Physique des Matériaux II

Filière : SMP - Semestre : VI

Travaux Dirigés
Série n°5
2024/2025

Problème n°1

Soit un réseau linéaire d'atomes identiques de masse ***« M »*** équidistants de ***« a »***. On remplace l'atome situé au milieu de la chaine atomique par un atome d'impureté de masse ***« M' »*** (M'<M).

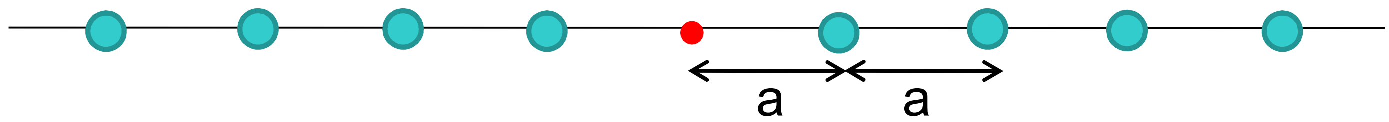
1- Ecrire les équations du déplacement relatives aux déplacements de l'atome d'impureté et d'un atome pur de la chaîne; on admet que la constante de rappel ***« γ »*** entre proches voisins est la même quelque soit l'atome considéré.

2- L'atome d'impureté, plus léger, entraîne dans son mouvement les atomes voisins. On cherchera une solution en forme d'onde amortie :

$$u_n = u_0 e^{-\alpha|n|a} e^{ikna} e^{i\omega' t}$$

Quelle sera la valeur de la fréquence maximale de vibration

Equations du déplacement



Atome pur n de la chaîne

$$M.\frac{d^2u_n}{dt^2} = \gamma(u_{n-1} + u_{n+1}) - 2\gamma u_n$$

$$\omega_{max} = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}}$$

Atome d’impureté

$$M'.\frac{d^2u_0}{dt^2} = \gamma(u_{-1} + u_1 - 2u_0)$$

On cherche toujours des solutions de la forme : $u_n = u_0 e^{-\alpha|n|a} e^{ikna} e^{i\omega' t}$

Le terme $e^{-\alpha|n|a}$ traduit l’amortissement de l’onde

Atome pur n de la chaîne

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = \gamma u_0 e^{i\omega' t}\left[e^{-\alpha|n-1|a}e^{ik(n-1)a} + e^{-\alpha|n+1|a}e^{ik(n+1)a} - 2e^{-\alpha|n|a}e^{ikna}\right]$$

$$M\frac{d^2u_n}{dt^2} = -M\omega'^2 u_n$$

$$-M\omega'^2 U_0 e^{-n\alpha a}e^{inka} = \gamma U_0 e^{-n\alpha a}e^{inka}\left[e^{\alpha a}e^{-ika} + e^{-\alpha a}e^{ika} - 2\right]$$

$$-M\omega'^2 = \gamma\left[e^{\alpha a}e^{-ika} + e^{-\alpha a}e^{ika} - 2\right] \qquad \textbf{(1)}$$

Atome d'impureté

$$-M'\omega'^2 = \gamma\left[e^{-\alpha a}e^{-ika} + e^{-\alpha a}e^{ika} - 2\right] \qquad \textbf{(2)}$$

Aux bords de la zone de Brillouin

$$\begin{cases} \omega'^2 = \frac{\gamma}{M}[2 + e^{-\alpha a} + e^{\alpha a}] \\ \omega'^2 = \frac{2\gamma}{M'}[1 + e^{-\alpha a}] \end{cases}$$

On pose : $x = e^{\alpha a}$

$$\frac{x^2}{M} - 2\left(\frac{1}{M'} - \frac{1}{M}\right)x - \left(\frac{2}{M'} - \frac{1}{M}\right) = 0$$

