). Comme le premier membre s'annule à ces fréquences, on obtient simplement

$$\frac{\partial A_0^+}{\partial \tau_1} = \frac{\partial \overline{A_0^+}}{\partial \tau_1} = \frac{\partial A_0^-}{\partial \tau_1} = \frac{\partial \overline{A_0^-}}{\partial \tau_1} = 0, \quad (13)$$

soit

$$A_0^+(\tau_2) = \alpha_0^+(\tau_2) e^{-i\varphi_0^+(\tau_2)}, \quad (14)$$

$$A_0^-(\tau_2) = \alpha_0^-(\tau_2) e^{-i\varphi_0^-(\tau_2)}. \quad (15)$$

Les termes ayant une dépendance temporelle en $\pm 2\omega_0^+$, $\pm 2\omega_0^-$ et $\pm(\omega_0^+ + \omega_0^-)$ conduisent aux solutions particulières

$$u_{n,p}^{(1)} = B_1 e^{2i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} + B_1' e^{-2i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} + C_1 e^{2i(kna - \omega_0^- \tau_0)} + C_1' e^{-2i(kna - \omega_0^- \tau_0)}, \quad (16)$$

$$v_{n,p}^{(1)} = D_1 e^{i(kna - (\omega_0^+ + \omega_0^-) \tau_0)} + D_1' e^{-i(kna - (\omega_0^+ + \omega_0^-) \tau_0)} + E_1 e^{2i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} + E_1' e^{-2i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} + F_1 e^{2i(kna - \omega_0^- \tau_0)} + F_1' e^{-2i(kna - \omega_0^- \tau_0)} + G_1 e^{i(kna - (\omega_0^+ + \omega_0^-) \tau_0)} + G_1' e^{-i(kna - (\omega_0^+ + \omega_0^-) \tau_0)} \quad (17)$$

avec

$$B_1 = \frac{-2i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_1(2\omega_0^+)}{m} (A_0^+)^2, \quad (18)$$

$$B_1' = \frac{2i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_1(2\omega_0^+)}{m} (\overline{A_0^+})^2, \quad (19)$$

$$C_1 = \frac{-2i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_1(2\omega_0^-)}{m} (A_0^-)^2, \quad (20)$$

$$C_1' = \frac{2i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_1(2\omega_0^-)}{m} (\overline{A_0^-})^2, \quad (21)$$

$$D_1 = \frac{4i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_1(\omega_0^+ + \omega_0^-)}{m} A_0^+ A_0^-, \quad (22)$$

$$D_1' = \frac{-4i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_1(\omega_0^+ + \omega_0^-)}{m} \overline{A_0^+ A_0^-}, \quad (23)$$

$$E_1 = \frac{-2i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_2(2\omega_0^+)}{m} (A_0^+)^2, \quad (24)$$

$$E_1' = \frac{2i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_2(2\omega_0^+)}{m} (\overline{A_0^+})^2, \quad (25)$$

$$F_1 = \frac{-2i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_2(2\omega_0^-)}{m} (A_0^-)^2, \quad (26)$$

$$F_1' = \frac{2i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_2(2\omega_0^-)}{m} (\overline{A_0^-})^2, \quad (27)$$

$$G_1 = \frac{4i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_2(\omega_0^+ + \omega_0^-)}{m} A_0^+ A_0^-, \quad (28)$$

$$G_1' = \frac{-4i(\sin(2ka) - 2\sin(ka))\Phi_2(\omega_0^+ + \omega_0^-)}{m} \overline{A_0^+ A_0^-}, \quad (29)$$

et

$$\Phi_1(\omega) = \frac{-\Omega'^2}{(\omega^2 - \Omega^2 \sin^2(ka) - 2\Omega'^2)(\omega^2 - \Omega^2 \sin^2(ka))}, \quad (30)$$

$$\Phi_2(\omega) = \frac{\omega^2 - \Omega^2 \sin^2(ka) - \Omega'^2}{(\omega^2 - \Omega^2 \sin^2(ka) - 2\Omega'^2)(\omega^2 - \Omega^2 \sin^2(ka))}. \quad (31)$$

