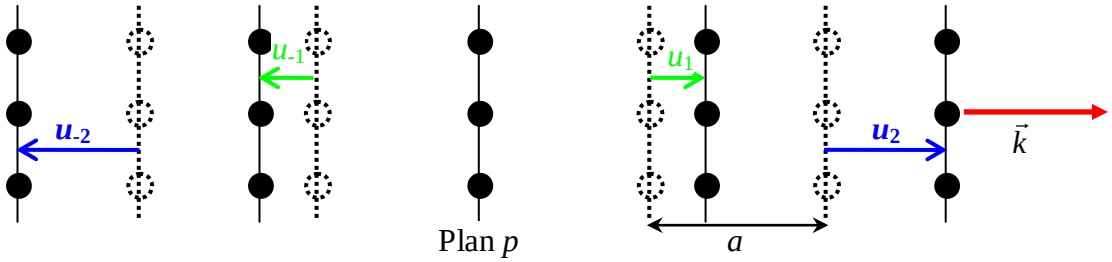
Travaux dirigés - Introduction à la Physique des Matériaux
Correction de la série 5 : Phonons et vibrations des réseaux

Exercice 1 : Vibration dans la direction [100] du polonium Po

1. Si une vibration se propage dans ce cristal suivant une direction donnée [100] tous les plans perpendiculaires à cette direction se déplacent en phase et on peut décrire le déplacement par une seule coordonnée u_p le déplacement d'un plan p par rapport à la position l'équilibre.



2. Soit C_s la constante de rappel entre le plan p et le plan $p+s$, p est soumis à l'action de tous les plans s, $s \neq p$:

$$F_p = \sum_{s \neq p} C_s \left(u_{p+s} - u_p \right)$$

u_{p+s} déplacement du plan $p+s$ par rapport à la position d'équilibre et u_p déplacement du plan p par rapport à la position d'équilibre.

3. Soit U(R) l'énergie potentielle d'interaction, U(R) est continue et indéfiniment dérivable. Pour un petit déplacement δr autour de la position d'équilibre $R = R_0$ on peut remplacer U(R) par l'expression de son développement limité au voisinage de R_0 :

$$U(R) = U(R_0) + \delta R . \left(\frac{dU}{dR} \right)_{r=r_0} + \frac{1}{2} (\delta R)^2 . \left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{r=r_0} + \ldots$$

U(R) est une fonction paire donc les termes d'ordres impairs sont nuls, il vient :

$$U(R) = U(R_0) + \frac{1}{2} (\delta R)^2 . \left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{R=R_0} + \ldots$$

La force F de rappel dérive de l'énergie potentielle on a alors :

$$F = -\frac{dU}{d(\delta R)}$$

$$F = -\delta R . \left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{R=R_0}$$

En utilisant la définition de la force de rappel :

$$F = -C_s . \delta R$$

L'identification des deux expressions donne :

$$C_s = \left(\frac{d^2U}{dR^2} \right)_{R=R_0}$$

4. Soit M la masse d'un atome de polonium dans le plan p, la deuxième loi de Newton donne :

$$M \frac{d^2 u_p}{dt^2} = \sum_{s \neq p} C_s \left(u_{p+s} - u_p \right) \quad (1)$$

5. On cherche des solutions de l'équation précédente sous forme d'onde plane monochromatique :

$$u_p = u_0 \, exp[ipkr - i\omega t]$$

$$u_{p+s} = u_0 \, exp[i(p+s)kr - i\omega t]$$

r la distance entre deux plans consécutifs dans la direction de [100], dans ce cas r est égale au paramètre du réseau.

On calcule :

$$u_{p+s} - u_p = \left[u_0\, exp(-i\omega t)\right].\left[exp\left(i(p+s)ka\right) - exp(ipka)\right]$$

$$M\frac{d^2u_p}{dt^2} = -\omega^2 M\left[u_0\, exp(-i\omega t)\right].\left[exp(ikpa)\right]$$

La relation (1) devient :

$$-\omega^2 M\left[u_0\, exp(-i\omega t)\right].\left[exp(ikpa)\right] = \left[u_0\, exp(-i\omega t)\right].\left[exp(ipka)\right]\sum_{s\neq p} C_s\left[exp(iska) - 1\right]\ddot{}$$

