Ridouane KHAFFOU

UNIVERSITE IBN ZOHR
FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
AGADIR

TD1 KAJBAJI - Arrakhiz + TD2 + TD3

2016-2017

Physique des matériaux
Série n°1 –SMP5-

I. Plans atomiques

(a) Le lithium cristallise dans une structure cubique centrée de maille a = 3.48 A. En supposant que les atomes, assimilées à des sphères dures, sont en contact le long de la diagonale du cube, représenter la distribution spatiale de ces atomes pour les faces (100), (110), (111) et (201).

(b) Pour chacune des structure 2D trouvées ci-dessus, préciser la direction et le module des vecteurs a_1 et a_2 de la maille primitive.

(c) Donner la valeur numérique de la concentration atomique et la densité massique du Lithium (masse d'une mole : m_{mol} = 7 g).

II. Taux de remplissage

Dans un cristal, le taux de remplissage est défini comme le rapport entre le volume occupé par les atomes (assimiles à des sphères dures de rayon r) et le volume de la maille considérée. Calculer le taux maximal de remplissage τ pour les structures suivantes :

1) cubique simple ;
2) cubique centrée ;
3) cubique à faces centrées ;
4) diamant ;
5) hexagonale compacte idéale.

III. Réseau direct

Déterminer le motif atomique et caractériser le réseau de Bravais (base $(\vec{a}_1, \vec{a}_2; \vec{a}_3)$ forme et volume de la maille primitive correspondante) pour chacune des structures cristallines proposées ci-dessous:

1. réseau cubique simple composé d'atomes identiques,
2. réseau cubique centré composé d'atomes identiques (Exemples: Na, K, Ru, Cr, Fe, Mn), on notera $a\vec{i}; a\vec{j}$ *et* $a\vec{k}$ les vecteurs définissant les arêtes du cube simple,
3. réseau cubique centré composé d'atomes A et B placés respectivement sur les nœuds de deux réseaux cubiques simples décalés d'une demi-grande diagonale (Exemple: CsCl),
4. réseau cubique faces centrées composé d'atomes identiques (Exemples: Ar, Ag, Al, Au, Ca, Cu, Ni), on notera $a\vec{i}; a\vec{j}$ *et* $a\vec{k}$ les vecteurs définissant les arêtes du cube simple,
5. structure "diamant", composée d'atomes identiques placés aux nœuds de deux réseaux cubiques faces centrées décalés d'un quart de grande diagonale (Exemples: C, Si, Ge),
6. structure "blende de zinc", composée d'atomes A et B placés respectivement sur les nœuds de deux réseaux cubiques faces centrées décalés d'un quart de grande diagonale (Exemples: CuCl, ZnS, ZnSe, CdTe, AlAs, GaAs, InAs, SiC),

IV Réseau hexagonal compacte

Un réseau hexagonal simple est construit avec les trois vecteurs de base $\vec{a}, \vec{b}$ et $\vec{c}$.

$$\begin{cases} a = b \neq c \\ (\vec{a},\vec{b}) = \dfrac{2\pi}{3} \text{ et } (\vec{b},\vec{c}) = (\vec{c},\vec{a}) = \dfrac{\pi}{2} \end{cases}$$

1) Représenter sur les vecteurs $\vec{a}, \vec{b}$ et $\vec{c}$ le volume qui constitue la maille primitive et monter comment il faut le compléter pour mettre en évidence la symétrie hexagonale.

2) Monter que la maille primitive de la structure hexagonale compacte (hc)peut être considérée comme formée de la maille précédente et d'une base formée de deux atomes, l'un à l'origine, l'autre à l'intérieur, dans une position que l'on précisera par ses coordonnées u, v et w. Montrer qu'il y a deux choix possibles pour u et v.

3) Quelle relation existe-t-il entre a et c dans le cas particulier du réseau hc

V Réseau atomique

Le motif d'un alliage d'or et de cuivre comporte sur une maille cubique d'arrête a=3,75 Å un atome d'or à chaque sommet et un atome de cuivre au centre de chaque face.

1) Faire un dessin d'une maille de l'alliage.

2) Donner la composition stœchiométrique de cet alliage.

3) Déterminer le motif atomique et caractériser le réseau de Bravais.

4) Comment sont disposés les plans d'atomes de *Cu* par rapport à ceux de *Au* dans les cas où *h, k, l* des plans *(hkl)* sont de même parité, puis lorsqu'ils sont de parités différentes.

VI Symétrie cristalline- Symétrie d'orientation

1. Montrer que l'existence de deux axes de rotation d'ordre 4 perpendiculaires, entraîne, en symétrie d'orientation, l'existence de quatre axes ternaires dont on précisera les orientations.

2. Montrer que la réciproque n'est pas vraie. Qu'entraîne l'existence de quatre axes de rotation d'ordre 3 disposés selon le résultat de la question 1 ?

VII Réseaux réciproques du 'cc' et du 'cfc'

1) Montrer que le réseau réciproque d'un réseau cubique centré est un réseau cubique à faces centrées et vice versa.

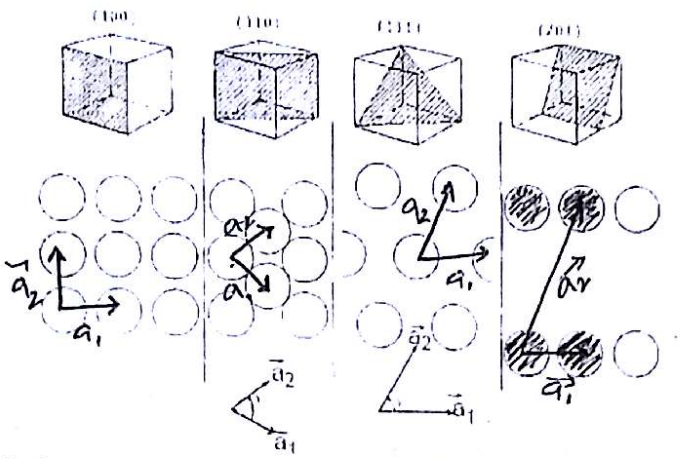
2) Donner le paramètre de la maille conventionnelle dans laquelle est construit le réseau réciproque.

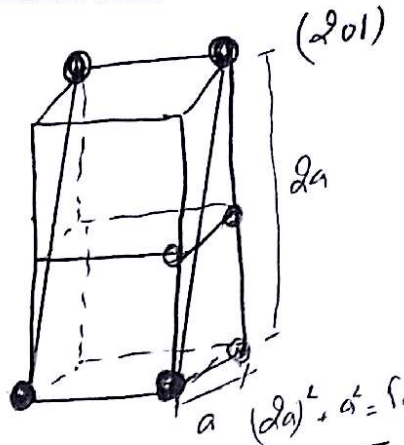
3) Soient (hkl) les indices de Miller relatifs à la maille primitive et (HKL) ceux relatifs à la maille conventionnelle. Etablir les relations reliant ces deux familles d'indices dans le cas particulier du 'cc' et 'cfc'.

Exemple: Soient les plans d'indices (100) et (001) se rapportant à la maille conventionnelle du 'cfc'. Quels sont les indices de ces plans relatifs à la maille primitive de ce réseau?

1. Plans atomiques

(a) Quand un indice est nul, l'intersection avec l'axe correspondant est rejetée à l'infini. Les plans concernés par cet exercice sont représentés ci-dessous. Les atomes étant



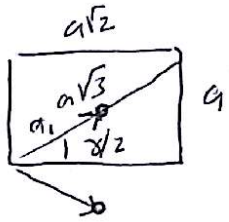


$(2a)^2 + a^2 = 5a^2$

$\Rightarrow \|\vec{a}_2\| = a\sqrt{5}$.

en contact le long de la diagonale du cube, leur rayon est $r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$. On en déduit aisément la distribution des atomes sur les différentes faces.

(b) (100) $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a$ et $\gamma = 90°$
(110) $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \frac{a\sqrt{3}}{2}$ et $\gamma = 70.\cancel{5}°$
(111) $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = a\sqrt{2}$ et $\gamma = 60°$
(201) $|\mathbf{a}_1| = a, |\mathbf{a}_2| = a\sqrt{5}$ et $\gamma = 90°$



$\sin\frac{\gamma}{2} = \frac{a}{a\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{3}$.

$\Rightarrow \gamma = 70°$.

(c) Il y a 2 atomes de lithium par cube d'arrête $a = 3.48$ Å. La densité atomique est donc $n = 4.7 \times 10^{28}$ atomes/m^3. = nbre d'at pr maill. / Volume du cube. $= 2/a^3$
$= \frac{2}{(3{,}48\ 10^{-10})^3}$
Densité massique : $\rho = \frac{n\, m_{atom}}{N_A} = 546$ kg/m^3.

$\rho = \frac{4{,}7\,10^{28} \times 7 \times 10^{3}}{6{,}02\ 10^{23}}$

3. Taux de remplissage

Soit r le rayon des sphères dures et a l'arête des cubes. Le taux de remplissage est défini comme le rapport entre le volume occupé par les atomes (sphères) et le volume de la maille considérée.

(a) Le cube est occupé par $8 \cdot \frac{1}{8} = 1$ sphère et $a = 2r$, d'où

$V_{sphere} = \frac{4}{3}\pi r^3$.

$$t = \frac{\pi}{6} = 0.524 \qquad = \frac{1 \times \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3}$$

(b) Les sphères sont au contact le long des grandes diagonales du cube, donc $a\sqrt{3} = 4r$. Le cube contient $8 \cdot \frac{1}{8} + 1 = 2$ sphères, d'où

$$t = \pi\frac{\sqrt{3}}{8} = 0.68$$

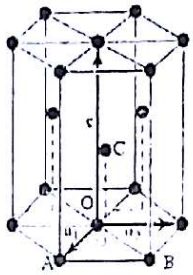
(c) Les sphères sont au contact le long des diagonales des faces du cube, donc $a\sqrt{2} = 4r$. Le cube contient $6 \cdot \frac{1}{2} + 8 \cdot \frac{1}{8} = 4$ sphères, d'où

$$t = \pi\frac{\sqrt{2}}{6} = 0.74$$

(d) La distance entre les deux atomes constituant le motif (en 000 et $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$) est $a\sqrt{3}/4 = 2r$. $8\cdot\frac{1}{8} + 6\cdot\frac{1}{2} + 4\cdot 1 = 8$ atomes sont contenus dans le volume a^3, d'où

$$t = \pi\frac{\sqrt{3}}{16} = 0.34$$

(e) Dans la maille hcp (voir Fig.2) les atomes en 000 (O), 100 (A), 110 (B) et $\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}$ (C) sont distribués aux sommets d'un tétraèdre qui est régulier (de côté a) quand le rapport c/a est optimal ($c/a = 2\sqrt{2/3} = 1.63$).



Prisme droit à Base hexagonal
ou
Prisme droit à base losange
1/3 de la maille.

FIGURE 2 Maille hcp conventionnelle.

La maille conventionnelle contient $12\cdot\frac{1}{6} + 2\cdot\frac{1}{2} + 3\cdot 1 = 6$ atomes. La base de la maille est un hexagone régulier composé de six triangles équilatéraux de côté $2r$. L'aire est

$$A = 6\left[\frac{1}{2}2r\frac{\sqrt{3}}{2}2r\right] = 6\sqrt{3}r^2$$

en pl aire d'un triangle equilatéral
$A = \frac{\sqrt{3}}{4}a^2$ tq a côté du triangle

La hauteur de la maille correspond à deux fois la hauteur du tétraèdre

$$c = 2\sqrt{\frac{2}{3}}2r$$

Pour le taux de remplissage on obtient

$$t = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.74 \quad = \frac{6\times\frac{4}{3}\pi r^3}{A\times c} = \frac{6\times\frac{4}{3}\pi r^3}{6\sqrt{3}r^2\times 2\sqrt{\frac{2}{3}}2r}$$

On vérifie ainsi qu'il y a deux manières de maximiser le taux de remplissage (minimiser le volume occupé par des sphères dures) : la structure cubique à faces centrées (c) et la structure hexagonale compacte (e). Les deux correspondent au même taux de remplissage optimal ($t = 0.74$), car elles ne diffèrent en réalité que par la façon de disposer les sphères dans les couches successives (voir Fig.3).

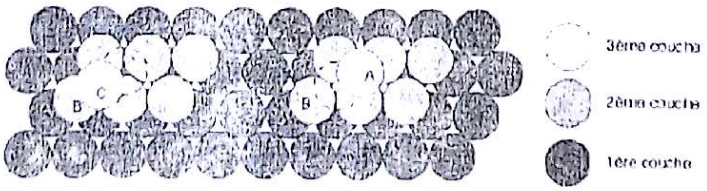


FIGURE 3 Empilement pour la structure fcc (à gauche) et pour la structure hcp (à droite)

11- Pr le cubique simple $a_1 = ai$, $a_2 = aj$, $a_3 = ak$.
$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) = a^3$.

III. Réseau direct

2) On peut construire le réseau *cc* avec les vecteurs primitifs suivants (figure a):

$\vec{a}_1 = a\vec{i} \quad \vec{a}_2 = a\vec{j} \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$ $\longrightarrow V_0 = \frac{a^3}{2}$ le motif est constitué de 2 atomes (0 0 0) et (1/2 1/2 1/2).

Comme pour le *cfc* il existe un choix plus symétrique (figure 18b): $\cancel{V_0 = \frac{a^3}{4}}$.

$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$

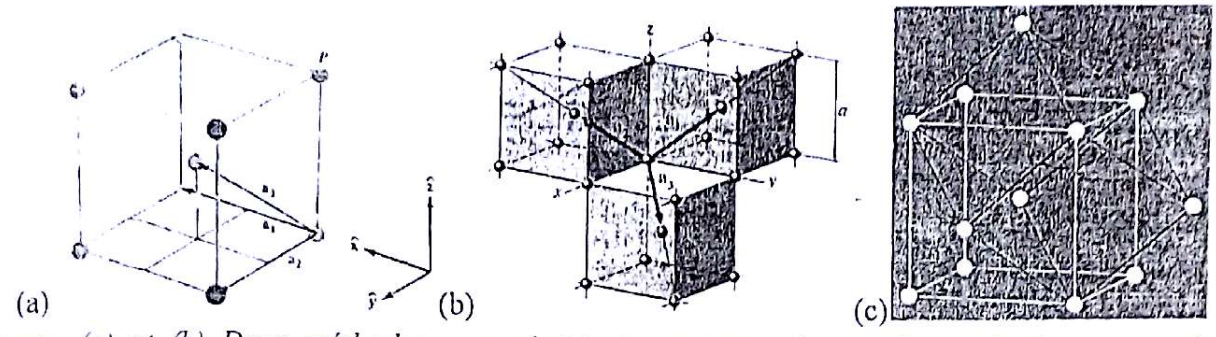


Figure: (a) et (b) Deux méthodes pour choisir les vecteurs de translation fondamentaux du réseau cc. (c) La maille primitive est obtenue en complétant la construction.