Solutions de l'équation

$$x_1 = -1$$

Impossible

$$x_2 = \frac{2M - M'}{M'}$$

$$\omega'^2 = \frac{2\gamma}{M'}\left(1 + \frac{M'}{2M - M'}\right)$$

$$\omega'^2 = \frac{2\gamma}{M'}\frac{2M}{2M - M'}$$

$$\omega'^2 = 4\gamma\frac{M}{M'}\frac{1}{2M - M'}$$

$$\omega_{max} = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}}$$

$$\omega'^2 = 4\gamma \frac{M}{M'} \frac{1}{2M - M'}$$

Si M=M' $\leftarrow$ $$\left(\frac{\omega'}{\omega}\right)^2 = \frac{M^2}{M'} \frac{1}{2M - M'}$$ $\rightarrow$ $\omega' > \omega$

$$\omega' = \omega$$

Plus la masse de l'impureté est faible plus la pulsation est grande

Le rapport ω'/ω est d'autant plus grand que la masse M' est faible

Mathématiquement

$$\underbrace{e^{\alpha a} = \frac{2M - M'}{M'} \longleftarrow \text{positifs} \longrightarrow \omega'^2 = 4\gamma \frac{M}{M'} \frac{1}{2M - M'}}_{2M - M' > 0}$$

Il faut que $M' < 2M$

Physiquement

Pour qu'il y ait amortissement il faut que : $\alpha > 0$ soit $e^{\alpha a} > 1$

$$2M - M' > M' \qquad M' < M$$

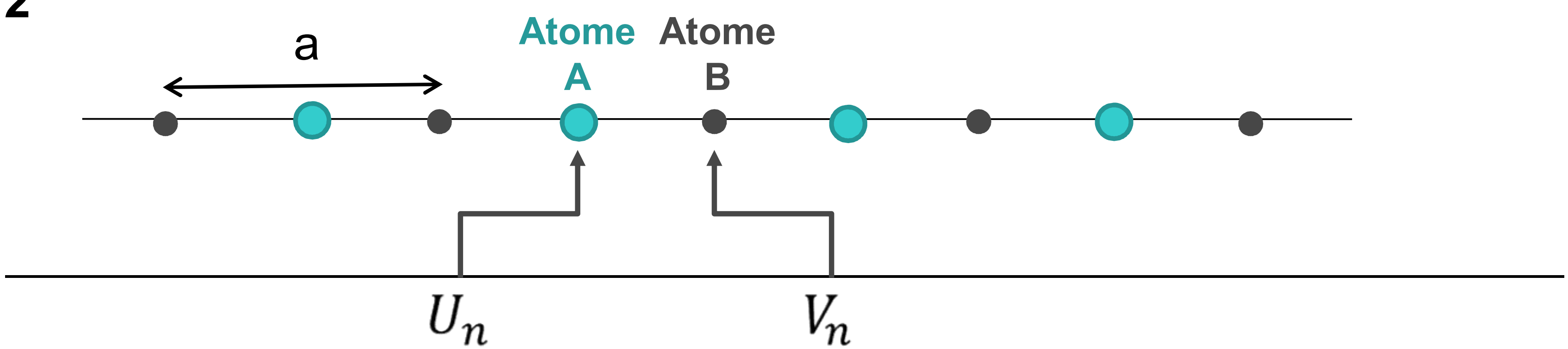
Problème n°2 : Vibration d'une chaîne diatomique

Considérons une chaîne diatomique linéaire de paramètre de maille a. Les atomes A et B sont de masses respectives M_A & M_B ($M_A > M_B$). On se propose d'étudier les vibrations longitudinales en se plaçant dans l'approximation harmonique. Dans cette étude on se limite aux interactions entre premiers voisins. Les interactions sont caractérisées par les constantes de rappels « γ ».

On désignera par $\boldsymbol{u_n}$ et $\boldsymbol{v_n}$ les écarts par rapport aux positions d'équilibre des atomes A et B respectivement.

1. Etablir les équations de mouvement des deux espèces d'atomes qui constituent le motif « n » ;
2. Etablir les relations de dispersion des vibrations susceptibles de se propager le long de la chaîne ;
3. Quelle est l'expression de la vitesse du son le long de la chaîne.