On simplifie le terme : $\left[u_0\, exp(-i\omega t)\right].\left[exp(ikpa)\right]$ et on obtient :

$$\omega^2 M = \sum_{s\neq p} C_s\left(1 - exp(iksa)\right)$$

$$\omega^2 M = \sum_{s=-\infty}^{s=-1} C_{-s}\left(1 - exp(-iksa)\right) + \sum_{s=1}^{s=+\infty} C_s\left(1 - exp(iksa)\right)$$

Or $C_{-s} = C_s$. D'où :

$$\omega^2 M = \sum_{s=1}^{s=+\infty} C_s\left[\left(1 - exp(-iska)\right) + \left(1 - exp(iska)\right)\right]$$

$$\omega^2 M = \sum_{s=1}^{s=+\infty} C_s\left[2 - \left(exp(-iska) + exp(iska)\right)\right]$$

$$\omega^2 M = \sum_{s=1}^{s=+\infty} C_s\left[2 - 2cos(ska)\right]$$

$$\omega^2 = \frac{2}{M}\sum_{s=1}^{s=+\infty} C_s\left[1 - cos(ska)\right]$$

6. Si on se limite au premiers proches voisins ($s = 1$) on obtient :

$$\omega^2 = \frac{2C_1}{M}\left(1 - cos(ka)\right)$$

Or pour tout nombre réel α

$$1 - cos\alpha = 2.sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

$$\omega^2 = \frac{4C_1}{M}sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{4C_1}{M}}\left|sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$$

7. Si on calcule

$$\frac{u_{p+1}}{u_p} = exp(ika)$$

Le domaine des valeur des vecteurs d'onde ayant une signification physique est tel que :

$$-\pi \le ka \le \pi$$

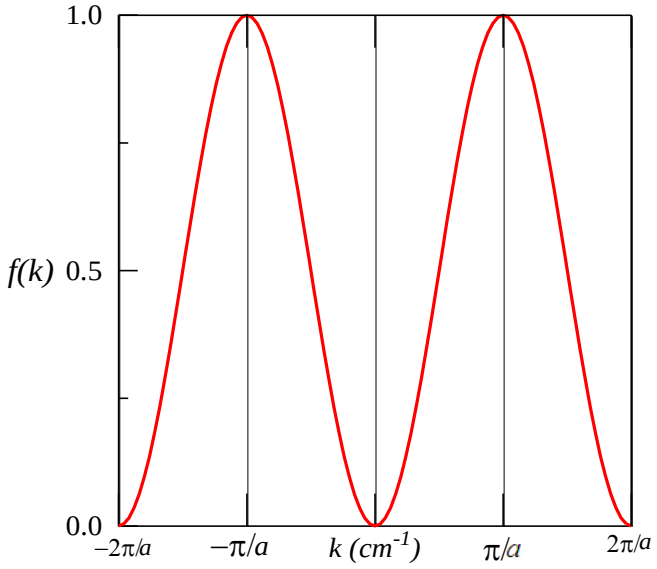
$$-\frac{\pi}{a} \le k \le \frac{\pi}{a}$$

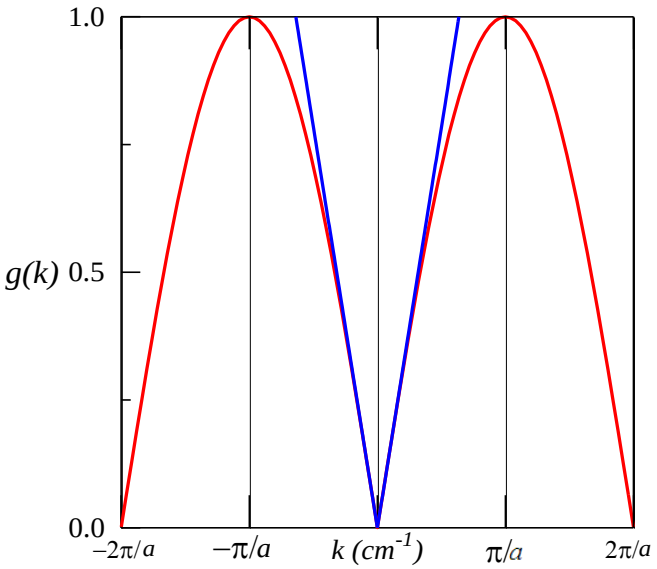
C'est-à-dire que les valeurs de *k* appartiennent à la première zone de Brillouin. La valeur maximale est de l'ordre de 10^8 cm^{-1}. On considère les fonctions :

$$\frac{\omega^2}{\frac{4C_1}{M}} = f(k) = sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$\frac{\omega}{\sqrt{\frac{4C_1}{M}}} = g(k) = \left|\sin\left(\frac{ka}{2}\right)\right|$$

Les deux fonctions sont périodiques et de période égale à la longueur de la première zone de Brillouin.