Le volume V_0 de la maille primitive d'une structure *cc* est $V_0 = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \frac{a^3}{2}$, où a est la longueur de l'arête de la maille cubique.

3- La structure du **chlorure de césium** *CsCl* est illustrée dans la figure. Le réseau de Bravais est cubique simple, et le motif dans la maille primitive est constitué d'une seule molécule. Un ion Cl^- est réparti sur les huit sommets de cette maille (chacun contribue pour un huitième), et un ion Cs^+ est placé au centre de cette maille.

Remarque : la structure n'est pas de type cubique centrée les sites aux sommets et au centre ne sont pas équivalents.

Parmi les solides cristallisant sous cette forme, on peut donner les molécules suivantes : *BeCu, AlNi, CuZn*(laiton), *CuPd, AgMg, LiHg, CsCl*...

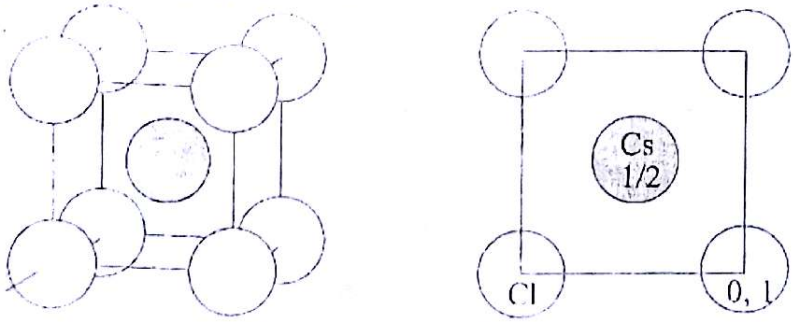


Figure: structure CsCl

Le volume V_0 de la maille primitive d'une structure *cubique simple* est a^3.

4- La structure **cubique à faces centrées** (*cfc*) est décrite dans la figure. Elle provient d'un réseau lui-même cubique à faces centrées, sur lequel on a placé un motif constitué d'un atome sur chaque sommet de la maille cubique et d'un atome au centre de chaque face du cube. Comme chacun des huit sommets de cette maille élémentaire appartient simultanément à huit

mailles et chacune des six faces appartient en même temps à deux mailles, ce motif est constitué de quatre nœuds.

La maille primitive construite sur les vecteurs fondamentaux du réseau *cfc* à l'intérieur d'une maille cubique est occupée par huit atomes aux sommets, chacun participant à huit mailles différentes. Elle contient donc seulement un nœud en propre.

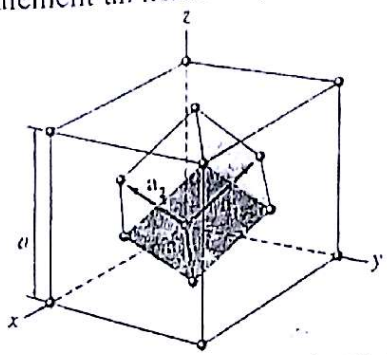


Figure: maille primitive construite sur les vecteurs fondamentaux du réseau cfc à l'intérieur d'une maille cubique.

On peut construire le réseau *cfc* avec les vecteurs primitifs suivants.

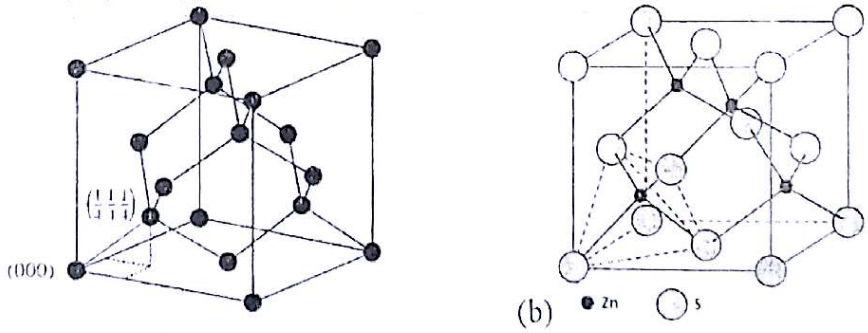
$$\vec{a}_1 = a\,\vec{i} \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j}) \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k})$$

Il existe un choix plus symétrique (figure) :

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k}) \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k}+\vec{i}) \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j})$$

Le volume de la maille primitive d'une structure *cfc* est $V_0 = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3) = \frac{a^3}{4}$, où a est la longueur de l'arête de la maille cubique.

5- La structure **diamant** est décrite dans (la figure a). Son réseau de Bravais est cubique à faces centrées, comme la structure *cfc*. En revanche, un atome supplémentaire a été introduit dans le motif de la maille primitive. Cet atome supplémentaire est placé au centre du site tétraédrique le plus proche de l'origine du réseau, elle possède de très fortes symétries. Par exemple, chaque atome est situé au centre d'un tétraèdre régulier. Dans la structure diamant chaque atome est entouré de 4 plus proches voisins, ce qui permet de former des liaisons covalentes. La structure diamant peut être décrite comme étant formée de 2 structures *cfc* déplacées l'une par rapport à l'autre le long de la diagonale principale. La position de l'origine de la seconde structure *cfc* par rapport à l'origine de la première est *(1/4, 1/4, 1/4)*.



(a) La structure diamant est typique des éléments de la colonne IV du tableau périodique. (b) Dans les composés des colonnes III-V les sites (0,0,0) et (1/4,1/4,1/4) sont occupés par des atomes de types différents (structure zinc-blende (ZnS structure)).

On compte 8 atomes par maille cubique. Comme le réseau est *cfc*, on a 4 nœuds par maille, on en déduit qu'à un nœud est associé un motif formé par deux atomes (deux atomes non reliés par une translation du réseau *cfc*). Le silicium, le germanium et la forme a de l'étain (étain gris, stable à basse température) ont la structure du diamant.

Le volume de la maille primitive est le même que celui d'une réseau *cfc* c.a.d $V_0 = (\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3) = \frac{a^3}{4}$,

Les vecteurs primitifs du réseau de Bravais (cfc) sont les suivants.

$$\bar{a}_1 = \frac{a}{2}(\bar{j} + \bar{k}) \quad \bar{a}_2 = \frac{a}{2}(\bar{k} + \bar{i}) \quad \bar{a}_3 = \frac{a}{2}(\bar{i} + \bar{j})$$

6- **La blende** a la structure du diamant dans laquelle les quatre atomes intérieurs sont remplacés par quatre atomes d'une autre espèce (figure 20b), faisant ainsi disparaître des symétries (par exemple, tous les centres de symétrie ont disparu). On compte *4 Zn* et *4 S* par maille cubique faces centrées. Comme il y a 4 nœuds par maille dans le réseau *cfc*, on en déduit que le motif est constitué d'un *Zn* et d'un *S*. Sur la figure est indiqué un tétraèdre des S entourant un *Zn*, de même chaque *S* est entouré d'un tétraèdre de *Zn*.

Le volume de la maille primitive est le même que celui d'un réseau *cfc* c.a.d $V_0 = (\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3) = \frac{a^3}{4}$,

Les vecteurs primitifs du réseau de Bravais (cfc) sont les suivants.

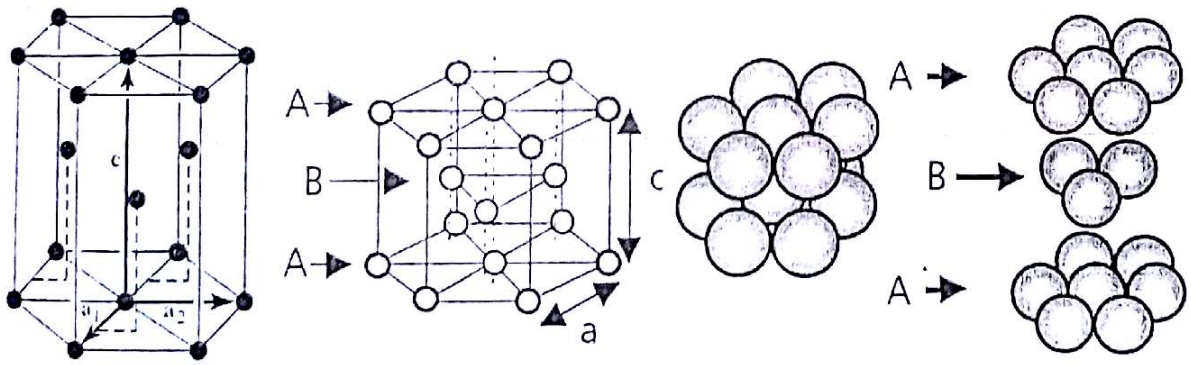
$$\bar{a}_1 = \frac{a}{2}(\bar{j} + \bar{k}) \quad \bar{a}_2 = \frac{a}{2}(\bar{k} + \bar{i}) \quad \bar{a}_3 = \frac{a}{2}(\bar{i} + \bar{j})$$

IV Réseau hexagonal compacte

La structure **hexagonale compacte** est décrite dans la figure. Le réseau de Bravais est hexagonal simple. Le motif est formé d'un atome à chaque sommet de la maille primitive, et d'un atome au centre. Ce motif est donc formé de deux atomes propres.

Le qualificatif "compact" signifie que les atomes sont disposés de la façon la plus compacte possible dans l'espace.

La structure hexagonale compacte *hc* s'obtient lorsque les plans compactes sont empilés dans la séquence *ABABAB* ... Elle ne correspond pas à un réseau de Bravais



Structure hexagonal compact.

La maille primitive est hexagonale simple

Le motif est formé de deux atomes *(0,0,0)* et *(2/3,1/3,1/2)*. (ou bien *(0,0,0)* et *(1/3,2/3,1/2))*

La structure *hc* est formée par deux réseaux de Bravais hexagonaux simples, intercalés et déplacés e $\frac{2}{3}\bar{a}_1 + \frac{1}{3}\bar{a}_2 + \frac{1}{2}\bar{c}$ l'un par rapport à l'autre

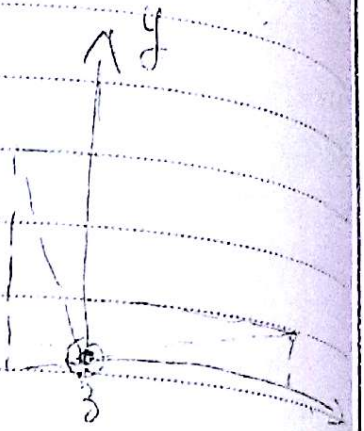
V Réseau réciproque (à ne pas traiter)

VI Symétrie cristalline d'orientation

* axe d'ordre 4 // z

$$x, y, z \xrightarrow{4//z} \bar{y}, x, z$$

$$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{y} \\ x \\ z \end{pmatrix} \; ; \; M_1 = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



* axe d'ordre 4 // x

$$x, y, z \xrightarrow{4//x} x, \bar{z}, y$$

si l'axe est y alors la matrice $\begin{pmatrix} \cos\phi & 0 & -\sin\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\phi & 0 & \cos\phi \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ \bar{z} \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Le produit des deux matrices M_1 et M_2, ie rotat° sur z puis sur x

$$M' = M_2 \times M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$f \circ g =$

$M \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{y} \\ x \\ z \end{pmatrix}$ puis $M_2 \begin{pmatrix} \bar{y} \\ x \\ z \end{pmatrix} = M' \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

Pour vérifier que M' est un axe d'ordre 3

$(M')^3 = M$

on a 4 axes ternaires suivant $[111]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$

2) les matrices d'ordre 3 pivot $[111]$ et $[11\bar{1}]$ s'écrivent

axe 3 $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix} 0 & 0 & \bar{1} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \end{pmatrix}$ leur produit $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}$ ordre 2

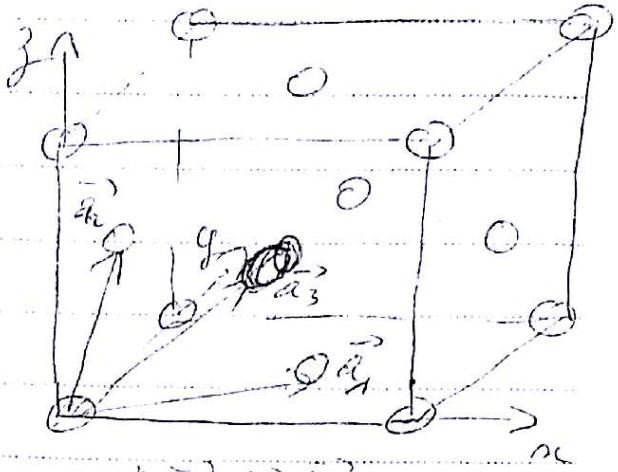
ce qui représente une rotation de π autour de l'axe (y, z)

VII Réseau réciproque

La maille primitive (la plus symétrique) du réseau cfc s'écrit sur les vecteurs :

$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$; $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$, $\vec{a}_3 = (\vec{k} + \vec{i})\frac{a}{2}$

$$\vec{a}_1^* = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3)}$$



Volume de la maille primitive

$$V = \vec{a}_1(\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) = \frac{a^3}{4}$$

$$\vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

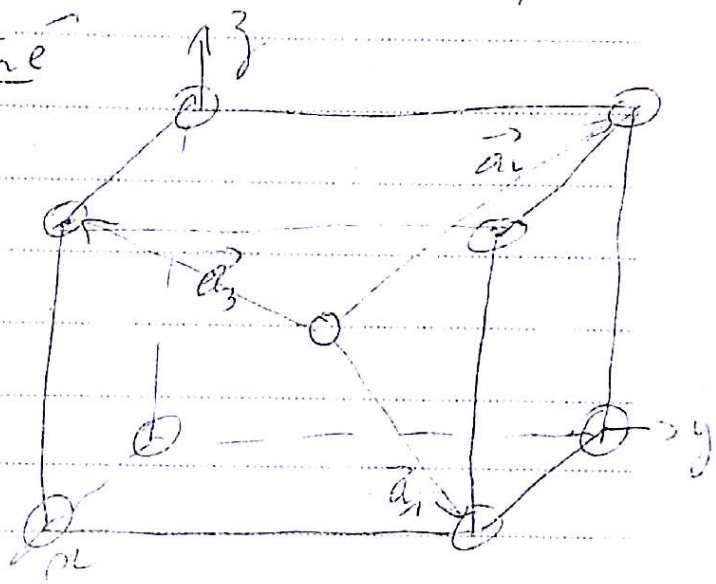
$$\vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_3^* = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3 = \frac{a^2}{4}\begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{a^2}{4}\begin{pmatrix} +\vec{i} \\ +\vec{j} \\ -\vec{k} \end{pmatrix}$$

donc le réseau réciproque du réseau cfc est le réseau c.c

<u>Réseau cubique centré</u>



$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

Volume de la maille primitive

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3) = \left(\frac{a^3}{8}\right)\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix}$$

$$= \frac{a^3}{2}$$

$$\vec{a}_1^* = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \wedge \vec{a}_3}{V} = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})$$

$$\vec{a}_2^* = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \wedge \vec{a}_1}{V} = \frac{2\pi}{a}(\vec{j} + \vec{k})$$

$$\vec{a}_3^* = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2}{V} = \frac{2\pi}{a}(\vec{k} + \vec{i})$$

Le reseau réciproque du réseau c.c est le réseau cfc.