Problème n°2



Equations de mouvement

$$M_A \frac{d^2U_n}{dt^2} = \gamma(V_n + V_{n-1}) - 2\gamma U_n \qquad M_B \frac{d^2V_n}{dt^2} = \gamma(U_n + U_{n+1}) - 2\gamma V_n$$

Relations de dispersion

On cherche des solutions de type $U_n = U_0 e^{i(kna-\omega t)}$ $\quad V_n = V_0 e^{i(kna-\omega t)}$

$$\begin{cases} -\omega^2 M_A U_0 = \gamma V_0\left(1 + e^{-ika}\right) - 2\gamma U_0 \\ -\omega^2 M_B V_0 = \gamma U_0\left(1 + e^{ika}\right) - 2\gamma V_0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} (2\gamma - \omega^2 M_A)U_0 - \gamma\left(1 + e^{-ika}\right)V_0 = 0 \\ \gamma\left(1 + e^{ika}\right)U_0 - (2\gamma - \omega^2 M_B)V_0 = 0 \end{cases}$$

Ce système n'a de solution que si son déterminant est nul

$$\begin{vmatrix} 2\gamma - \omega^2 M_A & -\gamma\left(1 + e^{-ika}\right) \\ \gamma\left(1 + e^{ika}\right) & -(2\gamma - \omega^2 M_B) \end{vmatrix} = 0$$

$$-(2\gamma - \omega^2 M_A)(2\gamma - \omega^2 M_B) + \gamma^2\left(1 + e^{ika}\right)\left(1 + e^{-ika}\right) = 0$$

$$-(2\gamma - \omega^2 M_A)(2\gamma - \omega^2 M_B) + \gamma^2\left(1 + e^{ika}\right)\left(1 + e^{-ika}\right) = 0$$

$$-\omega^4 M_A M_B + (M_A + M_B)2\gamma\omega^2 - 4\gamma^2 + \gamma^2(2 + 2\cos(ka)) = 0$$

$$-\omega^4 M_A M_B + (M_A + M_B)2\gamma\omega^2 - 2\gamma^2 + \gamma^2 2\cos(ka) = 0$$

$$M_A M_B \omega^4 - (M_A + M_B)2\gamma\omega^2 + 2\gamma^2(1 - \cos(ka)) = 0$$

$$\omega^4 - 2\gamma\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\omega^2 + \frac{2\gamma^2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka)) = 0$$

On pose : $\Omega = \omega^2$

$$\Omega^2 - 2\gamma\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\Omega + \frac{2\gamma^2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka)) = 0$$

$$\Delta = \left(2\gamma\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - 4\frac{2\gamma^2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka))$$

$$\Omega_1 = \gamma\frac{M_A + M_B}{M_A M_B} - \gamma\sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka))}$$

$$\Omega_2 = \gamma\frac{M_A + M_B}{M_A M_B} + \gamma\sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka))}$$

Branche Acoustique

$$\Omega_1 = \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} - \gamma \sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka))}$$

Branche Optique

$$\Omega_2 = \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} + \gamma \sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka))}$$

Centre de la 1ère ZB (k=0)