On remarque que pour $ka << 1$ c'est-à-dire $\lambda >> a$ qui correspond à l'approximation continue, la pulsation ω est proportionnelle à k.

8. La vitesse d'un paquet d'onde est la vitesse de groupe, définie par :

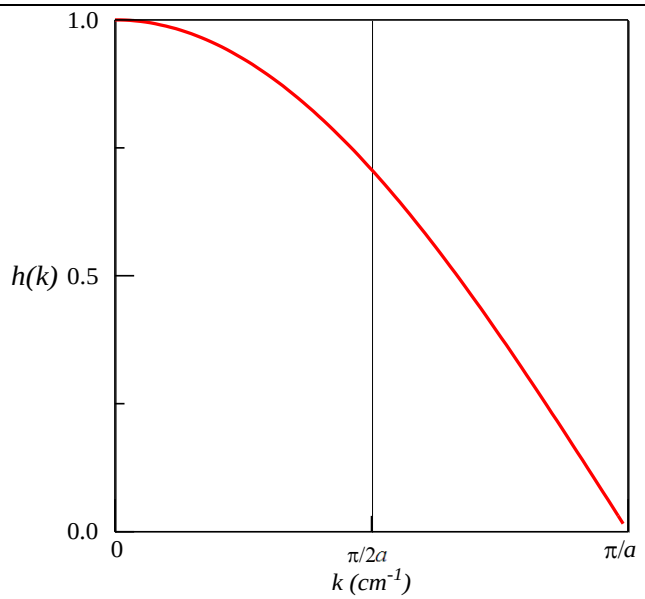
$$\vec{v}_g = \overrightarrow{grad}\omega(k)$$

Relation valable à deux ou trois dimensions. Cette vitesse est la vitesse de transmission de l'énergie dans le milieu. A partir de l'expression de ω on peut calculer v_g :

$$v_g = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{M}}\cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$

La figure suivante représente les variations de la fonction :

$$\frac{v_g}{\sqrt{\frac{C_1 a^2}{M}}} = h(k) = \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$



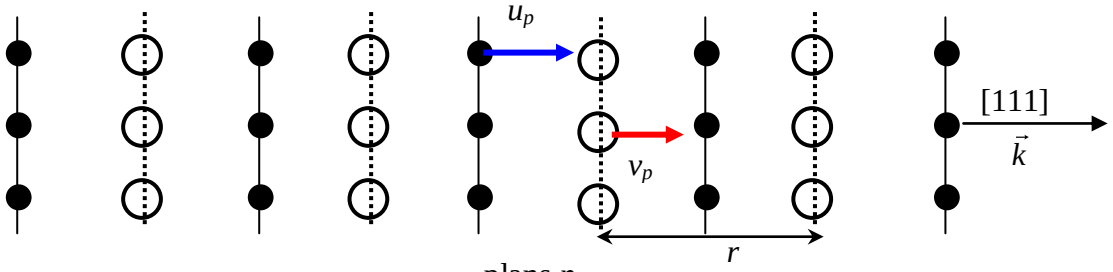
La vitesse de groupe est nulle à la limite de la première zone de Brillouin, ce qui dénote la naissance d'une onde stationnaire dans le cristal.

Exercice 2 : Bande interdite des phonons dans le chlorure de potassium KCl

1. Les résultats obtenus pour le chlorure de potassium sont :
a. Réseau de Bravais C.F.C.
b. Le paramètre de la maille a = 6,30 10^{-10} m.
c. Le plan d'indices de Miller (111) contient un seul type d'atome.
d. La distance séparant deux plans consécutifs contenant le même type d'atome est :

$$r = \frac{a}{\sqrt{3}} = 3{,}64\ 10^{-10}\ \text{m}$$

2. Si une vibration se propage dans ce cristal suivant la direction [111] tous les plans perpendiculaires à cette direction se déplacent en phase et on peut décrire le déplacement par une seule coordonnée u_p d'un type de plan p par rapport à la position l'équilibre et v_p le déplacement de l'autre type de plan p par rapport à la position l'équilibre.



