

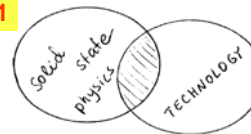
Introduction à la physique des matériaux SMP 5

Par M. ABD-LEFDIL

Quelques compléments du cours polycopié

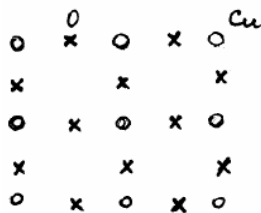
TD- Extraits de l'Université de
Massachusetts- USA

Chapitre 1



Copper Oxide Layers

Couches d'oxyde de cuivre



It is believed that these layers are responsible for high temperatures of the superconducting transition in many materials. The arrangement of atoms in the layer is shown to the left.

(a) Draw the Bravais lattice and primitive vectors. What is the unit cell and basis?

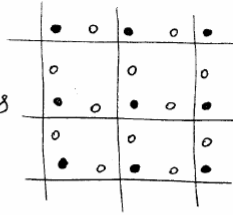
On pense que ces couches sont responsables de la haute température des transitions dans plusieurs matériaux supraconducteurs. L'arrangement des atomes est présenté ci-dessous:

(a) Dessiner le réseau de Bravais et les vecteurs primitifs. Quelles sont la maille élémentaire et le motif du réseau?

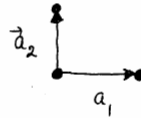
Solution:

① Copper Oxide layers.

Bravais lattice
(one of the infinite possibilities
is shown by lines).



primitive vectors



unit cell



basis



2. Packing (Assemblage ou remplissage)

If atoms are considered as hard spheres and are closely packed in the solid (i.e. they just touch each other) show that:

(a) the bcc lattice has a packing fraction of 0.68

(b) the fcc lattice has a packing fraction of 0.74

Packing fraction = volume occupied by atomic spheres / volume of the unit cell. Be explicit in how you did the calculation by drawing pictures.

Voir la solution de l'exercice 1 du TD1

Analyze the spectral data.

In a diffraction measurement using incoming radiation with wavelength $\lambda = 1.5417 \text{ \AA}$, the following set of Bragg angles (remember (!) that scattering angle is twice the Bragg angle) was observed:

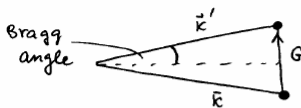
$19.48^\circ, 22.64^\circ, 33.00^\circ, 39.68^\circ, 41.83^\circ, 50.35^\circ, 57.05^\circ, 59.42^\circ$

Aluminum has atomic weight 27 g and density 2.7 g/cm^{-3} . Determine the type of lattice (assuming it is of the cubic type: sc, bcc or fcc) and calculate the Avogadro number using this information.

Dans une mesure de diffraction utilisant une radiation incidente de longueur d'onde $\lambda=1.5417 \text{ \AA}$, les angles de Bragg suivants sont observés: $19.48, 22.64, 33.00, 39.68, 41.83, 50.35, 57.05, 59.42^\circ$. L'aluminium a un poids moléculaire de 27 g et une densité de 2.7 g/cm^3 . Déterminer le type de réseau (en supposant qu'il est cubique: CS, CC ou CFC) et Calculer le nombre d'Avogadro en utilisant cette information.

Solution:

Determine the structure:



$$\sin \theta_B = \frac{G}{2\kappa} = \frac{G\lambda}{4\pi}$$

$$G = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta - \text{so we have a set of } G \text{ vectors.}$$

For the cubic lattice all primitive vectors have the same length, and are given on pp. 40-41.

(sc) $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0)$; $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0)$; $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1)$

(bcc) $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 1)$; $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 1)$; $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 0)$

(fcc) $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1)$; $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(1, -1, 1)$; $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, -1)$

ATTENTION: Ici les vecteurs $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ et $\vec{b}_3$ correspondent à nos vecteurs du réseau réciproque, soit $\vec{a}^*, \vec{b}^*$ et $\vec{c}^*$.

Pour comparer, voir l'exercice 2-c du TD1 pour CS et les pages 14 et 15 du Chapitre 1 pour CC et CFC.