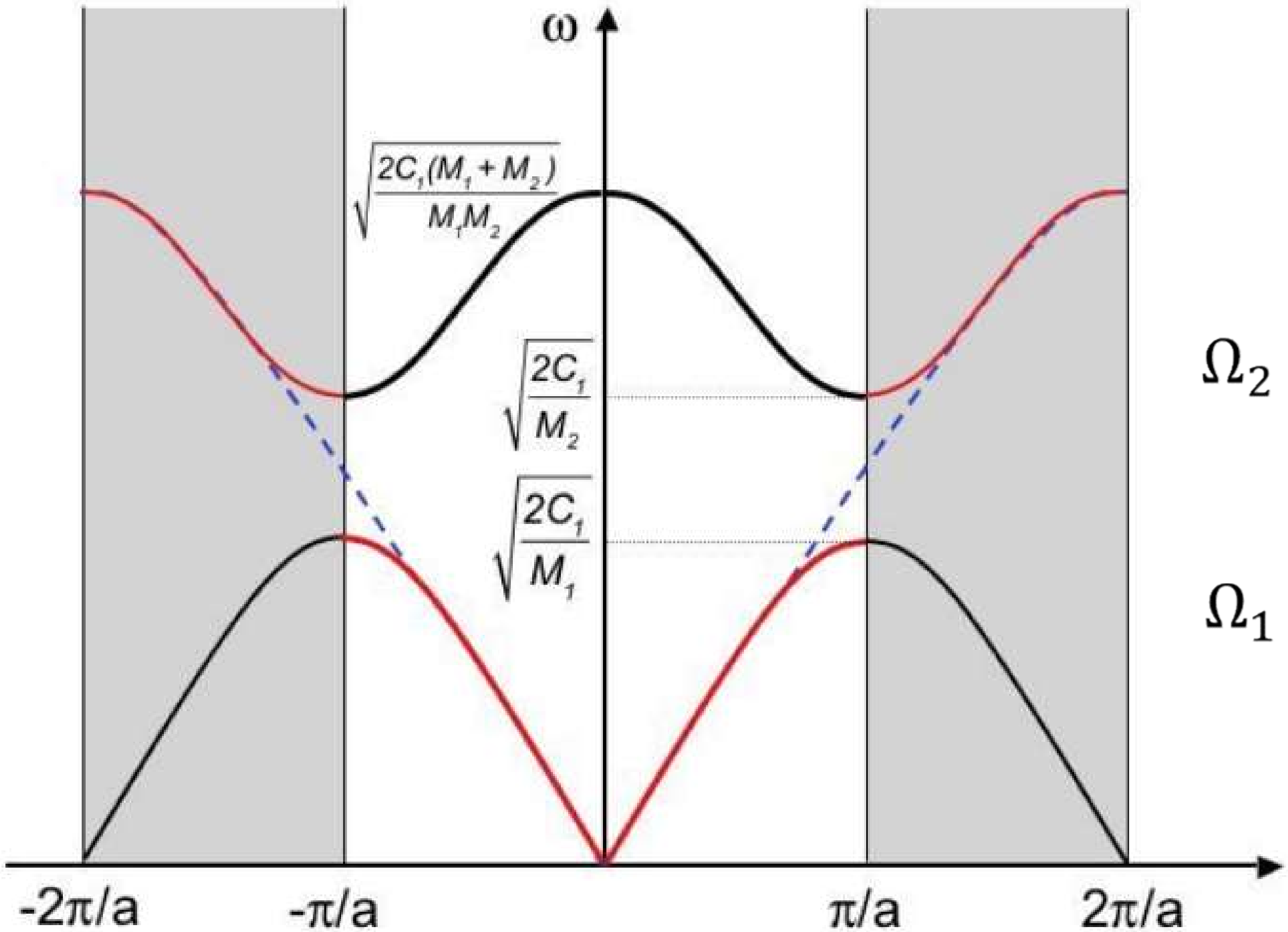
$$\Omega_1 = 0 \qquad \Omega_2 = 2\gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B}$$

Limites de la 1ère ZB ($k=\pi / a$)

$$\Omega_1 = \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} - \gamma \sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{4}{M_A M_B}} \qquad \Omega_1 = 2\frac{\gamma}{M_A}$$

$$\Omega_2 = \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} + \gamma \sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{4}{M_A M_B}} \qquad \Omega_2 = 2\frac{\gamma}{M_B}$$

$$\Omega_1 = 0 \qquad \Omega_2 = 2\gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B}$$