Les solutions du système d'équation à l'ordre 2 s'écrivent comme la somme d'une solution générale de l'équation homogène similaire aux solutions (9) et (10) et d'une solution particulière fonction des solutions aux ordres 0 et 1. Parmi les différentes fréquences présentes à l'ordre 2, seuls les termes ayant une dépendance temporelle en $\pm \omega_0^+$ et $\pm \omega_0^-$ sont conservés pour obtenir la perturbation apportée à la solution linéaire. D'après les expressions (14) et (15), tous les termes du second membre de (8a) où interviennent $\partial u_n^{(0)}/\partial \tau_1$ et $\partial u_n^{(1)}/\partial \tau_1$ sont nuls. La solution particulière vérifie donc

$$2i \left[\omega_0^+ \left(-\frac{\partial A_0^+}{\partial \tau_2} e^{i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} + \frac{\partial \overline{A_0^+}}{\partial \tau_2} e^{-i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} \right) + \omega_0^- \left(-\frac{\partial A_0^-}{\partial \tau_2} e^{i(kna - \omega_0^- \tau_0)} + \frac{\partial \overline{A_0^-}}{\partial \tau_2} e^{-i(kna - \omega_0^- \tau_0)} \right) \right] = 0 \quad (32)$$

La partie imaginaire du premier membre de (32) est naturellement nulle. L'annulation de la partie réelle du premier membre de (32) conduit à

$$\frac{\partial \alpha_0^+}{\partial \tau_2} = \frac{\partial \alpha_0^-}{\partial \tau_2} = 0. \quad (33)$$

α_0^+ , α_0^- , sont donc indépendants de τ_2 . De même le terme en $\partial^2 v_n^{(0)}/\partial \tau_0 \partial \tau_2$ et les termes quadratiques du second membre de l'équation (8b) conduisent à

$$2i \left[\omega_0^+ \left(\frac{\partial A_0^+}{\partial \tau_2} e^{i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} - \frac{\partial \overline{A_0^+}}{\partial \tau_2} e^{-i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} \right) + \omega_0^- \left(-\frac{\partial A_0^-}{\partial \tau_2} e^{i(kna - \omega_0^- \tau_0)} + \frac{\partial \overline{A_0^-}}{\partial \tau_2} e^{-i(kna - \omega_0^- \tau_0)} \right) \right] = -\frac{8(\sin(2ka) - 2\sin(ka))^2}{m^2} \quad (34)$$

$$\left[\Phi_2(2\omega_0^+) \left(-A_0^+ \overline{A_0^+} e^{-i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} - A_0^+ \overline{A_0^+} e^{i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} \right) + \Phi_2(2\omega_0^-) \left(A_0^- \overline{A_0^-} e^{-i(kna - \omega_0^- \tau_0)} + A_0^- \overline{A_0^-} e^{i(kna - \omega_0^- \tau_0)} \right) \right]$$

$$+ 2\Phi_2(\omega_0^+ + \omega_0^-) \left(-A_0^- \overline{A_0^-} \overline{A_0^+} e^{-i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} - A_0^- \overline{A_0^-} A_0^+ e^{i(kna - \omega_0^- \tau_0)} + A_0^+ \overline{A_0^+} \overline{A_0^-} e^{-i(kna - \omega_0^- \tau_0)} A_0^+ \overline{A_0^+} A_0^- e^{i(kna - \omega_0^+ \tau_0)} \right)$$

soit

$$\frac{\partial \varphi_0^+}{\partial \tau_2} = \frac{4(\sin(2ka) - 2\sin(ka))^2}{\omega_0^+ m^2} \quad (35)$$

$$\left[\alpha_0^{+2} \Phi_2(2\omega_0^+) + 2\alpha_0^{-2} \Phi_2(\omega_0^+ + \omega_0^-) \right]$$

$$k_c = \pm \frac{2}{a} \arcsin \left[\left(\frac{\Omega'^2}{2\Omega^2} \right)^{\frac{1}{4}} \right] \quad (41)$$

est contrôlée par le rapport des pulsations Ω et Ω' comme l'illustre la figure 3.