In each case $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\alpha, \beta, \gamma)$
 but only (sc) lattice may account for all possible (α, β, γ) .

with $|G| = \{1, \sqrt{2}, \sqrt{3}, \sqrt{4}, \sqrt{5}, \sqrt{6}, \sqrt{8}, \sqrt{9}, \sqrt{10}, \sqrt{11}, \sqrt{12}, \dots\}$

(bcc) $|G| = \{\sqrt{2}, \sqrt{4}, \sqrt{6}, \sqrt{10}, \sqrt{12}, \sqrt{13}, \sqrt{14}, \dots\}$

(fcc) $|G| = \{\sqrt{3}, \sqrt{4}, \sqrt{8}, \sqrt{11}, \dots\}$

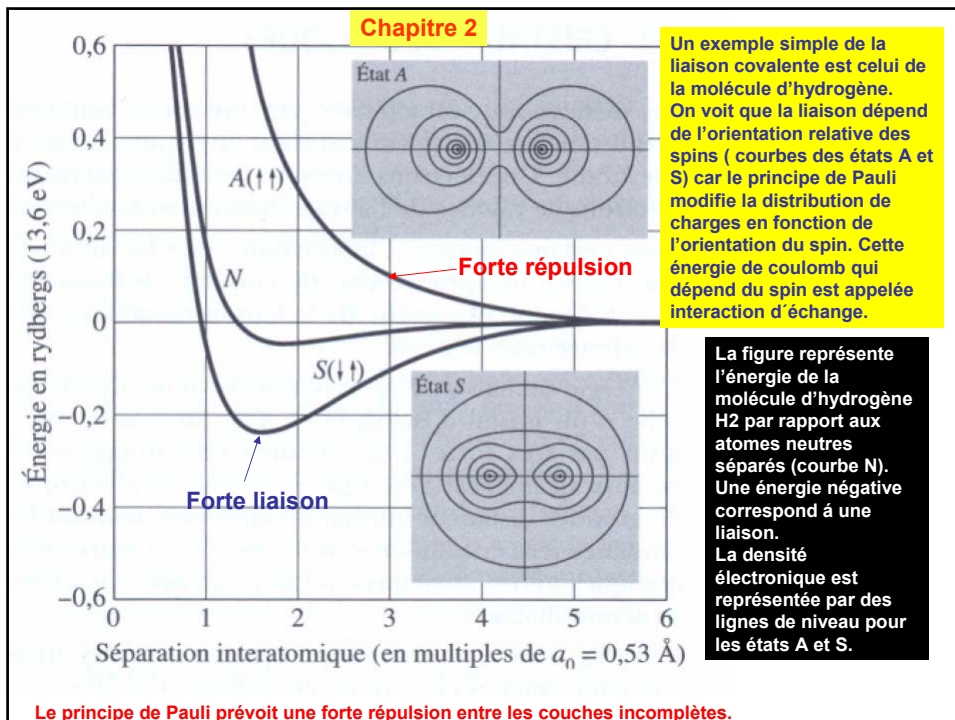
ratios of $|G_i|^2$ must match ratios of $\sin^2 \theta_i$

We have $\frac{\sin^2 \theta_2}{\sin^2 \theta_1} = 1.332 \approx \frac{4}{3} \Rightarrow$ bcc is excluded.
 sc is excluded.

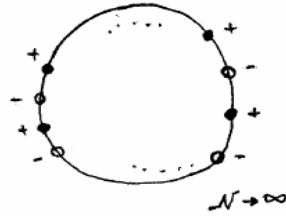
we do not need other angles at this point, but if we did not know that the smallest G was observed, then other angles will help to find the match.

E.g. $\frac{\sin^2 \theta_3}{\sin^2 \theta_1} \approx 8/3 \rightarrow$ it has to be #5 after the first angle to be the SC peak.

The number of ratios at hand is large, so we may always decipher the structure.



Exercice 1 de la série du TD 2



Consider a long line with periodic conditions (a circle) with $2N$ ions of alternating charge $\pm q$ and repulsive potential energy A/R^n acting *only* between nearest neighbor ions.

(a) Show that at the equilibrium separation

$$U(a) = -\frac{2Nq^2(1 - 1/n) \ln 2}{a}$$

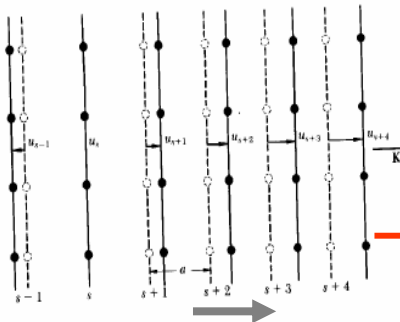
(b) Let the crystal be compressed so that $a \rightarrow a(1 - \delta)$. Show that work done in compressing a unit length of the crystal has the leading term $C\delta^2/2$ with

$$C = \frac{(n-1)q^2 \ln 2}{a^2}$$

Note: You should not expect to obtain this result from the expression for $U(a)$ (which is derived assuming that external pressure is zero), but must use the complete expression for $U(r)$.