Remarque : on vérifie que le ~~réseau~~ réseau réciproque du réseau réciproque est le réseau direct.

2) Le paramètre de la maille conventionnelle (cubique)

Réseau réciproque du cfc $a^* = \frac{4\pi}{a}$

" " " " du cc $a^* = \frac{4\pi}{a}$.

3) Pour le cc

$$\vec{G} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^* \quad \text{(maille primitive)}$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left((\vec{i}+\vec{j})h + (\vec{j}+\vec{k})k + (\vec{k}+\vec{i})l\right)$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left[(h+l)\vec{i} + (k+h)\vec{j} + (k+l)\vec{k}\right]$$

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}\left(H\vec{i} + K\vec{j} + L\vec{k}\right) \quad \text{(maille cubique)}$$

$$\Rightarrow H = (h+l) \; ; \; K = k+h \; ; \; L = k+l$$

Pour le c.f.c

$$\vec{G} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left[h(\vec{i}+\vec{j}-\vec{k}) + k(-\vec{i}+\vec{j}+\vec{k}) + l(\vec{i}-\vec{j}+\vec{k})\right]$$

$$= \frac{2\pi}{a}\left[(h-k+l)\vec{i} + (h+k-l)\vec{j} + (-h+k+l)\right]$$

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}\left[H\vec{i} + K\vec{j} + L\vec{k}\right]$$

donc $H = h-k+l$; $K = h+k-l$, $L = -h+k+l$

(100) maille cubique $\longrightarrow (1/2\ 0\ 1/2) \equiv (101)$ maille primitive

$$\frac{H+K}{2} = h \; ; \; \frac{H+L}{2} = l \; ; \; \frac{K+L}{2} = k$$

(001) maille cubique $\longrightarrow (0\ 1/2\ 1/2) \equiv (011)$ maille primitive

y	x	z
$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

TD2 KAJBAJI - Arrakhiz

UNIVERSITE IBN ZOHR
FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
AGADIR

2016-2017

Physique des matériaux
Série 2 –SMP5-

I. Il est souvent pratique de représenter un réseau de Bravais cubique à faces centrées en tant que cubique simple, de maille primitive cubique d'arête a et avec un motif à quatre points.

a) Montrer que le facteur de structure est alors égal à $4f_j$ ou O pour tous les points du réseau réciproque cubique simple.

b) Montrer que, lorsque les points de facteur de structure nul sont enlevés, les points restants du réseau réciproque constituent un réseau cubique centré de maille conventionnelle d'arête $4\pi/a$. Pourquoi fallait-il s'attendre à ce résultat ?

II- Les composés ioniques de formule RX cristallisent dans le système cubique, R étant le cation (+) et X l'anion (-). Pour les composés de type NaCl / KCl.

1- a) Représenter sur une maille cubique la position de tous les ions.

b) Tracer sur la même figure les vecteurs primitifs.

c) Quelle est le nombre de molécules RX par maille cubique ?

d) Préciser le réseau de Bravais et le motif.

On suppose que le facteur de diffusion atomique est constant et égal au nombre de charges des ions. Les ions ont pour nombre de charge : $Na^+=11-1=10$; $Cl^-=17+1=18$; $K^+=19-1=18$

2- a) Calculer le facteur de structure F(hkl) pour les composés RX dans une maille cubique et donner les conditions que doivent satisfaire les indices hkl pour que le facteur de structure correspondant soit différent de zéro.

b) Dresser un tableau donnant l'expression du facteur de structure pour les composés NaCl et KCl tels que : $h^2+k^2+l^2<16$.

c) Sur deux figures, l'une pour NaCl et l'autre pour KCl, placer un cercle indiquant la valeur que prend $|F(hkl)|$ aux nœuds hkl du plan réciproque (001) tels que $h^2+k^2+l^2 \leq 18$.

d) Indiquer la particularite que présente le diagramme de diffraction de KCl.

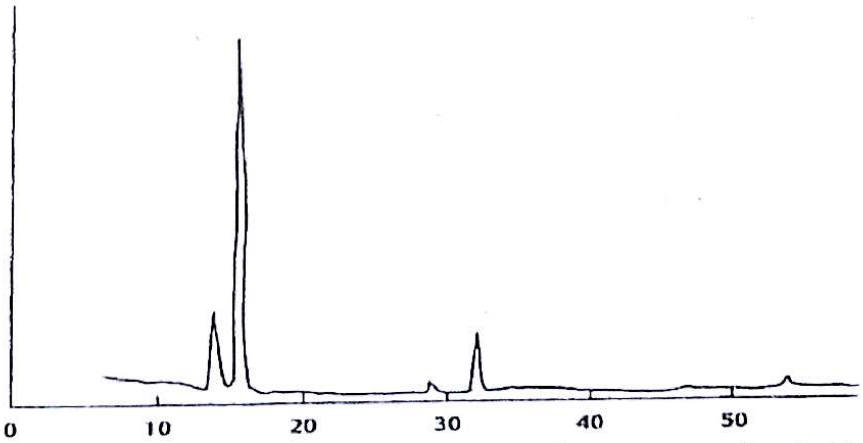


Figure : diagramme de diffraction d'un faisceau de rayon X par une poudre de NaCl en utilisant les longueurs d'ondes $\lambda_\alpha = 0.15393nm(K_\alpha)$ et $\lambda_\beta=0.13902nm(K_\beta)$.

6

3- Dans une chambre de Debye-Scherrer, les longueurs d'onde de rayon X utilisées pour obtenir le diagramme de diffraction de la figure jointe sont $\lambda_\alpha = 0.15393nm(K_\alpha)$ et $\lambda_\beta=0.13902nm(K_\beta)$.

a) Préciser lesquelles des pics correspondent à K_α. Justifier votre réponse.

b) Déterminer les distances interréticulaires d_{hkl} et les indices hkl correspondants au pics de diffraction. En déduire le paramètre de maille.

III- Les diagrammes de diffraction sont réalisés dans une chambre de Debye-Scherrer (poudre) pour trois corps monoatomique A, B, et C. On sait que un corps est cubique centré, l'autre est cubique à faces centrée et le troisième est cubique diamant. La position des quatre premiers anneaux de diffraction pour chaque corps est donnée dans le tableau suivant :

A (degré)	B (degré)	C (degré)
42,2	28,8	42,8
49,2	41,0	73,2
72,0	50,8	89,0
87,3	59,6	115,0

1- Donner la structure cristallographique des corps A, B, C, on précisera la démarche suivie.

2- La longueur d'onde utilisée pour la diffraction X est λ=1,5 °A, déterminer le paramètre de maille conventionnelle cubique pour chaque structure.

3- La structure diamant est remplacé par une structure blende ZnS (le réseau est c.f.c et le motif est formé par deux atomes S(0, 0, 0) et Zn(1/4, 1/4, 1/4)). On suppose que les deux structures ont le même paramètre de maille a.

a- Représenter sur une figure une maille cubique et les positions atomiques des atomes Zn et S.

b- Donner les θ correspondant aux quatre premiers noeuds de diffraction pour la blende.

IV- L'alliage *Fe_3Al*

L'alliage *Fe_3Al* peut exister sous deux formes :

Phase A : maille cubique de côté *a*. Sites occupés *(0,0,0)* et *(1/2,1/2,1/2)*. La répartition des atomes de fer et d'aluminium est aléatoire entre les deux sites.

Phase B : maille cubique de côté *a*. Un atome de fer occupe toujours le site *(0,0,0)*. Les autres atomes de fer et les atomes d'aluminium occupent de manière aléatoire les sites *(1/2,1/2,1/2)*.

1- Quels sont les réseaux de Bravais de chaque phase ?

2- a) Si f_{Fe} et f_{Al} sont les facteurs de diffusion atomiques du fer et de l'aluminium quel facteur de diffusion atomique faut-il attribuer aux sites occupés de manière aléatoire dans les phases *A* et *B* ?

b) Calculer le facteur de structure relatif à chaque phase.

3- On réalise des expériences de diffraction sur les deux phases avec le même dispositif. Établir le spectre théorique et présenter les résultats sous la forme d'un tableau dont les lignes contiendront les indices des raies et les facteurs de structure pour chaque phase. Arrêter le tableau à la raie *(hkl)* tels que $h^2+k^2+l^2 \leq 10$ de la phase *A*. Peut-on distinguer les deux phases par cette méthode ? Comment ?

$h^2+k^2+l^2 \leq 10$	*(hkl)* Phase *A*	*(hkl)* Phase *B*	F_{hkl} Phase *A*	F_{hkl} Phase *B*

6'

Serie 2

La structure c.f.c peut être vue comme un cubique simple avec une base de 4 noeuds.

La maille primitive du cubique simple a pour paramètres : $\vec{a}_1 = a\vec{i}$, $\vec{a}_2 = a\vec{j}$, $\vec{a}_3 = a\vec{k}$

La base : $(0,0,0)$, $(1/2, 1/2, 0)$, $(1/2, 0, 1/2)$, $(0, 1/2, 1/2)$

Le réseau réciproque du cubique simple :

$\vec{a}_1^* = \frac{2\pi}{a}\vec{i}$; $\vec{a}_2^* = \frac{2\pi}{a}\vec{j}$; $\vec{a}_3^* = \frac{2\pi}{a}\vec{k}$

Le facteur de structure $F_{hkl} = \sum_j f_j e^{i2\pi(hu_j + kv_j + lw_j)}$

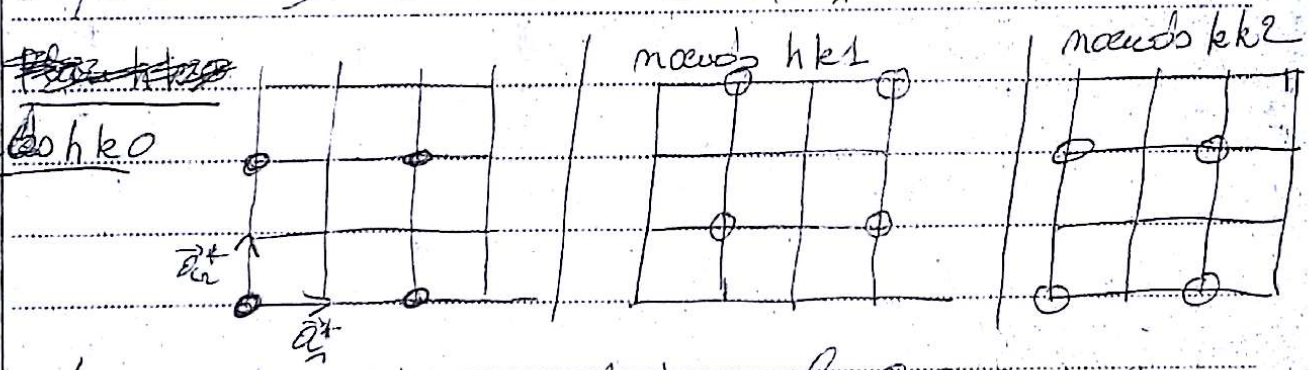
$= (e^x)^{y_j}$

$F_{hkl} = f\left(1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{h+l} + (-1)^{k+l}\right)$

$F_{hkl} = 0$ si h, k et l sont de parité mixte.

$F_{hkl} = 4f$ si h k et l sont de même parité.

b) Si on enlève les points de facteur de structure nul on retrouve le c.c. $\vec{G} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^*$



Le réseau réciproque est donc le c.c avec un paramètre de maille $\frac{4\pi}{a}$.

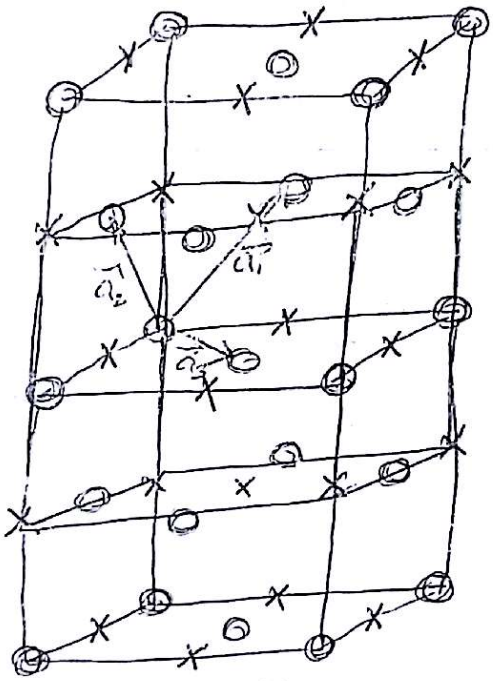
(identique à la construction de l'exercice de la serie 1)

Pr un materiau du syst cristallin cubique, les ro
de diffract° dans l'ordre des θ croissant.
(ordre des formes quadratiques $Q^2 = h^2 + k^2 + l^2$ croissan
sont : 100 (1), 110 (2), 111 (3), 200 (4), 210 (5), 211 (6), 220 (8), 221 (9)

310 (10), 311 (11), 222 (12), 320 (13), ...

$$2 d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = \lambda$$

II - les deux ions R et X forme chacun un



2/

R | 000, ½½0, ½0½, 0½½ X | ½00, 0½0, 00½, ½½½

$$F_{hkl} = f_R \left(1 + (-1)^{h+k} + (-1)^{k+l} + (-1)^{h+l}\right) + f_X \left(e^{2i\pi\left(\frac{h+k+l}{2}\right)} + e^{2i\pi\frac{h}{2}} + e^{2i\pi\frac{k}{2}} + e^{2i\pi\frac{l}{2}}\right)$$

on a $e^{2i\pi\frac{h}{2}} = e^{2i\pi\left(\frac{h}{2} + \frac{k}{2} - \frac{k}{2} + \frac{l}{2} - \frac{l}{2}\right)} = e^{2i\pi\left(\frac{h+k+l}{2} - \frac{k+l}{2}\right)}$

$= e^{2i\pi\left(\frac{h+k+l}{2}\right)} e^{-i\pi(k+l)} = e^{2i\pi\left(\frac{h+k+l}{2}\right)} \left(e^{-i\pi}\right)^{k+l}$