$$\frac{\partial \varphi_0^-}{\partial \tau_2} = \frac{4(\sin(2ka) - 2\sin(ka))^2}{\omega_0^- m^2} \quad (36)$$

$$\left[\alpha_0^{-2} \Phi_2(2\omega_0^-) + 2\alpha_0^{+2} \Phi_2(\omega_0^+ + \omega_0^-) \right]$$

Les relations de dispersion du système de chaînes monoatomiques harmonique et anharmonique couplées s'écrivent finalement

$$\omega^+ = \omega_0^+ + \varepsilon^2 \frac{4(\sin(2ka) - 2\sin(ka))^2}{\omega_0^+ m^2} \quad (37)$$

$$\left[\alpha_0^{+2} \Phi_2(2\omega_0^+) + 2\alpha_0^{-2} \Phi_2(\omega_0^+ + \omega_0^-) \right]$$

$$\omega^- = \omega_0^- + \varepsilon^2 \frac{4(\sin(2ka) - 2\sin(ka))^2}{\omega_0^- m^2} \quad (38)$$

$$\left[\alpha_0^{-2} \Phi_2(2\omega_0^-) + 2\alpha_0^{+2} \Phi_2(\omega_0^+ + \omega_0^-) \right]$$

3.3 Analyse des structures de bande

Les structures de bande calculées sont présentées à la Figure 3 pour les paramètres suivants : $a = 1$ m, $m = 1$ kg, $\beta = 1$ N.m⁻¹, $\varepsilon = 1.6$ N.m⁻², $\alpha_0^+ = 3 \cdot 10^{-2}$ m, $\alpha_0^- = 3 \cdot 10^{-2}$ m, β' prenant les valeurs 0.1, 1, 4 et 6,4 N.m⁻¹. La principale modification observée apparaît sur la branche de basse énergie sous la forme d'une résonance au voisinage d'un nombre d'onde critique k_c . Cette singularité provient du terme $\Phi_2(2\omega_0^-)$ de l'équation (38) dont le dénominateur s'annule lorsque

$$4\omega_0^{-2}(k_c) - \Omega^2 \sin^2(k_c a) - 2\Omega'^2 = 0 \quad (39)$$

$$4\omega_0^{-2}(k_c) - \omega_0^{+2}(2k_c) = 0 \quad (40)$$

Ce phénomène s'explique donc par une interaction à trois phonons impliquant deux phonons de nombre d'onde k_c de la bande de basse énergie et un phonon $2k_c$ de la bande de haute énergie. Il est intéressant de noter que cet effet disparaît dans le cas de deux chaînes non linéaires identiques dont le traitement n'est pas décrit dans ce texte. La valeur théorique de k_c

3.4 Résolution par simulation en dynamique moléculaire

Pour calculer la distribution des phonons à l'équilibre thermodynamique en considérant toutes les interactions à trois phonons et sans les limitations du modèle de perturbation, des simulations de dynamique moléculaire ont été conduites sur le système des chaînes couplées harmonique et anharmonique ($a = 1$ m, $m = 1$ kg, $\beta = 1$ N.m⁻¹, $\beta' = 6,4$ N.m⁻¹, $\varepsilon = 1.6$ N.m⁻², $\alpha_0^+ = \alpha_0^- = 3 \cdot 10^{-2}$ m). Des conditions aux limites périodiques sont appliquées pour réduire la taille du modèle. Une distribution aléatoire des déplacements des masses est imposée comme condition initiale. Les données de vitesses de l'ensemble des masses pendant toute la durée du calcul (typiquement 2²¹ pas de temps) sont utilisées comme données d'entrée pour calculer la densité spectrale d'énergie des phonons (SED) dans l'espace (k , ω). La méthode est décrite en détail dans la référence [2].

La figure 4 présente les densités spectrales d'énergie des phonons calculées dans les cas de chaînes couplées harmonique et anharmonique et également de chaînes anharmoniques identiques couplées. Les phonons se positionnent sur les courbes de dispersion linéaires lorsque l'énergie vibratoire est peu élevée (cas non représenté sur la figure 4). A plus forte énergie, trois phénomènes sont observés :

- l'élargissement de la distribution des phonons sur des pics satellites autour des courbes de dispersion, phénomène déjà observé précédemment sur les chaînes monoatomiques anharmoniques isolées [2] ;
- l'absence de la résonance calculée par le modèle perturbatif. Plusieurs hypothèses peuvent expliquer ce résultat : la durée de vie finie des phonons due aux interactions à trois phonons de nombres d'onde différents ou la résolution en fréquence insuffisante de la méthode SED ;
- l'apparition d'une branche supplémentaire dont le lien possible avec l'interaction résonante identifiée dans le modèle analytique reste à établir. On peut noter que cette branche n'apparaît pas dans le cas de chaînes anharmoniques identiques couplées.