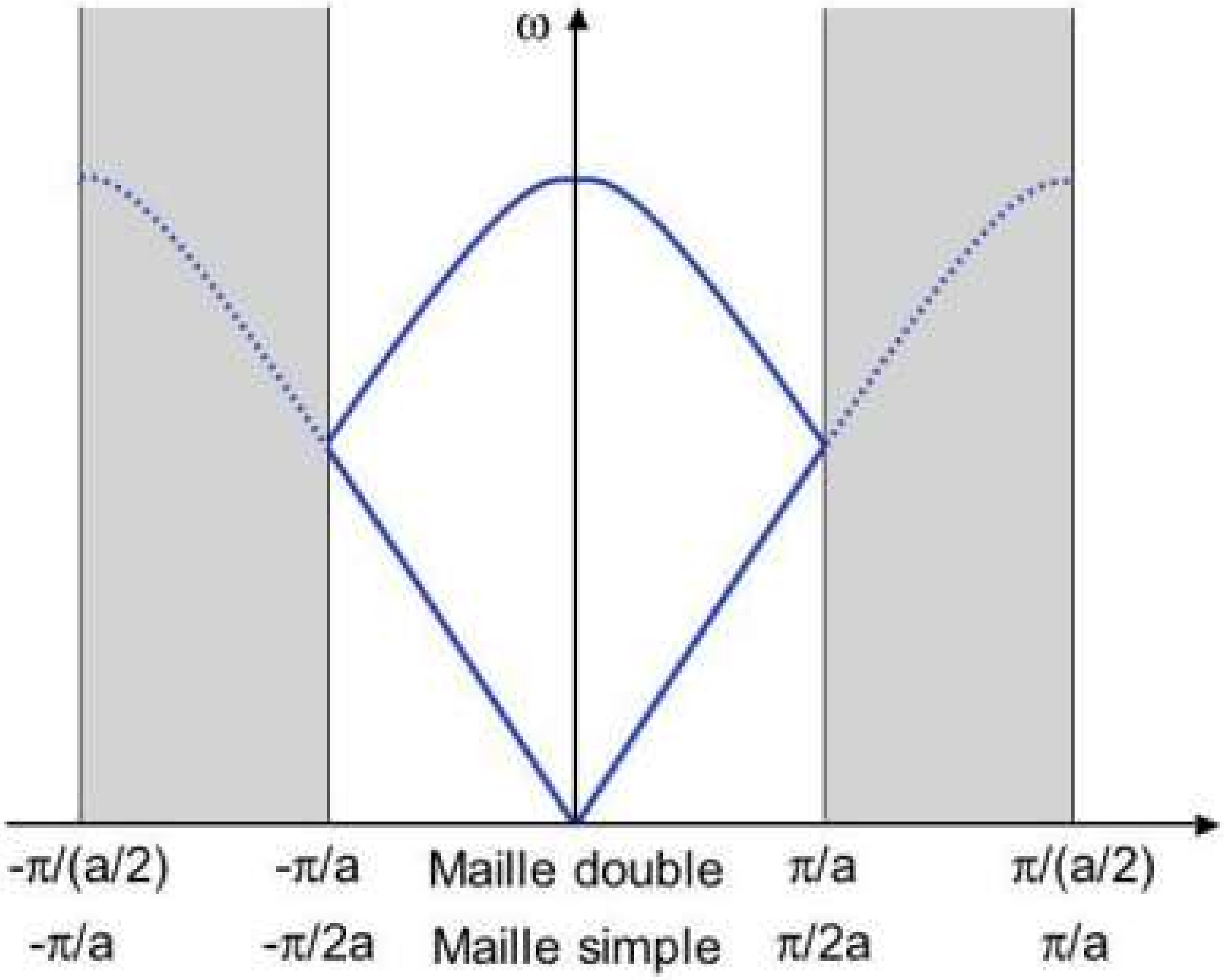
$$\Omega_2 = 2\frac{\gamma}{M_B}$$

$$\Omega_1 = 2\frac{\gamma}{M_A}$$

Si : $M_A = M_B$

$$\Omega_1 = 2\frac{\gamma}{M_A} \qquad \Omega_2 = 2\frac{\gamma}{M_B}$$

$$\Omega_1 = \Omega_2$$



Vitesse du son dans le cristal

$$\Omega_1 = \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} - \gamma \sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka))}$$