On suppose que chaque plan n'interagit qu'avec ses deux plans adjacents, en appliquant la deuxième loi de newton à chacun des plans p on obtient :

$$\begin{cases} m_K \dfrac{d^2u_p}{dt^2} = C\left(v_p + v_{p-1} - 2u_p\right) \\ m_{Cl} \dfrac{d^2v_p}{dt^2} = C\left(u_p + u_{p-1} - 2v_p\right) \end{cases}$$

3. On considère des solutions sous forme d'ondes planes monochromatique :

$$u_p = u_0\, exp\, i(\omega t - pkr)$$
$$v_p = v_0\, exp\, i(\omega t - pkr)$$

On calcule les dérivées secondes et on peut simplifier par le terme $exp(i\omega t).exp(ipkr)$, on obtient alors :

$$\begin{cases} -m_K\omega^2 u_0 = Cv_0\left(1+exp(-ikr)\right)-2Cu_0 \\ -m_{Cl}\omega^2 v_0 = Cu_0\left(1+exp(ikr)\right)-2Cv_0 \end{cases}$$

Soit :

$$\begin{cases} \left(m_K\omega^2-2C\right)u_0 + C\left(1+exp(-ikr)\right)v_0 = 0 \\ C\left(1+exp(ikr)\right)u_0 + \left(m_{Cl}\omega^2-2C\right)v_0 = 0 \end{cases}$$

C'est un système de deux équations à deux inconnues u_0 et v_0, pour qu'il admette des solutions non nulles il faut que le déterminant du système soit nul :

$$\begin{vmatrix} \left(m_K\omega^2-2C\right) & C\left(1+exp(-ikr)\right) \\ C\left(1+exp(ikr)\right) & \left(m_{Cl}\omega^2-2C\right) \end{vmatrix} = 0$$

Soit :

$$m_K m_{Cl}\omega^4 - 2C\left(m_K+m_{Cl}\right)\omega^2 + 2C^2\left(1-cos\,kr\right) = 0$$

4. On effectue les changements de variable en fonction de μ et M définies au début de la question **2.** et on remplace le cosinus par le sinus. L'équation précédente devient :

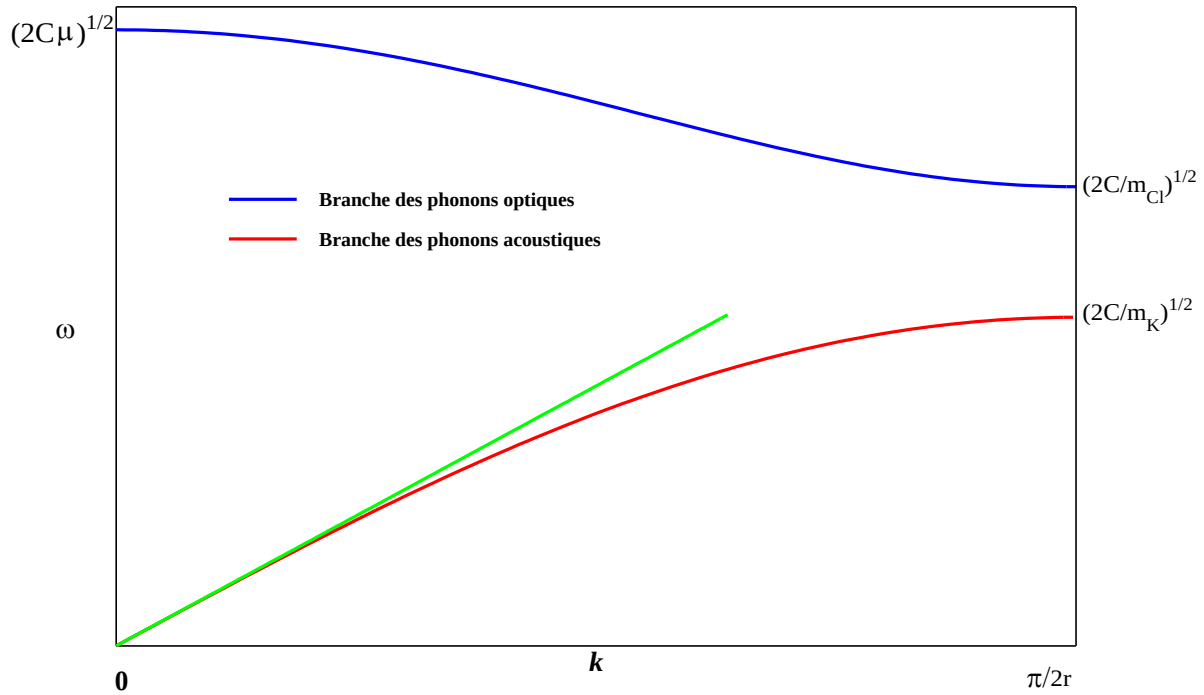
$$\mu^{-1}M\omega^4 - 2CM\omega^2 + 4C^2\,sin^2\left(\frac{kr}{2}\right) = 0$$

