

Introduction à la physique des matériaux
SMP5-Série n°3

D) Considérons un réseau monoatomique dont les plans d'atomes identiques (de masse m) se déplacent en bloc. Nous pouvons alors décrire le déplacement des plans n par une seule coordonnée q_n par rapport à la position d'équilibre.

Conformément à la loi de Hooke, la force exercée sur le plan n par le déplacement d'un plan $(n+p)$ est proportionnelle à $q_{n+p} - q_n$. La résultante des forces sur le plan n est alors donnée par :

$$F_n = \sum_p C_p (q_{n+p} - q_n)$$

Où C_p est la constante de rappel entre les plans séparés par pxa (a paramètre de la maille).

1- Ecrire l'équation du mouvement du plan n .

2- Dans le cas où le déplacement q_{n+p} est une onde de propagation de la forme:

$q_{n+p} = q_0 \exp[ik(p+n)a - \Omega t]$, montrer qu'on :

$$\Omega^2 = \frac{-1}{m} \sum_{p=-\infty}^{+\infty} C_p (e^{ipka} - 1)$$

3- On se propose de déterminer C_p à partir de la relation de dispersion expérimentale (l'expression de Ω^2 est donc connue).

Montrer qu'elle est proportionnelle à la Transformée de Fourier en cosinus de Ω^2 .

4- Dans le où les interactions sont limitées aux premiers voisins, que devient l'expression de Ω^2 de 2-.

5- Notion de phonon localisé : Dans cette partie, on suppose que l'atome situé au milieu de la chaîne d'atomes est une impureté de masse $m' < m$. m' est appelé un centre -U.

a) Ecrire les expressions des équations de mouvement de m' , ainsi que celle de m (situé sur un site quelconque du réseau). On supposera aussi que la constante de rappel est la même.

b) Comme l'atome d'impureté a une masse $m' < m$, il aura une pulsation Ω' supérieure à Ω de ses voisins de masse m . Ainsi, ces derniers seront entraînés dans le mouvement de m' . Pour cette raison, on représentera les déplacements q_n par une onde amortie du genre :

$$q_n = q_0 \exp(-\alpha |x|) \cdot \exp(i(kx - \Omega t))$$

Quelle est la pulsation Ω' compatible avec les équations du mouvement de 5-a) pour k égale à la limite supérieure de la première zone de Brillouin.

En déduire que Ω' / Ω sera d'autant plus grand que la masse m' sera plus petite que m .

Conclure.

II) Soit un cristal de NaCl avec des atomes Na de masse m_1 et des atomes Cl de masse m_2 placés sur des familles de plans consécutifs.

Soit a le paramètre de la maille dans la direction perpendiculaire aux plans considérés.

Dans cet exercice, on s'intéressera seulement aux ondes se propageant dans une direction de symétrie telle qu'un plan d'atomes ne contienne qu'un seul type d'ions (Na^+ ou Cl^-).

1- Donner un exemple de direction $[uvw]$ dans NaCl qui répond à cette condition. Schématiser alors le réseau dans cette direction.

2- Dans le cas où les constantes de rappel sont identiques entre les premiers voisins, écrire les équations du mouvement de m_1 et m_2 .

3- Déterminer la relation de dispersion dans le cas où les solutions sont des ondes de propagation de type :

$$q_n = q_0 \expi[kna - \Omega t] \quad \text{et} \quad r_n = r_0 \expi[kna - \Omega t].$$

4- Etudier les cas limites $ka \ll 1$ et $k = \pi/a$.

5- Calculer q_0/r_0 pour $k=0$. Interpréter les résultats obtenus.

6- Dans cette partie, on applique un champ électrique égal à $E \exp(-i\Omega t)$ parallèle aux déplacements.

a) Ecrire alors les nouvelles équations du mouvement.

b) Dans le cas de très grandes longueurs d'ondes comme les radiations infrarouges ($k \rightarrow 0$), les déplacements sont indépendants de l'indice n .

Que deviennent alors les équations du mouvement dans l'hypothèse où ne tient compte que des interactions entre les premiers voisins.

En déduire que l'application d'un champ électrique provoque un déplacement en sens opposés des ions $-$ et $+$, tout en présentant une résonance à une pulsation qu'on déterminera.

c) Sachant que la polarisation P est par définition le moment dipolaire par unité de volume,

$$\frac{Ne^2 E}{\mu}$$

montrer qu'elle est égale dans notre cas à : $P = \frac{\mu}{2C - \Omega^2}$ où μ est la masse réduite.

III) Dans cet exercice, on s'intéressera aux vibrations transversales d'un réseau carré plan de paramètre de maille a et formé d'atomes identiques.

1- Etablir l'équation du mouvement de déplacement q_{pn} de l'atome appartenant à la $p^{\text{ième}}$ colonne et à la $n^{\text{ième}}$ ligne. On ne tiendra compte que des interactions entre premiers voisins;

2- Pour une solution de la forme $q = A \expi(\Omega t - k_x x - k_y y)$, déduire la relation de dispersion des phonons transversaux.

3- Représenter les courbes correspondantes dans la direction $[10]$ et $[11]$