$\left[\cos(-\pi) + i\sin(-\pi)\right]^{k+l} = (\cos\pi)^{k+l} = 1$ (f et pair)

7'

1-a/et b) c/c

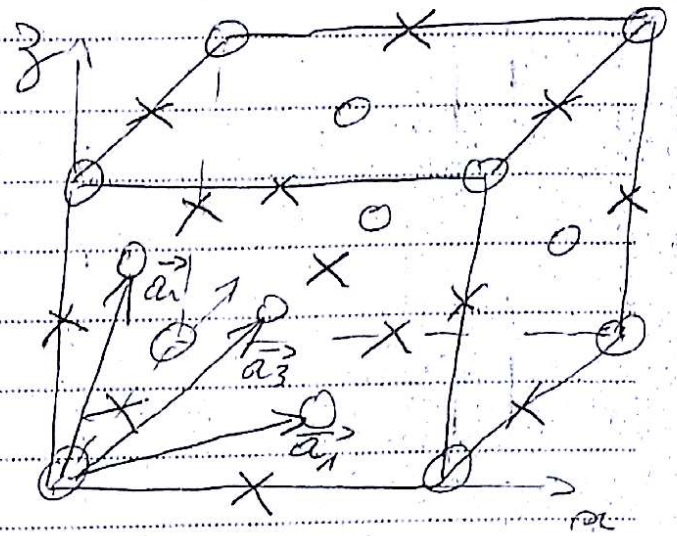
II O → R

X → X

$\vec{a_1} = \frac{a}{2}(\vec{i}+\vec{j})$

$\vec{a_2} = \frac{a}{2}(\vec{j}+\vec{k})$

$\vec{a_3} = \frac{a}{2}(\vec{k}+\vec{i})$



c) on a 4 molécule RX par maille cubique

d) réseau de Bravais : cfc.

motif : (deux ions un R et un X)
(une molécule RX)

motif R en 000 et X en 1/2 1/2 1/2

2) a) $F_{hkl} = F_{motif} \cdot F_{réseau}$

$= \left(f_R + f_X e^{i2\pi\left(\frac{h+k+l}{2}\right)}\right)\left(1+(-1)^{(h+k)}+(-1)^{h+l}+(-1)^{(k+l)}\right)$

$F_{hkl} \neq 0$ pour h, k et l de même parité (réseau)

et Si $f_R = f_X$ $F_{hkl} = 0$ pour $h+k+l = 2n+1$ (motif

b) Pour les hkl de même parité

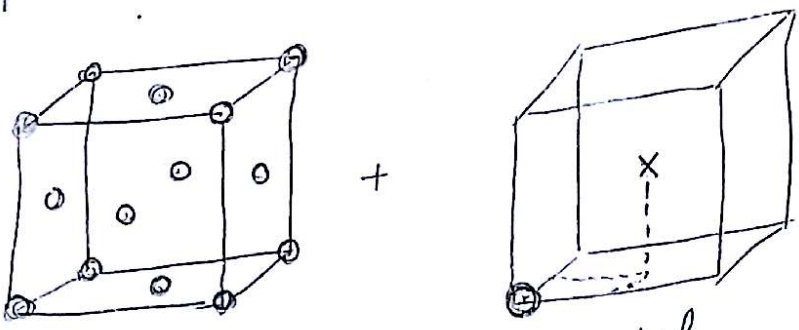
$h^2+k^2+l^2$	3	4	8	11	12	16
nœuds hkl	111	200	220	311	222	400
F_{hkl}	$4(f_R-f_X)$	$4(f_R+f_X)$	$4(f_R+f_X)$	$4(f_R-f_X)$	$4(f_R+f_X)$	$4(f_R+f_X)$
F_{hkl} (KCl)	0	144	144	0	144	144
F_{hkl} (NaCl	32	112	112	32	112	112

d) Pour KCl on a $F_{hkl} = 0$ pour $h+k+l = 2n+1$

car $f_{K^+} = f_{Cl^-}$

tme pas traiter la question 3)

d/



= Structure

Réseau cfc

motif.
R (0,0,0)
X (½ ½ ½).

2_ Le facteur de ~~forme~~ diffusion atomique :

$f_a(\sin\theta/\lambda, \lambda)$ est un nbre complexe dont le module représente le nbre d'e- de l'atome participant à la diffusion du rayonnement incident dans la direction d'angle 2θ avec le faisceau incident :

$$f_a(\sin\theta/\lambda, \lambda) = f_0(\sin\theta/\lambda) + f'(\lambda) + i f''(\lambda).$$

f_0 : facteur de forme electronique de l'atome

f', f'' : termes de diffusion anomale. ils deviennent importants lorsque λ incidente est très proche du seuil d'absorpt. K, L, M... de l'atome

III A, B et C, cubique centré, cubique à faces centrées, et cubique diamant.

$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$, $2d_{h_0k_0l_0}\sin\theta_0 = n\lambda$

$$\frac{\sin^2\theta}{\sin^2\theta_0} = \left(\frac{d_{h_0k_0l_0}}{d_{hkl}}\right)^2 = \frac{h^2+k^2+l^2}{h_0^2+k_0^2+l_0^2}$$

On pose $N = h^2+k^2+l^2$ et $N_0 = h_0^2+k_0^2+l_0^2$

	1	2	3	4	5	6	8	9	10	11	12	13	14	16
e	100	110	111	200	210	211	220	221 300	310	311	222	320	321	400
s	1	2	3	4	5	6	8	9	10	11	12	13	14	16
c	—	1	—	2	—	3	4	—	5	—	6	—	7	$\frac{N}{N_0}$
c	—	—	1	1,33 $= \frac{4}{3} = \frac{N}{N_0}$	—	—	2,66 $\frac{8}{3} = \frac{N}{N_0}$	—	—	3,66	4	—	—	
			1				2,66			3,66				5,33

Facteur de structure

c.c $F_{hkl} = f\left(1+(-1)^{h+k+l}\right)$

$F_{hkl} \neq 0$ pour $h+k+l = 2n$

c.f.c $F_{hkl} = f\left(1+(-1)^{h+k}+(-1)^{h+l}+(-1)^{k+l}\right)$

$F_{hkl} \neq 0$ pour h, k et l de même parité.

Diamant, $F_{hkl} = F_{hkl}(\text{motif})\, F_{hkl}(\text{réseau})$

(000 et 1/4 1/4 1/4 motif) $= \underbrace{f\left(1+e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}\right)}_{\text{motif}} \underbrace{\left(1+(-1)^{h+k}+(-1)^{h+l}+(-1)^{k+l}\right)}_{\text{réseau c.f.c}}$

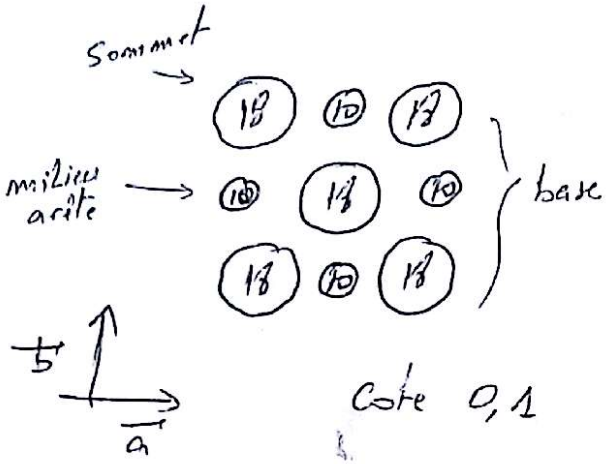
$F_{hkl} = 0$ pour $h+k+l = 4n+2$ (2, 6, 10 ....)

Pour le Diamant on a les réflexions interdites pour le c.f.c (réseau) et celles ~~pour~~ interdites par le motif i.e. à $h+k+l = 4n+2$

→ 200, 222, 442 ....

2-4 Representation des plans atomiques (100)

NaCl le R.D est cfc. avec Cl^- (000) ; F.C.
Na^+ (½½½) ; F.C.



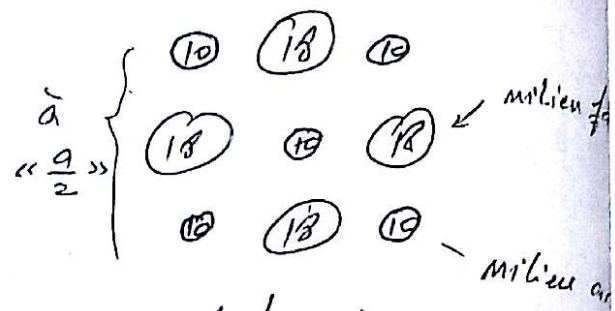
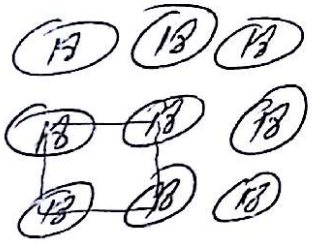
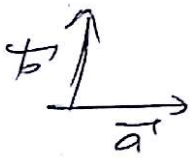


fig: plans atomiques // au plans reticulaire (100).

KCl



on voit que KCl est accidentel un C.S de paramètre moitié



Coté 0,1

Pr le KCl $\longrightarrow$ $F_{hkl} = 4\{f_K + f_{Cl}\}$ si $h+k+l = 2n$

et $= 4\{f_K - f_{Cl}\}$ si $h+k+l = 2n+1$.

111, 200, 220, 311, 222, 400, 331, 420, 422

les indices en rouge correspondent à des raies éteintes (elles sont (quasiment) nulles dans le cas de KCl.

on remarque que les indices restant sont tous multiples on peut choisir 1e maille C.S de parametre moitié

A			B			C		
$\theta°$	$\sin^2\theta$	N/N_0	$\theta°$	$\sin^2\theta$	N/N_0	$\theta°$	$\sin^2\theta$	N/N_0
21,20	0,1296	1	14,4	0,0618	1	21,4	0,133	1
24,6	0,173	1,337	20,05	0,1175	1,902	36,6	0,355	2,67
36	0,3455	2,666	25,04	0,179	2,953	44,5	0,491	3,69
43,65	0,476	3,676	29,8	0,246	3,994	57,5	0,711	5,34
cfc			cc			diamant		

2) paramètre de maille $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

* pour A $d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$, $\theta_{111} = 21,20°$

$2 d_{111} \sin 21,20 = \lambda$ $\lambda = 1,5$

$a_{cfc} = 3,6 A°$

* pour B $d_{110} = \frac{a}{\sqrt{2}}$ $\theta_{110} = 14,4°$

$2 d_{110} \sin 14,4 = \lambda \Rightarrow a_{cc} = 4,3 A°$

* pour C diamant

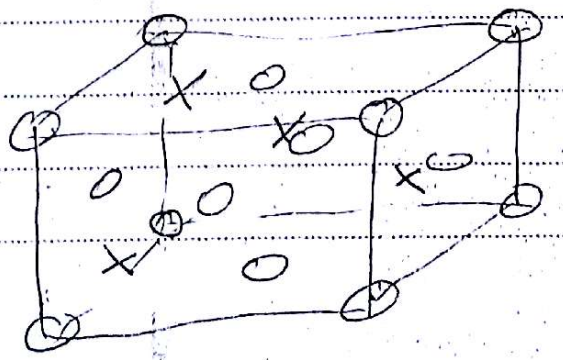
$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$, $\theta_{111} = 21,4°$

$a = 3,6 A°$

2) si on remplace la structure diamant par la structure blende

O S

X Zn



Pour la blende le réseau est c.f.c
le motif : une molecule ZnS
sur la figure S en 000 et Zn en 1/4 1/4 1/4

$$F_{hkl} = \left(f_S + f_{Zn}\, e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)}\right)\left(1+(-1)^{h+k}+(-1)^{h+l}+(-1)^{k+l}\right)$$

Pas d'extinction par le motif.
=> les même extinction que le c.f.c.
Les 4 premiers ~~[illegible]~~ noeuds de diffraction
111, 200, 220, 311.

$$\theta_{hkl} = \arcsin\left(\frac{\lambda}{2a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}\right)$$

hkl	111	200	220	311
$\sin\theta_{hkl}$	0,3648	0,421	0,596	0,698
θ_{hkl}	21,40	24,92	36,57	44,32

on observe une diffraction par 200 qui n'existe pas pour le diamant.

2014-2015

6

IIVERSITE IBN ZOHR
.CULTÉ DES SCIENCES
ÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
GADIR

ÉPREUVE DE PHYSIQUE DES MATERIAUX

Session de rattrapage

–SMP5–Durée : 1 heure 30minutes

- L'alliage Fe_3Al peut exister sous deux formes :

Phase A : maille cubique de côté a. Sites occupés $(0, 0, 0)$ et $(1/2,1/2,1/2)$. La répartition des atomes de fer et d'aluminium est aléatoire entre les deux sites.

Phase B : maille cubique de côté a. Un atome de fer occupe toujours le site $(0,0,0)$. Les autres atomes de fer et les atomes d'aluminium occupent de manière aléatoire les sites $(1/2,1/2,1/2)$.

1- Quels sont les réseaux de Bravais de chaque phase ?

Phase A : le réseau de Bravais est cubique centré car tous les sites sont équivalents.

Phase B : le réseau de Bravais est cubique simple car les sites (0,0,0) et (1/2,1/2,1/2) ne sont pas équivalents.

2- a) Si f_{Fe} et f_{Al} sont les facteurs de diffusion atomiques du fer et de l'aluminium quel facteur de diffusion atomique faut-il attribuer aux sites occupés de manière aléatoire dans les phases A et B ?

Phase A : $f_A = \dfrac{3f_{Fe} + f_{Al}}{4}$ ***pour tous les sites.***

Phase B : $f_B = \dfrac{f_{Fe} + f_{Al}}{2}$ ***pour les sites (1/2,1/2,1/2) Les atomes de fer et les atomes d'aluminium occupent de manière aléatoire les sites (1/2,1/2,1/2). (Fe et Al équiprobables)***

b) Calculer le facteur de structure relatif à chaque phase.

phase A : le facteur de structure est :

$$F_{hkl} = f_A\left(1 + e^{i\pi(h+k+l)}\right) = f_A\left(1 + (-1)^{(h+k+l)}\right)$$

Les règles d'extinction pour la phase A : $F_{hkl} = 0$ ***Lorsque*** $h + k + l = 2n + 1$ ***n entier***

$$F_{hkl} = 2f_A = \frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2} \text{ lorsque } h + k + l = 2n$$

12

phase B : le facteur de structure est :

$$F_{hkl} = \left(f_{Fe} + f_B e^{i\pi(h+k+l)} \right)$$

Pas d'extinction pour la phase B : $F_{hkl} \neq 0 \ \forall\ h, k \text{ et } l$.

$$F_{hkl} = (f_{Fe} + f_B) = \frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2} \text{ lorsque } h+k+l = 2n$$

$$\text{et } F_{hkl} = (f_{Fe} - f_B) = \left| \frac{f_{Fe} - f_{Al}}{2} \right| \text{ lorsque } h+k+l = 2n+1$$

3- On réalise des expériences de diffraction sur les deux phases avec le même dispositif. Établir le dépouillement théorique des spectres et présenter les résultats sous la forme d'un tableau dont les lignes contiendront les indices des raies et les facteurs de structure pour chaque phase. Arrêter le tableau à la raie *(hkl)* tels que $h^2 + k^2 + l^2 \leq 8$ de la phase *A*.

