Université Mohammed V
Faculté des Sciences -Rabat
Département de Physique

Année universitaire 2015-2016
Sciences de la Matière Physique
Semestre 5

Module 30 - Physique des Matériaux I
Série 7 : Phonons et vibrations des réseaux
Correction du devoir 7

Exercice 3. Influence des n^{ièmes} voisins sur les vibrations dans un cristal linéaire (Devoir 7)

Dans certains matériaux, les forces de rappels exercées par les atomes autres que les proches voisins ne sont pas négligeables. On considère une rangée d'atomes identiques de masse M et équidistants de a. La constante de rappel entre l'atome en position n et l'atome en position $n+p$ (ou $n-p$) est notée C_p.

1. L'équation de mouvement de l'atome en position n:

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = \sum_{p=1}^{p=+\infty} C_p\left(u_{n-p} + u_{n+p} - 2u_n\right)$$

2. Les solutions sous forme d'ondes planes monochromatiques :

$$u_{n-p} = u_0 \exp[i(\omega t - k(n-p)a)]$$
$$u_{n+p} = u_0 \exp[i(\omega t - k(n+p)a)]$$
$$u_n = u_0 \exp[i(\omega t - kna)]$$

En remplaçant les trois expressions précédentes dans l'équation du mouvement, on obtient :

$$\omega^2 = \frac{4}{M}\sum_{p=1}^{p=+\infty} C_p \sin^2\left(\frac{pka}{2}\right)$$

3. Dans le cas des grandes longueurs d'onde, c'est-à-dire $\rightarrow 0$, au premier ordre on a :

$$\sin\left(\frac{pka}{2}\right) \approx \frac{pka}{2}$$

Ce qui donne :

$$\omega^2 = \frac{a^2}{M}\sum_{p=1}^{p=+\infty} p^2 C_p$$

4. L'expression de la vitesse du son v_s :

$$v_s = \lim_{k\to 0}\frac{d\omega}{dk} = \sqrt{\frac{a^2}{M}\sum_{p=1}^{p=+\infty} p^2 C_p}$$

5. Les constantes de rappels sont sous la forme d'une fonction puissance :

$$C_p = (-1)^{p+1}\frac{C_1}{p^3}$$

$$v_s = \lim_{k\to 0}\frac{d\omega}{dk} = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{M}\sum_{p=1}^{p=+\infty}\frac{(-1)^{p+1}}{p}}$$

On a montré au chapitre 5 (énergie de cohésion) que :

$$\sum_{p=1}^{p=+\infty}\frac{(-1)^{p+1}}{p} = \ln 2$$

$$v_s = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{M}\ln 2}$$

Si on se limitait à l'action des premiers voisins (cours chapitre 7 Diapositive 17) :

$$v_g = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{M}} cos \frac{ka}{2}$$

$$v_s' \lim_{k\to} v_g = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{M}}$$

Le rapport des deux vitesses s'écrit :

$$\frac{v_s}{v_s'} = \sqrt{\ln 2} = 0{,}83255546$$

Les actions de tous les voisins contribuent à la vitesse du son, vu la variation des coefficients C_p, qui sont alternativement positifs et négatifs fait que la vitesse finale est inférieure à la valeur obtenue en ne considérant que l'action des premiers proches voisins.

6. A la limite de la première zone de Brillouin, on a :

$$k = \frac{\pi}{a}$$

$$\omega^2 = \frac{4}{M} \sum_{p=1}^{p=+\infty} C_p \sin^2\left(\frac{p\pi}{2}\right)$$

7. On considère les deux cas :

- p pair :

$$\sin^2\left(\frac{p\pi}{2}\right) = 0$$

- p impair :

Il existe $j \in \mathbb{N}$, tel que $p\ = 2j + 1$. Donc :

$$\sin^2\left(\frac{p\pi}{2}\right) = \sin^2\left(\frac{(2j+1)\pi}{2}\right) = 1$$

On en déduit :

$$\omega^2 = \frac{4}{M} \sum_{j=0}^{j=+\infty} C_{2j+1}$$

la signification physique de ce résultat est à la limite de la première zone de Brillouin, la longueur d'onde $\lambda = 2a$, les atomes de rang impairs vibrent en opposition de phase et les forces de rappels agissent au maximum. Par contre, les voisins d'ordre pair vibrent en phase et les forces de rappels qu'ils exercent entre eux est nulles à tout instant.

8. Les valeurs du module de k pour lesquelles le voisin d'ordre p a une action maximale sont déterminés par les valeurs de p vérifiants :

$$\sin^2\left(\frac{p\pi}{2}\right) = 1$$

Ce qui correspond à l'opposition de phase entre les atomes les atomes d'ordre n et $n + p$. Ce qui donne les valeurs de k vérifiant :

$$0 < k = (2j + 1)\frac{\pi}{pa} \leq \frac{\pi}{a} \quad j \in \mathbb{N}$$

9. Les valeurs du module de k pour lesquelles le voisin d'ordre p a une action nulle sont obtenus pour :

$$\sin^2\left(\frac{p\pi}{2}\right) = 0$$

Soit :

$$0 < k = 2j\frac{\pi}{pa} \leq \frac{\pi}{a} \quad j \in \mathbb{N}$$

Les atomes de rang n et $n + p$ vibrent alors en phase et la constante de rappel C_p ne joue aucun rôle.

10. Le rapport entre la fréquence de la vibration obtenue à la limite de la première zone de Brillouin et celle qu'on obtiendrait si on se limitait à l'action des premiers proches voisins s'obtient en sommant :

$$\sum_{j=0}^{j=+\infty} \frac{1}{(2j+1)^3} \approx 1{,}051$$