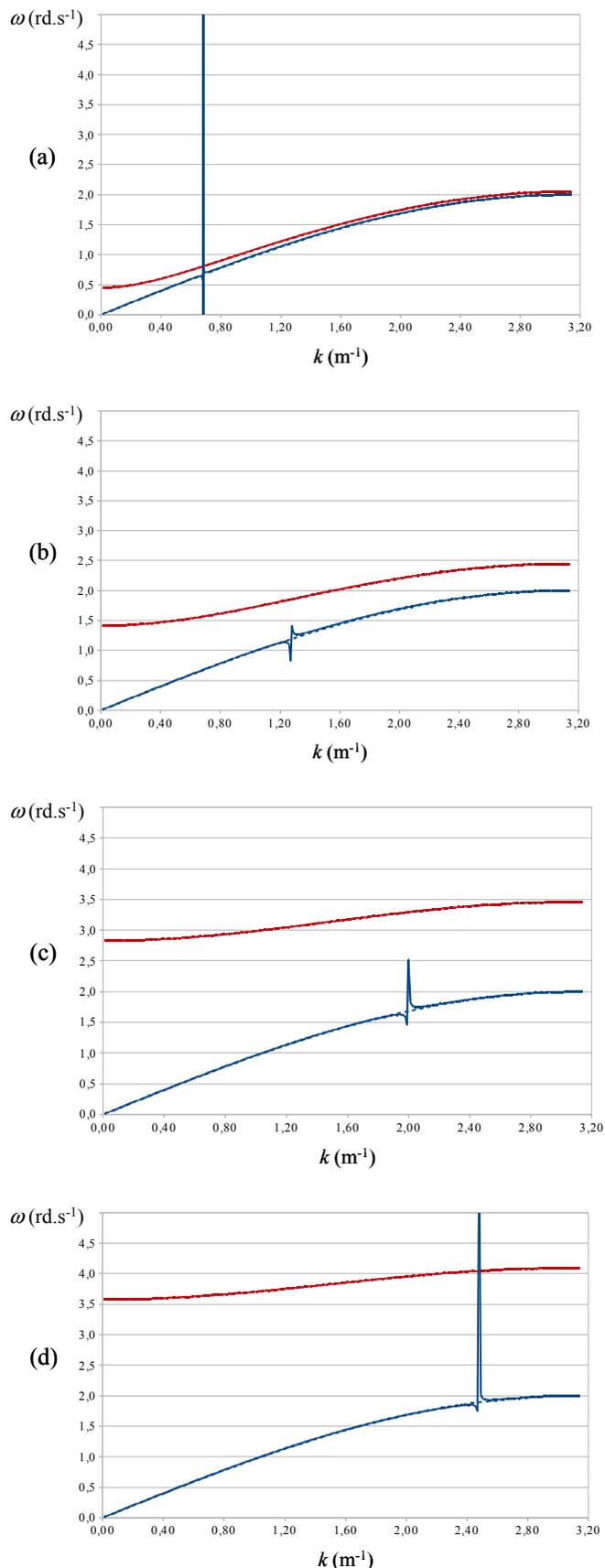


Figure 3: structures de bande des systèmes de chaînes harmonique et anharmonique couplées (traits pleins).

(a) $\beta' = 0,1 \text{ N.m}^{-1}$, (b) $\beta' = 1 \text{ N.m}^{-1}$,

(c) $\beta' = 4 \text{ N.m}^{-1}$, (d) $\beta' = 6,4 \text{ N.m}^{-1}$.