$h^2+k^2+l^2 \leq 8$	(hkl) Phase A	(hkl) Phase B	F_{hkl} Phase A	F_{hkl} Phase B
(100)	.....	(100)	.....	$\left\lvert \frac{f_{Fe} - f_{Al}}{2} \right\rvert$
(110)	(110)	(110)	$\frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2}$	$\frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2}$
(111)	.....	(111)	.....	$\left\lvert \frac{f_{Fe} - f_{Al}}{2} \right\rvert$
(200)	(200)	(200)	$\frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2}$	$\frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2}$
(210)	.....	(210)	.....	$\left\lvert \frac{f_{Fe} - f_{Al}}{2} \right\rvert$
(211)	(211)	(211)	$\frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2}$	$\frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2}$
(220)	(220)	(220)	$\frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2}$	$\frac{3f_{Fe} + f_{Al}}{2}$

Peut-on distinguer les deux phases par cette méthode ? Comment ?

Dans la phase ordonnée on trouve des raies supplémentaires de faibles intensités. Par diffraction on peut distinguer entre les deux phases. sur le diagramme correspondant à la phase B on a les pics de diffraction tels que $h+k+l = 2n+1$ *qui sont interdites pour la phase A*

TD 3 KAJBAJI - Arrakhiz -

NIVERSITE IBN ZOHR
ACULTÉ DES SCIENCES
ÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
GADIR

2016-2017

TD DE PHYSIQUE DES MATERIAUX
Phonons-Série n°3–SMP5-

Vibration d'une chaîne linéaire (*influence des seconds voisins*)

Soit un réseau linéaire de paramètre de maille "a" formé d'atomes identiques de masse "m". Chaque atome est oumis à une force de constante de rappel β_1 exercée par ses proches voisins et β_2 exercée par ses seconds voisins.

1- Etablir l'équation régissant le déplacement de l'atome n, soit u_n (par rapport à sa position d'équilibre) en onction de u_{n+1}, u_{n-1}, u_{n+2}, u_{n-2}.

2- Etablir la relation de dispersion des phonons longitudinaux, $\omega(k)$, à partir d'une solution en forme d'ondes lanes du type $u_n = u_0 \exp i(kx_n - \omega t) = u_0 \exp i(kna - \omega t)$. Dans cette relation, mettre en évidence le facteur orrectif $S(k)$, lié à l'influence des seconds voisins.

3- pour $\beta_2>0$ trouver la condition sur β_2 pour qu'il y'ait un maximum de $\omega(k)$ dans la première zone de Brillouin

4- pour $\beta_2<0$ (répulsion) trouver la condition sur β_2 pour que le système soit stable.

3- Indiquer l'allure de la courbe de dispersion en envisageant successivement les hypothèses $\beta_2>0$ et $\beta_2>0$. On racera aussi la courbe de référence $\beta_2=0$.

I Chaine avec deux atomes par maille

Le but de cet exercice est d'établir et discuter la relation de dispersion d'une chaine linéaire infinie dans aquelle le motif est constitué de deux atomes. On considère une chaine danslaquelle les atomes successifs ont ıne masse M_1 et M_2 ; seuls les plus proches voisinsinteragissent. Cette interaction est décrite par un ressort de constante K.

1- a- On note u_n et v_n les déplacements des masses M_1 et M_2 respectivement, et a la distance entre deux nasses consécutives de même type. Ecrire les équations dumouvement pour u_n et v_n.

On cherche des solutions de la forme : $u_n = u_0 \exp i(n\,ka - \omega t)$ et $v_n = v_0 \exp i(n\,ka - \omega t)$

b- Déterminer les relations de dispersion $\omega(k)$ des modes de vibration.

2-Considérer $M_1>M_2$. Représenter graphiquement $\omega(k)$ dans la première zone deBrillouin. Indiquer les valeurs de $\omega(k)$ pour $k = 0$ et pour k en bord de zone, pourles branches acoustique et optique.

3- Considérer $M_1>> M_2$. Trouver la forme que prend la relation de dispersion danscette limite pour les branches acoustique et optique.

4-On imagine maintenant que M_1 et M_2 tendent vers une même valeur M. Décrirecomment on passe d'une courbe de dispersion ayant deux branches à une courben'en comportant qu'une. Comparer le résultat avec celui obtenu pour une chaineavec un atome par maille.

III- On considère une chaîne de longueur L formée de N atomes identiques de masse m, séparés d'une distance a (avec $L>>a$). Les vibrations longitudinal des atomes de cette chaîne seront supposées pouvoir être décrites dans le cadre de l'approximation harmonique et en ne tenant compte que des interactions entre premiers voisins, avec une constante de rappel unique α.

1. a- Écrire l'équation du mouvement d'un atome au voisinage de sa position d'équilibre et en déduire la loi de dispersion $\omega(k)$. On supposera que le déplacement u_n du $n^{\text{ième}}$ atome s'écrit sous la forme : $u_n = A e^{i(kna-\alpha t)}$

b- Tracer les courbes de dispersion $\omega(k)$, on précisera les valeurs de $\omega(k)$ au centre et aux bords de la $1^{\text{ère}}$ zone de Brillouin .Pourquoi peut-on se contenter de tracer ces courbes de dispersion à l'intérieur de la $1^{\text{ère}}$ zone de Brillouin pour avoir toutes les valeurs possibles de $\omega(k)$?

c- En utilisant les conditions aux limites cycliques de Born et Von Karman, montrer que k ne peut prendre que des valeurs discrètes qu'on précisera.

2- On se place dans le cadre de l'approximation de Debye.

a- Définir de manière précise l'approximation de Debye en général.

b- Exprimer la densité de modes, $g(\omega)$, et vérifier que, dans ce cas de problème unidimensionnel, cette densité de modes est, en fait, indépendante de ω.

3- En déduire les expressions de

a- le vecteur d'onde de Debye, k_D,

b- la pulsation de Debye, ω_D,

c- la température de Debye, θ_D.

4- Écrire l'expression de l'énergie interne, U, du gaz de phonons.

5- Exprimer la chaleur spécifique, C_v, de cette chaîne d'atomes (on posera $\hbar$ la constante réduite de Planck, k_B est la constante de Boltzmann et T désigne la température). On exprimera C_v en particulier dans les deux cas basse température ($T \rightarrow 0$) et haute température.

On donne : $\int_0^\infty \frac{x dx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}$

IV-Capacité calorifique d'un réseau plan.

Considérons les vibrations transversales d'un réseau carré plan, formé de rangée et de colonnes d'atomes identiques. Appelons $u_{\ell,m}$ le déplacement perpendiculaire au plan du réseau de l'atome de la ℓ^{ieme} colonne et de la m^{ieme} ligne. La masse de chaque atome est M. On ne considérera que les interactions entre premiers voisins et on désignera par C la constante de force et a la distance interatomique.

1- a-Donner l'équation du mouvement.

b- Supposons que les solutions sont de la forme : $u_{\ell,m} = u(0)\exp[i(\ell k_x a + m k_y a - \omega t)]$ établir la relation de dispersion $\omega^2 = f(k)$.

c- Montrer que la région de l'espace des k pour laquelle il existe des solutions indépendantes est la première zone de Brillouin.

d- Représenter les courbes ω en fonction de k dans la direction *[10]* et dans la direction *[11]*. Préciser les valeurs de ω au bord et au centre de la zone de Brillouin.

2- Le cristal a la forme d'un carré de côté $L=na$

a- En utilisant les conditions aux limites périodiques (BVK), montrer que les vecteurs d'ondes k_x et k_y ne peuvent prendre que des valeurs discrètes.

b- Déterminer la densité des modes de vibrations $g(k)$ pour : $|\vec{k}| < \frac{\pi}{a}$ et $\frac{\pi}{a} < |\vec{k}| < \frac{\pi\sqrt{2}}{a}$

c-Calculer dans l'approximation de Debye la densité des modes $g(\omega)$, la fréquence de coupure ω_D et le rayon du disque de Debye k_D.

d- Calculer dans cette approximation l'énergie interne et la capacité calorifique des vibrations transversales du système. On exprimera la capacité calorifique en fonction de la température de Debye θ_D.

On donne : $\int \frac{x^2 dx}{e^x - 1} = 2{,}4$

V-Chaleur spécifique d'une chaine avec deux atomes par maille

On considère une chaine de longueur L formée de deux types d'atomes. La distance entre deux atomes identiques est égale à a et le nombre total d'atomes est 2N. Nous allonsévaluer la chaleur spécifique de ce système en combinant les modèles de Debye et d'Einstein.

1-Décrire la relation de dispersion des phonons acoustiques longitudinaux par lemodèle de Debye et la dispersion des phonons optiques longitudinaux par le modèle d'Einstein. Trouver les expressions pour k_D et ω_D. Faire une représentation graphique des courbes de dispersion modélisées dans la première zone de Brillouin.

2- Exprimer la densité de modes $g_{ac}(\omega)$ pour la branche acoustique. Que se passe-t-il pour $g_{op}(\omega)$ relatif à la branche optique ?

3- En utilisant les résultats du point précèdent, écrire l'expression de la densité d'énergie interne $u=u_{ac}+u_{op}$ du réseau.

4- Etablir l'expression de la chaleur spécifiqueà haute et à basse température. (Calculer séparément la contribution de la branche acoustique et celle de la branche optique).

5- Application numérique : Evaluer les températures de Debye θ_D et d'Einstein θ_E. Calculer la contribution à la chaleur spécifique à T = 20 K par paire d'atomes de chacune des branches. Commenter le résultat. $a = 6$ °A, $v_s = 8800$ m/s, $\omega_E = 6.10^{13} rad/s$.

On donne : $\int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6}$

$U_{har} = \frac{1}{2}\sum_n C(u_n - u_{n-1})$ AGADIR

$= \frac{1}{2} C(u_n - u_{n-1})^2 + \frac{1}{2} C(u_{n+1} - u_n)^2$

ERSITÉ IBN ZOHR

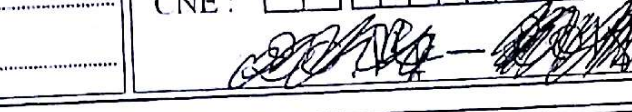
FACULTÉ DES SCIENCES

amen : $F = -\frac{\partial U_{hm}}{\partial u_n} =$	$C(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) = m\ddot{u}_n$ Agadir le :
:	Nom et Prénom :
tre :	Né (e) le : a :
e :	CNE : CIN :
re :	

de l'enseignant	Observation de l'enseignant
CP Physique des matériaux	Solide Série 3

I Vibration d'une chaine, influence des seconds voisins

1)



ie
elle
nonit

$$U_{harm} = \frac{1}{2}\left(\sum_n \beta_1 (u_n - u_{n+1})^2 + \sum_n \beta_2 (u_n - u_{n+2})^2\right)$$

$$m\ddot{u}_n = \beta_1(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \beta_2(u_{n+2} + u_{n-2} - 2u_n)$$

2) $u_n = u_0 \exp + i(kx_n - \omega t) = u_0 \exp i(kna - \omega t)$

$$-m\omega^2 u_n = \left[\beta_1(e^{ika} + e^{-ika} - 2) + \beta_2(e^{i2ka} + e^{-i2ka} - 2)\right] u_n$$

$$m\omega^2 = \left[2\beta_1(\cos ka - 1) + \beta_2(\cos 2ka - 1)\right]$$

$$\boxed{\omega^2 = \frac{4\beta_1}{m}\sin^2\frac{ka}{2} + \frac{4\beta_2}{m}\sin^2 ka} \qquad \left(\sin^2 a = \frac{1-\cos 2a}{2}\right)$$

$S^2(k) = \frac{4\beta_2}{m}\sin^2 ka$: terme correctif dû à l'action des seconds voisins

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta_1}{m}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|\left[1 + \frac{\beta_2}{\beta_1}\frac{\sin^2 ka}{\sin^2\frac{ka}{2}}\right]^{1/2}$$

$$= 2\sqrt{\frac{\beta_1}{m}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|\left[1 + 4\frac{\beta_2}{\beta_1}\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)\right]^{1/2}$$

$\sin 2a = 2\sin a\cos a$

15

Dans un solide on a : $|U_m(t)| \ll$ la distance interatomique à l'equilibre ceci est vrai si $T(\text{solide}) < T(\text{fusion du sol}$

Les atomes d'un cristal ne sont pas fixes. Sous l'effet de la T° ou d'une excitation electromagnet. ils oscillent p/p à une position d'equilibre (stable). Si un noyau se deplace, il en resulte une modification du nuage electronique qui est due à une effet ecran. Si l'amplitudes d'oscillations sont faibles, on dit qu'elles sont harmoniques càd que les forces sont proportionnelles aux deplacements. (loi de Hooke)

<u>PFD</u> $\quad F = ma = m\dfrac{d^2 U_m}{dt^2}$.

$F = c(U_{m+1}^{(t)} - U_m^{(t)}) + c(U_{m-1}^{(t)} - U_m)$. où c est la cst du ressort

$= m\dfrac{d^2 U_m}{dt^2} = c(U_{m+1} + U_{m-1} - 2U_m)$ $\quad$ Eqt° 2ème degré loi de Hooke.

soit $U_m = A e^{i(\omega t - Kma)}$ $\quad$ A^{e} solut° de l'eqt°.

$\Longrightarrow U_{m+p} = A e^{i(\omega t - Kma)} \cdot e^{-iKpa}$.

<u>Energie potentielle</u>.

$$V = \frac{1}{2}\sum c(U_{m+1} - U_m)^2.$$

et

$F = -\dfrac{\partial V}{\partial U_m}$ $\quad$ force s'exerçant sur l'atome "m".