$$\cos(ka) \cong 1 - \frac{(ka)^2}{2}$$

$$\Omega_1 = \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} - \gamma \sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{1}{M_A M_B}(ka)^2}$$

$$\Omega_1 = \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} - \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} \sqrt{1 - \frac{M_A M_B}{(M_A + M_B)^2}(ka)^2}$$

$$\Omega_1 = \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} - \gamma \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} \left(1 - \frac{M_A M_B}{2(M_A + M_B)^2}(ka)^2\right)$$

$$\Omega_1 = \frac{\gamma}{2M_A + M_B}(ka)^2$$

$$\omega_1 = \sqrt{\frac{\gamma}{2(M_A + M_B)}}\, ka \qquad \boldsymbol{v_S = a\sqrt{\frac{\gamma}{2(M_A + M_B)}}}$$

Problème n°3

On souhaite étudier l'influence des vibrations des phonons à l'intérieur d'un solide cristallin ionique (***NaCl*** comme exemple). La figure 2 représente la répartition des ions à l'intérieur de la maille. Dans cette étude on notera $\boldsymbol{g_{[hkl]}}$ la constante de force de rappel suivant la direction **[hkl]**. Nous tiendrons en compte seulement des interactions électrostatiques entre les 1ers voisins. Ses interactions seront matérialisées par la force ***F*** : $\boldsymbol{F = \gamma_{[hkl]} r_0}$. Les pulsations des deux branches acoustique et optique sont données par les relations suivantes (a' représente le paramètre de la maille de la chaîne) :

$$\omega_{Ac}^2 = \gamma_{[hkl]} \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} - \gamma_{[hkl]} \sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka'))}$$

$$\omega_{Op}^2 = \gamma_{[hkl]} \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} + \gamma_{[hkl]} \sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka'))}$$

1. La force électrostatique prend la forme : $F = \frac{Z.e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2}$; que représente le terme $\boldsymbol{r_0}$;
2. Calculer les valeurs de la constante de force de rappel suivant les directions [100] et [111] ;
3. On s'intéresse à la branche optique et au centre de la 1ère zone de Brillouin ;
   a. Calculer les longueurs suivant les directions [100] et [111] ;
   b. Des mesures expérimentales ont permis de déterminer la longueurs d'onde d'absorption dans l'infrarouge : $\lambda_{exp} = 61\ \mu m$; comparer cette valeur expérimentale avec celles calculées précédemment et interpréter ce résultat ;
4. On s'intéresse à la branche acoustique ; Calculer les vitesses du son suivant les directions [100] et [111] ;
5. Calculer les vitesses du son suivant les directions [110] ;
6. A partir des résultats précédents, donner le caractère isotrope ou anisotrope de la vitesse du son.

1. La force électrostatique prend la forme : $F = \frac{Z.e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2}$;

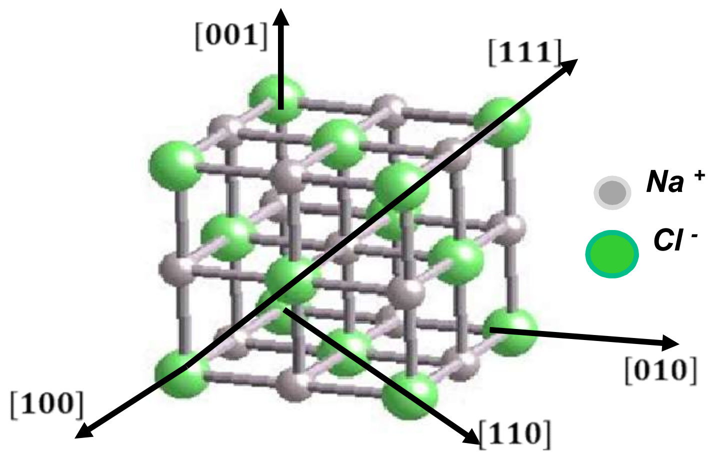
le terme $\boldsymbol{r_0}$ représente : la distance à l'équilibre entre deux ions voisins