C'est une équation bicarré dont les solutions sont :

$$\omega_1^2 = C\mu + C\left[\mu^2 - 4M\mu^{-1}.sin^2\left(\frac{kr}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\omega_2^2 = C\mu - C\left[\mu^2 - 4M\mu^{-1}.sin^2\left(\frac{kr}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$

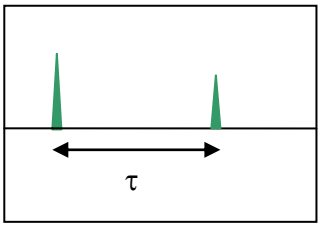
5. Les représentations graphiques pour ω sont données sur la figure suivante :



6. D'après la figure précédente on voit qu'il existe un intervalle de fréquences à la limite de la première zone de Brillouin pour lequel la vibration ne peut pas se propager. La largeur de cette bande de fréquences est :

$$\Delta\omega = \omega_u - \omega_d = \sqrt{\frac{2C}{m_{Cl}}} - \sqrt{\frac{2C}{m_K}}$$

7. Dans le montage une impulsion ultrasonore est engendrée par le transducteur piézoélectrique, elle se réfléchit successivement sur les faces elle est ensuite détectée.



Connaissant l'épaisseur *e* du cristal et le décalage entre deux échos successifs on obtient :

$$v_s = \frac{2e}{\tau} = \frac{2\times 1{,}00\ 10^{-2}}{2{,}40\ 10^{-6}} = 8{,}33\ 10^{3}\ \text{m.s}^{-1}$$

Remarque : Pour la distance parcourue par l'impulsion ultrasonore il faut compter l'aller et le retour !

Pour déterminer $\Delta\omega$, il faut déterminer la constante de rappel *C*. La vitesse du son le long de la rangée [111] est égale au coefficient directeur de la tangente à l'origine (courbe en vert). On obtient :

$$v_s = r\sqrt{\frac{2C}{M}}$$

$$C = \frac{v_s^2 M}{2r^2}$$

On effectue une analyse dimensionnelle de C, on a alors :

$$[C] = M.T^{-2}$$

Donc *C* s'exprime en $kg.s^{-2}$ homogène au $N.m^{-1}$.

$$C = \frac{\left(8{,}33\ 10^{3}\right)^2 \times 74{,}6\ 10^{-3}}{2\times 6{,}02\ 10^{23}\times\left(3{,}64\ 10^{-10}\right)^2} = 32{,}5\ \text{N.m}^{-1}$$

On peut ainsi calculer :

$$\omega_u = \sqrt{\frac{2C}{m_{Cl}}} = \sqrt{\frac{2\times 32{,}5\times 6{,}02\ 10^{23}}{35{,}5\ 10^{-3}}} = 3{,}32\ 10^{13}\ \text{rad.s}^{-1}$$

$$\omega_d = \sqrt{\frac{2C}{m_K}} = \sqrt{\frac{2\times 32{,}5\times 6{,}02\ 10^{23}}{39{,}1\ 10^{-3}}} = 3{,}16\ 10^{13}\ \text{rad.s}^{-1}$$

$$\Delta\omega = 1{,}6\ 10^{12}\ \text{rad.s}^{-1}$$

Soit $\mathscr{E}$ la largeur de cette bande interdite :

$$\mathscr{E} = \frac{h\times\Delta\omega}{2\pi}$$

$$\mathscr{E} = 1{,}69\ 10^{-22}\ \text{J}$$

$$\mathscr{E} = 1{,}06\ 10^{-3}\ \text{eV}$$

$$\mathscr{E} = 1{,}06\ \text{meV}$$