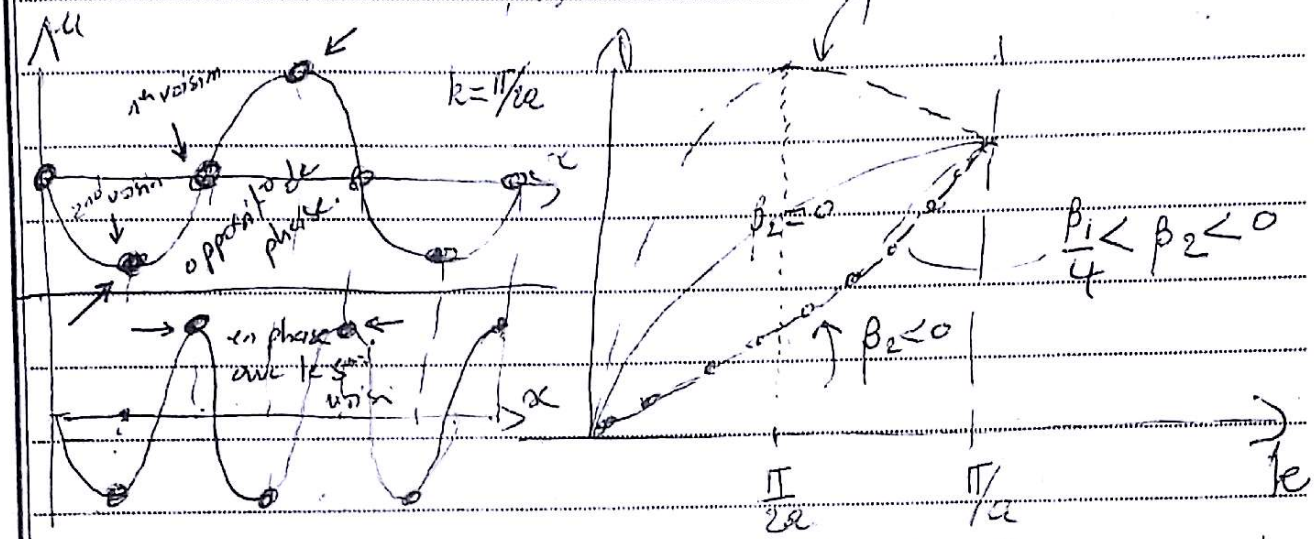
$= m\ddot{U}_m$.

$$\omega = 2\left(\frac{\beta_1}{m}\right)^{1/2} \left|\sin\frac{ka}{2}\right| \left[1+4\left(\frac{\beta_2}{\beta_1}\right)\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)\right]^{1/2}$$

3) Pour $k \ll \frac{\pi}{a}$: $\sin\frac{ka}{2} \sim \frac{ka}{2}$ et $\cos\frac{ka}{2} \sim 1$

$$\omega = \sqrt{\frac{\beta_1 a^2}{m}}\left(1+4\frac{\beta_2}{\beta_1}\right)^{1/2} k = v_s k \qquad v_s = \left.\frac{\partial\omega}{\partial k}\right|_{k\to 0}$$

$$v_s = \sqrt{\frac{\beta_1}{m}a^2}\left(1+4\frac{\beta_2}{\beta_1}\right)^{1/2}$$



3') * Pour $\beta_2 = 0$ on retrouve le résultat de la chaîne monoatomique avec influence du 1er voisin.

* Pour $\beta_2 > 0$, les seconds voisins ont une action qui s'ajoute aux forces de rappel exercées par les premiers voisins. Leurs prise en compte accroît la valeur de la vitesse du son. Leurs influence est maximale pour $k = \frac{\pi}{2a}$ car ils sont en opposition de phase avec l'atome considéré. Leurs action s'annule en $k = \frac{\pi}{a}$ car il sont alors en phase avec ces mêmes atomes.

4') * Pour $\beta_2 < 0$ (cas d'une rangée d'ions alternés), les seconds voisins exercent des forces de répulsion. Leurs influence est inverse de l'influence décrite ci-dessus. La situation n'est stable que si les forces d'attraction l'emportent sur les forces de répulsion : $\beta_2 > -\frac{\beta_1}{4}$ si ce n'est pas le cas, le cristal se modifie par changement de phase (le système n'est stable que si $\omega^2 > 0$ pour k dans la 1re zone de Brillouin).

2- $u_m = u_0 e^{i}$

$$\frac{du_m}{dt} = (-i\omega)\, u_0\, e^{i(kma-\omega t)} = (-i\omega) u_m$$

$$\frac{d^2u_m}{dt} = (-i\omega)(-i\omega)\, u_0\, e^{i(kma-\omega t)} = -\omega^2 u_m$$

$$\Rightarrow \quad m\frac{d^2u_m}{dt} = -m\omega^2 u_m = \left[\beta_1\left(e^{ika}+e^{-ika}-2\right)+\beta_2\left(e^{2ika}+e^{-2ika}-2\right)\right]$$

Car
$$\begin{cases} u_{m+1} = u_0\, e^{i(kma-\omega t)}\, e^{ika} \\ u_{m-1} = u_0\, e^{i(kma-\omega t)}\, e^{-ika} \\ u_{m+2} = u_0\, e^{i(kma-\omega t)}\, e^{2ika} \\ u_{m-2} = u_0\, e^{i(kma-\omega t)}\, e^{-2ika} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad -m\omega^2 = \beta_1\left(e^{ika}+e^{-ika}-2\right)+\beta_2\left(e^{2ika}+e^{-2ika}-2\right).$$

$$= \beta_1\left(2\cos ka-2\right)+\beta_2\left(2\cos 2ka-2\right) \rightarrow \cos\theta =$$

$$= 2\left(\beta_1\left(\cos ka-1\right)+\beta_2\left(\cos 2ka-1\right)\right)$$

$$= 2\left(-2\beta_1\sin^2\frac{ka}{2}-2\beta_2\sin^2 ka\right) \qquad \frac{1-\cos 2\theta}{2} =$$

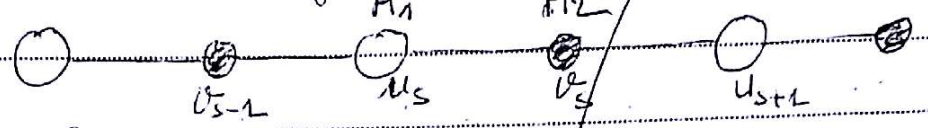
$$-m\omega^2 = -4\beta_1\sin^2 ka/2 - 4\beta_2\sin^2 ka.$$

$$\omega^2 = \frac{4\beta_1}{m}\sin^2 ka/2 + \underbrace{\frac{4\beta_2}{m}\sin^2 ka}_{S^2(k)}.$$

$\beta_2 = -\frac{\beta_1}{4}$ = le cristal se modifie pour atteindre un état plus stable
(exemple constitution d'un motif formé par une molécule diatomique) [système stable pour $\beta_2 > -\frac{\beta_1}{4}$]

II Capacité calorifique d'une chaîne linéaire

a)



$$m_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = c\left(v_{s-1} + v_s - 2u_s\right)$$

$$m_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = c\left(u_s + u_{s+1} - 2v_s\right)$$

b) $u_s = u_0 \exp i(ska - \omega t)$, $v_s = v_0 \exp i(ska - \omega t)$

$$-m_1\omega^2 u_s = c\left(v_s e^{-ika} + v_s - 2u_s\right)$$

$$-m_2\omega^2 v_s = c\left(u_s + u_s e^{ika} - 2v_s\right)$$

$$-\omega^2 m_1 u_0 = c\, v_0\left(1 + e^{-ika}\right) - 2c\, u_0$$

$$-\omega^2 m_2 v_0 = c\, u_0\left(e^{ika} + 1\right) - 2c\, v_0$$

équation linéaires homogènes admettent une solution non triviale si et seulement si le déterminant des coefficients de la structure plane

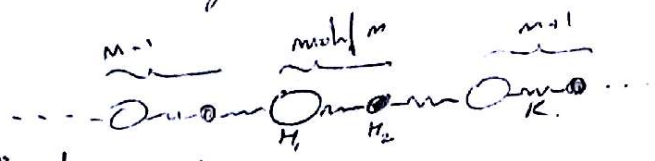
$$\begin{vmatrix} 2c - m_1\omega^2 & -c(1+e^{-ika}) \\ -c(1+e^{ika}) & 2c - m_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$m_1 m_2 \omega^4 - 2c(m_1 + m_2)\omega^2 + 2c^2(1 - \cos ka) = 0$$

$$\omega^2 = c\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \pm c\sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)^2 - \frac{2(1-\cos ka)}{m_1 m_2}}$$

$$= c\left[\frac{1}{\mu} \pm \frac{1}{\mu}\left(1 - \frac{4\mu^2}{m_1 m_2}\sin^2\frac{ka}{2}\right)^{1/2}\right]$$

Vibration longitudinales d'une chaine diatomique.



1/ Eqt° du mvt :

$$M_1 \frac{d^2 u_n}{dt} = K(V_m - U_m) + K(V_{m-1} - U_m)$$
$$= K(V_m + V_{m-1} - 2U_m) \quad (1)$$

$$M_2 \frac{d^2 V_m}{dt} = K(U_{m+1} - V_m) + K(U_m - V_m)$$
$$= K(U_{m+1} - 2V_m + U_m) \quad (2)$$

/ on cherche des solut° sous la forme d'ondes progressives :

$$\begin{cases} U_m = U_0 e^{i(Kma - \omega t)} & (3) \\ V_n = V_0 e^{i(Kna - \omega t)} & (4) \end{cases}$$

Reportons les expressions (3) et (4) dans l'eqt° de mvt (1) et (2)

$$\begin{cases} (2K - M_1\omega^2) U_0 - (K + Ke^{-iKa}) V_0 = 0 \\ -(K + Ke^{iKa}) U_0 + (2K - M_2\omega^2) V_0 = 0. \end{cases}$$

Ce syst a des solutions si le determinant est nul :

$$\begin{vmatrix} 2K - M_1\omega^2 & -(K + Ke^{-iKa}) \\ -(K + Ke^{iKa}) & 2K - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0.$$

soit $M_1 M_2 \omega^4 - (M_1 + M_2) 2K\omega^2 + 4K^2 - (2K^2 + 2K^2 \cos Ka) = 0$

$$M_1 M_2 \omega^4 - (M_1 + M_2) 2K\omega^2 + 2K^2(1 - \cos Ka) = 0.$$

C'est une eqt° du 2nd ordre avec $x = \omega^2$.

$a = M_1 M_2$; $b = -2K(M_1 + M_2)$; $c = 4K^2 - 2K^2(1 + \cos Ka)$.

$\Delta = 4K^2(M_1 + M_2)^2 - 4M_1M_2(4K^2 - 2K^2(1 + \cos Ka))$.

II Chaîne avec deux atomes par maille

(a) Equations du mouvement :

$$M_1\ddot{u}_n = K(v_n - 2u_n + v_{n-1}) \quad (1)$$
$$M_2\ddot{v}_n = K(u_{n+1} - 2v_n + u_n) \quad (2)$$

(b) On cherche des modes propres du type

$$u_n(t) = a_k e^{i(kna-\omega t)}$$
$$v_n(t) = b_k e^{i(kna+ka/2-\omega t)} = v_0 e^{i(kna-\omega t)}$$

$\vec{k}\,\vec{r}$

$r = na + \frac{a}{2}$

Cette notation a l'avantage que a_k/b_k est un nombre réel.
En substituant dans (1) et (2) on trouve

$$(-\omega^2 + 2\frac{K}{M_1})\,a_k - 2\frac{K}{M_1}\cos(\frac{ka}{2})\,b_k = 0 \quad (3)$$
$$-2\frac{K}{M_2}\cos(\frac{ka}{2})\,a_k + (-\omega^2 + 2\frac{K}{M_2})\,b_k = 0 \quad (4)$$

$Ma \quad Ma + \frac{a}{2}$

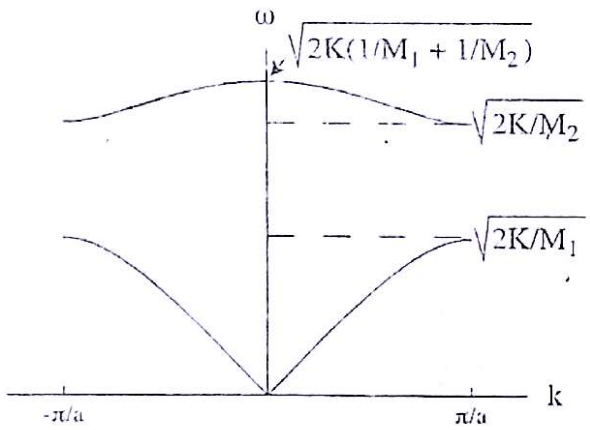
Pour les solutions non triviales :

$$(-\omega^2 + 2\frac{K}{M_1})(-\omega^2 + 2\frac{K}{M_2}) - 4\frac{K^2}{M_1 M_2}\cos^2(\frac{ka}{2}) = 0$$

soit

$$\Longrightarrow \boxed{\omega^2 = K\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \pm K\sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2(\frac{ka}{2})}} \quad (5)$$

(c) Si $M_1 > M_2$,



$\underline{\Delta > 0} \Rightarrow$ 2 solutions x_1 et x_2.

$$x_1 = -\frac{b + \sqrt{\Delta}}{2a} = \omega_+^2 \quad ; \quad x_2 = -\frac{b - \sqrt{\Delta}}{2a} = \omega_-^2.$$

$$\Rightarrow \omega_\pm^2 = \frac{2K(M_1+M_2)}{2M_1M_2} \pm \sqrt{\frac{4K^2(M_1+M_2)^2 - 4M_1M_2\left(4K^2 - 2K^2(1+\cos ka)\right)}{4M_1^2M_2^2}}$$

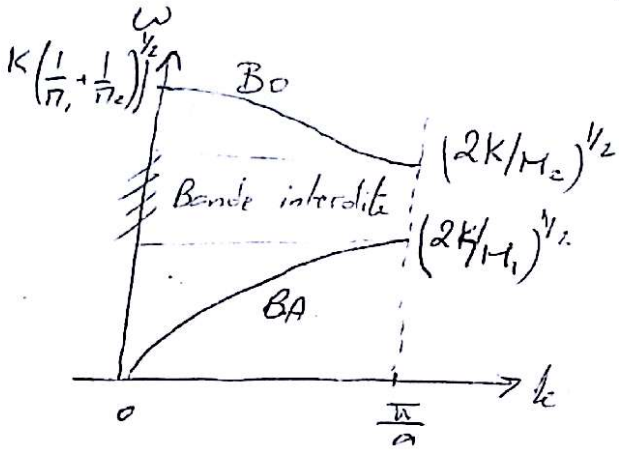
$$= K\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right) \pm \sqrt{\cancel{4}K^2\left[\frac{(M_1+M_2)^2 - 4M_1M_2\left(1 - \frac{1+\cos ka}{2}\right)}{\cancel{4}M_1^2M_2^2}\right]}$$

$\cos^2\theta = \frac{1+\cos 2\theta}{2}$

$$\omega_\pm^2 = K\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm K\sqrt{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1M_2}\left(1-\cos^2\frac{ka}{2}\right)}$$

$$= K\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm K\sqrt{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1M_2}\sin^2\frac{ka}{2}}$$

ω^2 est paire et de période $\frac{2\pi}{a}$. On peut se contenter de le tracer sur 1e demie-zone de Brillouine.