2. Constante de force de rappel suivant les directions [100] et [111]

$$r_0 = \frac{\sqrt{h+k+l}}{2}a \qquad F = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^2} = \gamma_{[hkl]} r_0$$

Direction [100]

$$\boldsymbol{r_0 = \frac{a}{2}}$$



Direction [111]

$$\boldsymbol{r_0 = \frac{\sqrt{3}}{2}a}$$

$$\gamma_{[hkl]} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^3}$$

$$\gamma_{[100]} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{2^3}{a^3}$$

$$\gamma_{[100]} = 10{,}37\ N/m$$

$$\gamma_{[111]} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{2^3}{3^{3/2}a^3}$$

$$\gamma_{[111]} = 1{,}99\ N/m$$

3. On s'intéresse à la branche optique et au centre de la 1ère zone de Brillouin

$$\omega_{Op}^2 = \gamma_{[hkl]} \frac{M_A + M_B}{M_A M_B} + \gamma_{[hkl]} \sqrt{\left(\frac{M_A + M_B}{M_A M_B}\right)^2 - \frac{2}{M_A M_B}(1 - \cos(ka''))}$$

$$\boldsymbol{k = 0}$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}$$

$$\omega_{Op.Max}^2 = 2.\gamma_{[hkl]} \frac{1}{\mu}$$

$$\omega = \frac{2\pi C}{\lambda}$$

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{1}{2\pi^2 C} \cdot \gamma_{[hkl]} \frac{1}{\mu}.$$

$$\boldsymbol{\lambda_{[100]} = 63{,}1\mu m} \qquad \boldsymbol{\lambda_{[111]} = 143{,}8\mu m}$$

$$\boldsymbol{\lambda_{exp} = 61\ \mu m}$$

$$\boldsymbol{\lambda_{[100]} \approx \lambda_{exp}} \qquad \boldsymbol{\gamma_{[100]} > \gamma_{[111]}}$$

L'étude des vibrations des phonons dans le cristal NaCl peut-être restreinte à celle de la direction cristallographique [100]

Dans cette direction il y a les deux espèces Na^+ et Cl^-

La direction entre premiers voisins est la plus courte et l constante de la force de rappel est la plus élevée

4. On s'intéresse maintenant à la branche acoustique : Directions [100] et [111]

$$\omega_{Ac}^2 = \gamma_{[hkl]}\frac{M_A+M_B}{M_AM_B} - \gamma_{[hkl]}\sqrt{\left(\frac{M_A+M_B}{M_AM_B}\right)^2 - \frac{2}{M_AM_B}(1-\cos(ka'))}$$

$$\omega_{Ac}^2 \approx \frac{1}{2}\gamma_{[hkl]}\frac{1}{M_A+M_B}a'^2k^2 \qquad \omega_{Ac}^2 \approx \frac{1}{2}\gamma_{[hkl]}\frac{1}{M_A+M_B}a'^2k^2$$

$$v_s = a'\sqrt{\frac{1}{2}\gamma_{[hkl]}\frac{1}{M_A+M_B}}$$

$$v_{s[100]} = 2{,}05.\,10^3 m/s \qquad v_{s[111]} = 1{,}55.\,10^3 m/s$$

5. Vitesse du son selon la direction [110]

$$\gamma_{[110]} = \frac{e^2}{\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{2}{2^{3/2}a^3} \qquad \gamma_{[110]} = 3{,}67\ N/m$$

$$v_s = a'\sqrt{\frac{1}{4}\gamma_{[hkl]}\frac{1}{M_A}} \qquad v_{s[110]} = 1{,}19.\,10^3 m/s$$

6. Caractère isotrope / anisotrope de la vitesse du son

$$v_{s[100]} = 2{,}05.\,10^3 m/s \qquad v_{s[111]} = 1{,}55.\,10^3 m/s \qquad v_{s[110]} = 1{,}19.\,10^3 m/s$$

La valeur de la vitesse du son est différente selon la directions choisie

D'où l'anisotropie de la valeur de cette vitesse du son