Chapitre 3

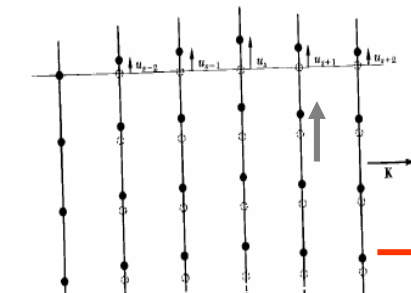
Onde longitudinale



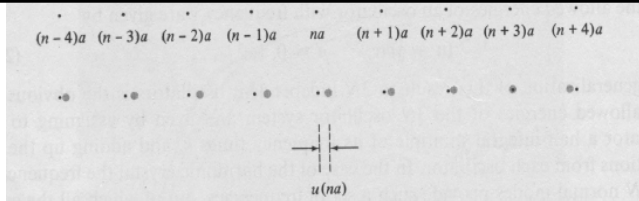
Sens de propagation de l'onde

Déplacement des atomes

Onde transversale



Sens de propagation de l'onde

Remarques:

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = -C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s)$$

s=n

$$\Leftrightarrow M \Omega^2 u_s = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s)$$

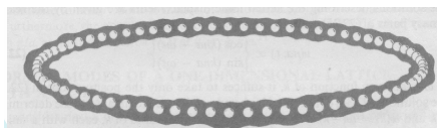
$$U^{\text{harmonique}} = \frac{1}{2} C \sum_s (u_s - u_{s+1})^2$$

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = - \frac{\partial U^{\text{harmonique}}}{\partial u_s} = -C(2u_s - u_{s+1} - u_{s-1})$$

Conditions cycliques appelées aussi conditions de Born-Von Karman:

Si la chaîne comprends N atomes avec N très grand, on peut joindre les deux Extrémités de la chaîne comme le montre la figure ci-dessous.

On alors: $u[(N+1)a] = u(a)$ et $u(0) = u(Na)$: Ce sont les conditions B.V.K.



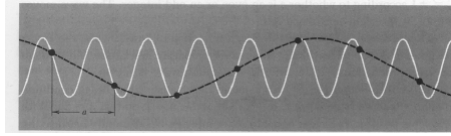
Si la solution est de la forme: $\exp(ikna - \Omega t)$, on obtient alors:

$\exp(ikNa) = 1$, d'où: $KNa = 2\pi n$ avec n un entier

Soit:

$$K = \frac{2\pi n}{Na}$$

On voit qu'il y'a N valeurs distinctes de K



Aux limites de la 1^{ère} zone de Brillouin, les solutions $u_n = u_0 \exp(ikx) \exp(-i\Omega t)$ avec $x = na$, sont égales à $u_0 (-1)^n$.

On a alors une onde stationnaire. Deux atomes voisins vibrent en opposition de phase Car $u_{n+1} = +1$ ou -1 selon que n est entier pair ou impair: c'est une situation équivalente à

La réflexion de Bragg des rayons X.

Remarques:

- i- Si la maille primitive comporte p atomes, la relation de dispersion des phonons aura 3 branches acoustiques et $3p-3$ branches optiques.
- ii- la diffusion inélastique des neutrons avec émission ou absorption de phonons est la méthode idéale de détermination expérimentale du spectre des phonons $\omega(k)$. Un neutron « voit » le réseau cristallin principalement par interaction avec les noyaux des atomes. La cinématique de la diffusion d'un faisceau de neutrons par un réseau cristallin est décrite par la relation générale de conservation du vecteur d'onde ci-dessous, ainsi que par la relation de conservation de l'énergie:

$$\vec{k} + \vec{G} = \vec{k}' \pm \vec{k}''$$

$$\vec{k}''$$

: vecteur d'onde du phonon créé (+) ou absorbé (-).

$$\vec{G}$$

: vecteur du réseau réciproque, pour que $\vec{k}''$ appartienne à la 1^{ère} Z.B.

$$\vec{k} \text{ et } \vec{k}'$$

vecteurs d'ondes du neutron incident et diffusé