ω_- est la bande acoustique (elle s'annule linéairement en k)
ω_+ est la branche optique parabolique près de $K=0$.

Analyse des Branches au centre de la Z.B.

au centre $k \to 0$; $ka \ll 1$; $\lambda \gg a$ (grandes long d'onde).

on a $\sin ka \sim ka$

<u>Cas de la B.O</u> : on pose $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}$.

$$\omega_+^2 = K\left[\frac{1}{\mu}+\frac{1}{\mu}\left(1-\frac{4\mu^2}{M_1M_2}\sin^2\frac{ka}{2}\right)^{1/2}\right] \dots \to \sin x \sim x$$

$$= K\left[\frac{1}{\mu}+\frac{1}{\mu}\left(1-\frac{4\mu^2}{M_1M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2\right)^{1/2}\right]$$

$$= K\left[\frac{1}{\mu}+\frac{1}{\mu}\left(1-\frac{1}{2}\frac{4\mu^2}{M_1M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2\right)\right] \leftarrow \text{DL } \sqrt{1+x} \underset{0}{\sim} 1+\frac{x}{2}$$

$$= K\left[\frac{2}{\mu_1} - \frac{4\mu}{2M_1M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2\right]$$

$$= 2K\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) - \frac{K\mu}{2M_1M_2}(ka)^2$$

$$\omega_+^* = \sqrt{2K\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)}.$$

N6'

(d) $M_1 \gg M_2$

$$\begin{aligned}
\omega^2 &= K\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm K\sqrt{\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)^2 - \frac{4}{M_1 M_2}\sin^2(\frac{ka}{2})} \\
&= K\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right) \pm \frac{K}{M_2}\sqrt{\left(\frac{M_2}{M_1}+1\right)^2 - 4\frac{M_2}{M_1}\sin^2(\frac{ka}{2})} \\
&\cong K\left(\frac{1}{M_2}\right) \pm \frac{K}{M_2}\sqrt{1-4\frac{M_2}{M_1}\sin^2(\frac{ka}{2})} \\
&\cong \frac{K}{M_2} \pm \frac{K}{M_2}\left(1-2\frac{M_2}{M_1}\sin^2(\frac{ka}{2})\right) \qquad \text{DL } \sqrt{1+x} \underset{0}{\sim} 1+\frac{x}{2}.
\end{aligned} \tag{6}$$

Branche acoustique (signe $-$ dans l'équation (6))

$$\omega^2 \cong 2\frac{K}{M_1}\sin^2(\frac{ka}{2}) \Longrightarrow \boxed{\omega_A \cong 2\sqrt{\frac{K}{2M_1}}\left|\sin(\frac{ka}{2})\right|}$$

C'est la relation de dispersion que l'on trouve pour une chaîne linéaire de période a et de constante de couplage $K' = K/2$. En fait, ce mode est entièrement déterminé par le mouvement des atomes lourds, qui sont reliés entre eux par deux ressorts de constante K (ou un ressort de constante $K/2$). Les atomes légers restent toujours au milieu entre leurs voisins : $u_{n+1} - v_n \equiv v_n - u_n$.

Branche optique (signe $+$ dans l'équation (6))

$$\omega^2 \cong 2\frac{K}{M_2} + 2\frac{K}{M_1}\sin^2(\frac{ka}{2}) \Longrightarrow \boxed{\omega_O \cong \sqrt{\frac{2K}{M_2}}}$$

Cette branche devient alors plate. De plus (résultant de (3) et (4))

$$\frac{a_k}{b_k} = \frac{-\omega^2 M_2 + 2K}{2K\cos(\frac{ka}{2})} \to 0 \quad \text{les atomes lourds ne bougent plus.}$$

En fait les vibrations optiques correspondent maintenant à des vibrations indépendantes de chaque atome de masse M_2 attaché à deux parois par l'intermédiaire de deux ressorts.

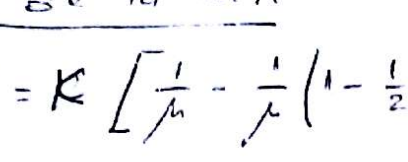
(e) Pour $M_1 > M_2$, on obtient les courbes représentées sur la figure ci-dessous. Les pointillés symbolisent le fait que le vecteur d'onde des vibrations k n'est défini qu'à un vecteur du réseau réciproque $n\frac{2\pi}{a}$ près.

Quand $M_1, M_2 \to M$, l'intervalle des fréquences interdites se resserre ; la branche acoustique (première zone de Brillouin) tend à se prolonger par la partie de la branche optique située dans la deuxième zone de Brillouin.

Quand $M_1 = M_2 = M$, la partie de cette branche initialement optique est désormais acoustique et également située dans la première zone de Brillouin, car la maille du réseau est devenue $\frac{a}{2}$ (bord de zone : $\frac{2\pi}{a}$ et non $\frac{\pi}{a}$ (cf. figure ci-dessous).

Pour $k = \pi/a$ bord de zone.

$\Rightarrow \frac{U_0}{V_0} = -\frac{M_2}{M_1}$ les deux atomes sont en opposit° de phase.



Bo longitudinale.

Bo transversale.

<u>Cas de la B.A</u>

$$\omega_-^2 = K\left[\frac{1}{\mu} - \frac{1}{\mu}\left(1 - \frac{1}{2}\frac{4\mu^2}{M_1M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2\right)\right].$$

$$= \frac{K}{\mu} \cdot \frac{1}{2}\frac{4\mu^2}{M_1M_2}\left(\frac{ka}{2}\right)^2$$

$$= \frac{K}{2}\frac{\mu}{M_1M_2}(ka)^2 = \frac{K}{2}\left(\frac{k^2a^2}{M_1+M_2}\right).$$

d'où $\omega_- = \sqrt{\frac{K}{2(M_1+M_2)}}\, ka = v_s k$.

Ainsi la vitesse de groupe de ces modes est $v_g = \frac{d\omega}{dk} = v_s$.

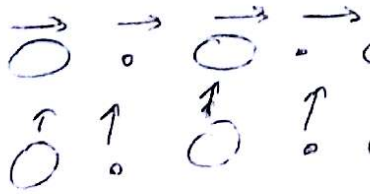
elle correspond à la vitesse du son dans un milieu continu.

de ce fait, pour les grandes longueurs d'ondes $\lambda \gg a$. ($k \sim 0$ centre la Z.B).

le cristal se comporte comme un milieu continus vis à vis de l'onde acoustique.

$$\Rightarrow \frac{U_0}{V_0} = \frac{K(1+e^{-ika})}{2K - \frac{M_1K}{2(M_1+M_2)}k^2a^2} \quad \underset{\sim}{k=0}$$

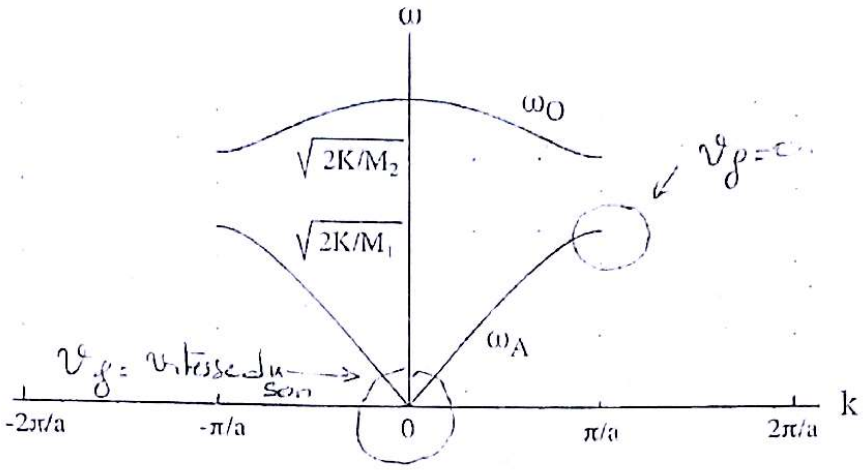
les deux atomes vibrent en phase.



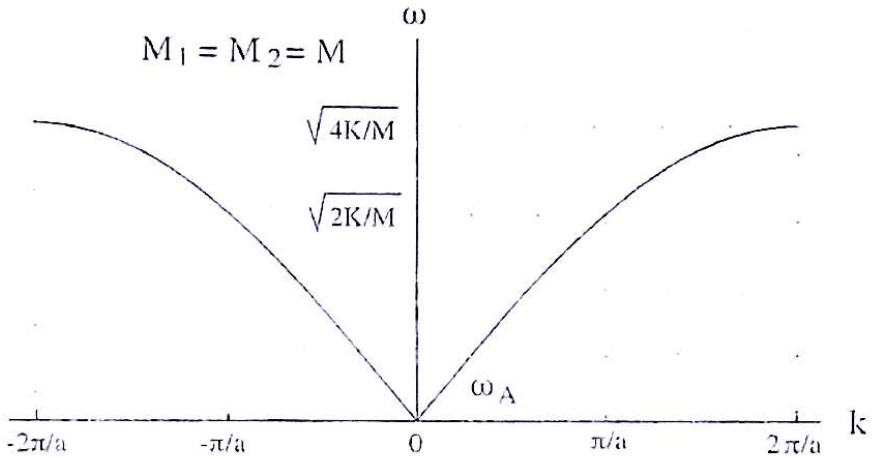
LA

TA.

$M_1 > M_2$



$M_1 = M_2 = M$



$M_1 = M_2 = M$

$$\omega^2 = \frac{2K}{M} + \pm K\sqrt{\left(\frac{2}{M}\right)^2 - \frac{4}{M^2}\sin^2(\frac{ka}{2})} = \frac{2K}{M}\left(1 \pm \cos(\frac{ka}{2})\right)$$

$\frac{1-\cos 2\theta}{2} = S$

La branche acoustique $(-)$ donne

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

ce qui correspond au résultat pour une chaîne monoatomique de période $a/2$.
Le signe $(+)$ donne

$\frac{1+\cos 2\theta}{2} = \cos^2\theta$

$$\omega^2 = \frac{2K}{M}\left(1 + \cos(\frac{ka}{2})\right) = \frac{4K}{M}\cos^2(\frac{ka}{4}) \rightarrow \omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}}\left|\cos(\frac{ka}{4})\right|$$

ce qui correspond à la partie de la branche acoustique entre $\frac{\pi}{a}$ et $\frac{2\pi}{a}$ "rabattue" entre 0 e et $\frac{\pi}{a}$.

20

Analyse des Branches aux bords de la 1ère Z.B.

au bord de la ZB on a $k = \pm\frac{\pi}{a}$, $\cos ka = \cos\pi = -1$

On revient à l'eqt° : $M_1M_2\omega^4 - 2K(M_1+M_2)\omega^2 + 2K^2(1-\cos ka) = 0$.

$$\omega_\pm^2 = \frac{K(M_1+M_2) \pm \sqrt{K^2(M_1+M_2)^2 - 4K^2M_1M_2}}{M_1M_2}$$

$$= \frac{K(M_1+M_2) \pm K(M_1-M_2)}{M_1M_2}$$

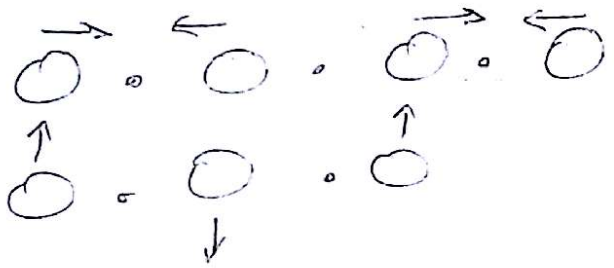
d'où $\omega_+^2 = \frac{2K}{M_2}$ et $\omega_-^2 = \frac{2K}{M_1}$.

Pr BA

$$-K(1+\underbrace{e^{\pm i\pi}}_{-1})u_0 + 2K\left(1-\frac{M_2}{M_1}\right)v_0 = 0.$$

$\Rightarrow v_0 = 0$ les atomes lepus sont fixes.

$\frac{u_{n+1}}{u_n} = -1$ les atomes de masses M_1 de deux cotés voisins vibrent en opposit° de phases



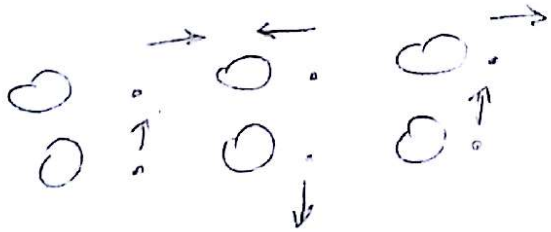
LA.

TA.

Pr BO $\omega_+^2 = \frac{2K}{M_2}$

$2K\left(-\frac{M_1}{M_2}+1\right)u_0 = 0 \Rightarrow u_0 = 0$ les atomes lourds sont fixes

et $\frac{u_{n+1}}{u_n} = -1$ les atomes de masses M_2 de deux motifs voisins vibrent en opposit° de phase.



L.O

T.O

III. a- Écrire l'équation du mouvement d'un atome au voisinage de sa position d'équilibre et en déduire la loi de dispersion $\omega(k)$. On supposera que le déplacement u_n du $n^{\text{ième}}$ atome s'écrit sous la forme : $u_n = Ae^{i(kna-\omega t)}$

Re : -L'équation du mouvement : $m\ddot{u}_n = \alpha(u_{n-1} + u_{n+1} - 2u_n)$

On cherche des solutions de la forme $u_n = Ae^{i(kna-\omega t)}$

$-m\omega^2 A = \alpha(Ae^{-ika} + Ae^{+ika} + 2A)$.

-La loi de dispersion : $\omega^2 = \frac{4\alpha}{m}\sin^2\frac{ka}{2}$ $\qquad \omega = \sqrt{\frac{4\alpha}{m}}\left|\sin\frac{ka}{2}\right|$

b-Tracer les courbes de dispersion $\omega(k)$, on précisera les valeurs de $\omega(k)$ au centre et aux bords de la 1ère zone de Brillouin.Pourquoi peut-on se contenter de tracer ces courbes de dispersion à l'intérieur de la 1ère zone de Brillouin pour avoir toutes les valeurs possibles de $\omega(k)$?

Re : $\omega(k) = \omega(k \pm n\frac{2\pi}{a})$ De façon générale on peut toujours se ramener à la 1ere zone de Brillouin en translatant le vecteur d'onde k d'un vecteur du réseau réciproque, sans modifier la pulsation.