Les structures de bande des chaînes harmoniques couplées (traits pointillés) sont quasiment superposées

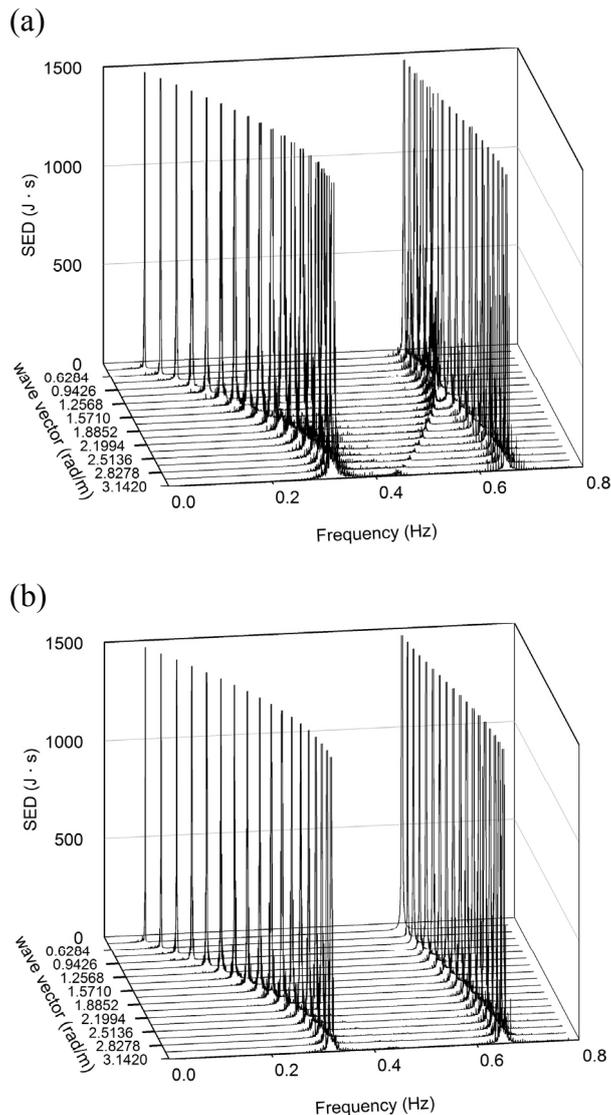


Figure 4: densité d'énergie spectrale des systèmes de chaînes couplées : (a) harmonique-anharmonique ; (b) anharmonique-anharmonique
 $(a = 1 \text{ m}, m = 1 \text{ kg}, \beta = 1 \text{ N.m}^{-1}, \beta' = 6,4 \text{ N.m}^{-1}, \varepsilon = 1.6 \text{ N.m}^{-2})$

Remerciements

Ce travail a été supporté par le CNRS LIA MATEO (MATERiaux et Optique).

Références

[1] R.K. Narisetti, M.J. Leamy et M.J. Ruzzene, *A perturbation approach for predicting wave propagation in one-dimensional nonlinear periodic structures*, ASME J. Vib. Acoust. 132, 031001, (2010).

[2] N. Swintek, P.A. Deymier, K. Muralidharan et R. Erdmann, *Nanoscale phononic crystals and structures*, dans *Acoustic metamaterials and phononic crystals*, Springer Series in Solid-State Sciences 173, Pierre A. Deymier Ed., Springer, Berlin (2013), 281-327.

- [3] K. Manktelow, M.J. Leamy et M.J. Ruzzene, *Multiple scale analysis of wave-wave interactions in a cubically nonlinear monoatomic chain*, Nonlinear Dyn. 63, 193, (2011).
- [4] O. Bou Matar J.O. Vasseur et P.A. Deymier, *Tunable phononic crystals and metamaterials*, Springer Series in Solid-State Sciences 173, Pierre A. Deymier Ed., Springer, Berlin (2013), 253-280.
- [5] L. Brillouin, *Wave propagation in periodic structures*, McGraw Hill, (1946).
- [6] N.M. Krylov, N.N. Bogoliubov, *Introduction to nonlinear mechanics*, traduit par S. Lefshetz, Princeton U.P, (1947).
- [7] I.C. Khoo, Y.K. Wang, *Multiple time scale analysis of an anharmonic crystal*, J. Math. Phys. 12, 222 (1976).