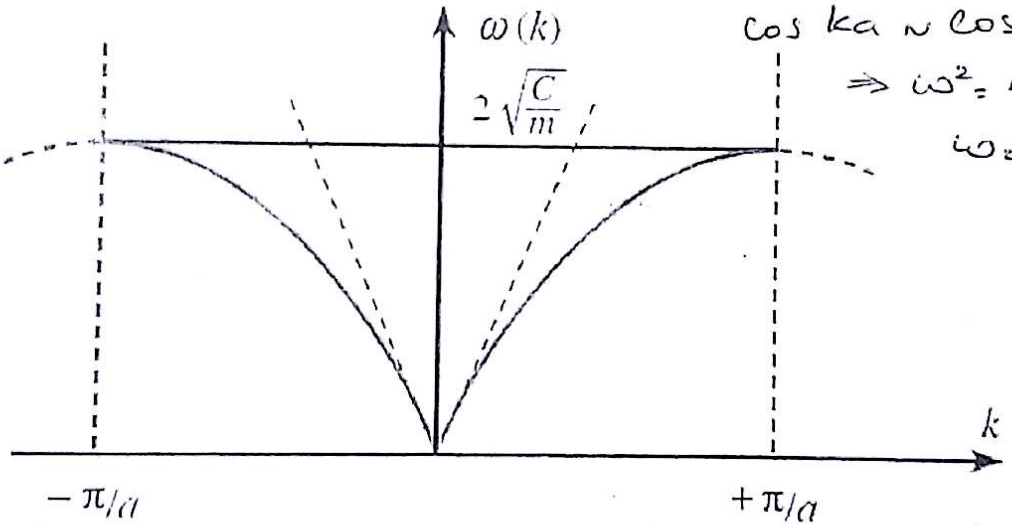
- Pour $k \ll \pi/a$: Lorsque k est faible par rapport $\pi/a\omega$ est linéaire en k : $\omega = \left(\sqrt{\frac{\alpha}{m}}a\right)k$ .C'est le même comportement que pour une onde élastique se propageant dans un milieu continu (continuum). La vitesse de phase et la vitesse de groupe sontégales à v_s. $\qquad \omega = v_s k$ avec $v_s = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\,a$.

- Pour $k = \pm\pi/a$ on a : $\omega = 2\sqrt{\frac{\alpha}{m}}$. $\quad$ (Voir $-m\omega^2 = \beta_1(2\cos ka - 2)$.

$\cos ka \sim \cos\pi = -1$.

$\Rightarrow \omega^2 = 4\beta_1/m$.

$\omega = 2\sqrt{\beta_1/m}$.



Courbe de dispersion pour une chaine linéaire en tenant compte uniquement d'interactions entre les plus proches voisins. La ligne en trait interrompus correspondrait à un milieu continu $\omega = v_s k$.

c- En utilisant les conditions aux limites cycliques de Born et Von Karman, montrer que les vecteurs d'ondes $k$ne peuvent prendre que des valeurs discrètes qu'on précisera.

si k extérieur à la 1ère Z.B

on peut lui associer un vecteur d'onde k' défini par $k' = k - \frac{2\pi n}{a}$. $\in$ à la 1ère Z.B.

$$\frac{U_{n+1}}{U_n} = e^{ika} = e^{i2n\pi} e^{i(\underbrace{ka - 2\pi n}_{k'a})}$$

$$= e^{ik'a}. \quad \text{car } e^{2i\pi n} = 1.$$

$\Rightarrow$ le déplacement peut tjr être décrit par un vecteur d'onde situé ds la 1ère Z.B.

$\frac{2\pi}{a}$ est un vecteur du R.R.

Re : les conditions aux limites cycliques de Born et Von Karman : $u_n = u_{n+N}$

$e^{ikNa} = 1 \quad \Rightarrow \quad k = p\frac{2\pi}{L}$ $avec\ p \in Z$, le nombre de valeurs possibles de k est N (N modes propres).

2- On se place dans le cadre de l'approximation de Debye.

a- Définir de manière précise l'approximation de Debye en général.

Re : Dans le cadre de l'approximation de Debye :

-On remplace la branche du spectre de vibration par une droite correspondant à un milieu continu $\omega = v_s k$.

-On remplace la 1ere zone de Brillouin par une zone de rayon k_D, choisi de telle sorte qu'elle contient le même nombre N de vecteurs d'onde possibles que la 1ere zone de Brillouin.

b-Exprimer la densité de modes, $g(\omega)$, et vérifier que, dans ce cas de problème unidimensionnel, cette densité de modes est, en fait, indépendante de ω.

Re : densité de modes : $g(k)dk = \frac{dk}{2\pi/L}$;

$2g(k)dk = g(\omega)d\omega$ Le chiffre 2 dans cette expression est pour tenir compte de k et $-k$ qui ont le même ω.

$$g(\omega) = 2g(k)\frac{dk}{d\omega} = \frac{L}{\pi v_s} = \frac{Na}{\pi v_s}; \quad \omega = v_s k$$

(On peut prendre directement $g(k)=L/\pi$ avec $k>0$ dans ce cas $g(k)dk = g(\omega)d\omega$).

3- En déduire les expressions de (i) le vecteur d'onde de Debye, k_D, (ii) la pulsation de Debye ω_D, et (iii) la température de Debye, θ_D.

Re : (i) le vecteur d'onde de Debye : $k_D = \frac{\pi}{a} = \frac{\omega_D}{v_s}$ tq $\int_0^{\omega_D} g(\omega)d\omega = N$.

(ii) la pulsation de Debye : $\omega_D = v_s k_D = v_s \frac{\pi}{a}$,

(iii) la température de Debye : $\hbar\omega_D = k_B\theta_D$; $\quad \theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar v_s}{k_B}\frac{\pi}{a}$.

4- Écrire l'expression de l'énergie interne, U, du gaz de phonons.

Re : $U = \int_0^{\omega_D} g(\omega)(\bar{n} + \frac{1}{2})\hbar\omega d\omega$ avec $\bar{n} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}$

$\bar{n}$ représente le nombre d'occupation moyen des phonons dans le mode normal k, pour un système en équilibre à la température T. On l'appellela fonction de distribution de Bose-Einstein.

5- Exprimer la chaleur spécifique, C_v, de cette chaîne d'atomes (on posera $\hbar$la constante réduite de Planck, $k_B$est la constante de Boltzmann et Tdésigne la température). On exprimera $C_v$en particulier dans les deux cas: basse température ($T \to 0$) et haute température.

On donne :. $\int_0^\infty \frac{xdx}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}$

Re : <u>A haute température</u> et dans l'approximation de Debye

$\exp\frac{\hbar\omega}{k_B T} \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T}$ losque $T \to +\infty$ L'énergie interne Uest donnée par :

$$U = \frac{Na}{\pi v_s}\int_0^{\omega_D} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}\hbar\omega\, d\omega + U_0 = \frac{Na}{\pi v_s} k_B T\,\omega_D + U_0 = N k_B T + U_0$$

Car $\omega_D = \frac{\pi}{a} v_s$.

$C_V = \left.\frac{dU}{dT}\right)_V = Nk_B$. C_v ne dépend pas de la température, Même résultat que celui obtenu par la loi de Dulong et Petit.

<u>Aux basses températures</u> ($T \to 0$) et dans l'approximation de DebyeOn pose

$x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$ lorsque $T \to 0^+ \Rightarrow x \to +\infty$

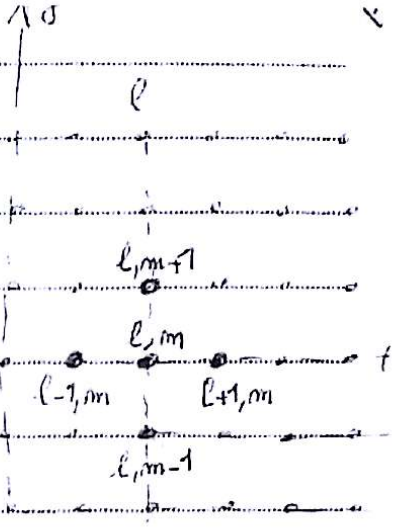
$$U = \frac{Na}{\pi v_s}\frac{(k_B T)^2}{\hbar}\int_0^\infty \frac{xdx}{e^x - 1} + U_0 = \frac{Na}{\pi v_s}\frac{(k_B T)^2}{\hbar}\frac{\pi^2}{6} + U_0 = \frac{Na}{v_s}\frac{(k_B T)^2}{\hbar}\frac{\pi}{6} + U_0 = \frac{N}{\omega_D}\frac{(k_B T)^2}{\hbar}\frac{\pi^2}{6} + U_0$$

$$C_V = \left.\frac{dU}{dT}\right)_V = \frac{Na}{v_s} 2\frac{k_B^2}{\hbar}\frac{\pi}{6} T = \frac{N}{\omega_D \hbar} k_B^2 \frac{\pi^2}{3} T = (N k_B \frac{\pi^2}{3})\frac{T}{\theta_D}$$

IV) Capacité calorifique d'un réseau plan

Vibrations transversales, atomes de masse M.

On ne considère que les interactions entre 1er voisins.



a) $M\ddot{u}_{l,m} = C\left(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2u_{l,m}\right)$

$+ C\left(u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2u_{l,m}\right)$

$\vec{k} = k_x\vec{i} + k_y\vec{j}$ $\qquad \vec{F} = l_a\vec{i} + m_a\vec{j}$

b) on cherche des solutions de la forme :

$u_{l,m} = u_0 \exp i(lk_xa + mk_ya - \omega t)$

$-M\omega^2 u_{l,m} = C u_{l,m}\left[\left(e^{ik_xa} + e^{-ik_xa} - 2\right) + \left(e^{ik_ya} + e^{-ik_ya} - 2\right)\right]$

$\sin^2\theta = \frac{\cos 2\theta - 1}{2}$

$\omega^2 = -\frac{2C}{M}\left(\cos k_xa + \cos k_ya - 2\right) = +\frac{2C}{M}\left(2\sin^2\frac{k_xa}{2} + 2\sin^2\frac{k_ya}{2}\right)$

$$\boxed{\omega^2 = \frac{4C}{M}\left(\sin^2\frac{k_xa}{2} + \sin^2\frac{k_ya}{2}\right)}$$

c) ω^2 est une fonction périodique $\omega^2\left(k_x + \frac{2\pi}{a}\right) = \omega^2\left(k_y + \frac{2\pi}{a}\right) = \omega^2$

La région de l'espace des k pour laquelle il existe des solutions indépendante est un domaine de largeur $\frac{2\pi}{a}$ et de longueur $\frac{2\pi}{a}$

puisque $\omega^2(k_x) = \omega^2(-k_x)$ et $\omega^2(k_y) = \omega^2(-k_y)$ on prend

$-\frac{\pi}{a} \leq k_x \leq +\frac{\pi}{a}$ et $-\frac{\pi}{a} \leq k_y \leq +\frac{\pi}{a}$ soit un carré de coté $\frac{2\pi}{a}$

c.a.d la 1ère zone de Brillouin.

d) dans la direction [10]

$k = k_x$ et $k_y = 0$

$\omega_1 = 2\sqrt{\frac{C}{M}}\sin\frac{k_xa}{2}$

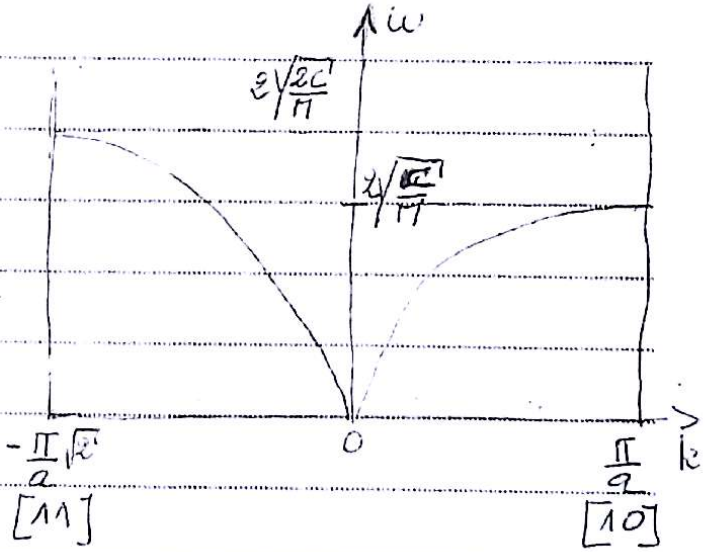
* direction [11] $k_x = k_y$, $k = \sqrt{2}k_x$

$\vec{k} = k_x\vec{i} + k_x\vec{j}$

$k = k_x\sqrt{2}$

$\omega_2 = 2\sqrt{\frac{2C}{M}}\sin\frac{k}{2}$

$= 2\sqrt{\frac{2C}{M}}\sin\frac{k_x\sqrt{2}}{2}$



au voisinage de 0

$\omega_1 = 2\sqrt{\frac{C}{M}}\frac{ka}{2} = \sqrt{\frac{C}{M}}ak$, $\omega_2 = 2\sqrt{\frac{2C}{M}}\frac{ka}{2\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{C}{M}}ka$

~~Pour~~ aux bords de la zone de Brillouin

$\omega_1\left(\frac{\pi}{a}\right) = 2\sqrt{\frac{C}{M}}$, $\omega_2\left(\frac{\pi}{a}\sqrt{2}\right) = 2\sqrt{\frac{2C}{M}}$.

$$g(k)\,dk = \frac{\text{aire de la couronne}}{\text{surface d'1 mode}}$$

$$= \frac{\pi (R^2 - r^2)}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \Rightarrow \begin{array}{l} R = k + dk \\ r = k. \end{array}$$

$$= \frac{\pi}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \left((k + dk)^2 - k^2 \right)$$

$$= \frac{\pi}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \left(\cancel{k^2} - \cancel{k^2} + 2k\,dk + \cancel{dk^2} \right)$$

$$= \frac{2\pi k\,dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}.$$

2) a) Carré de côté $L = Na$.

Conditions de Born-von Karman.

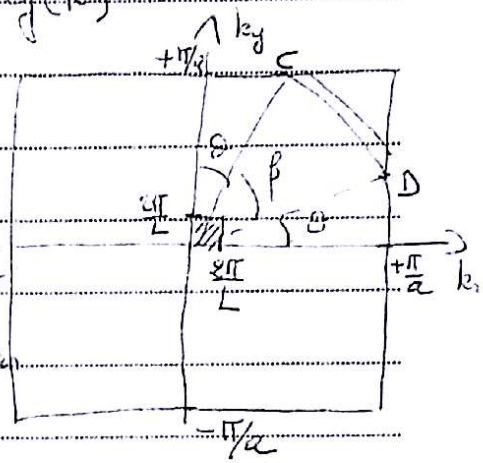
$$u_{l,m} = u_{l+N,m} \qquad e^{ik_x Na} = 1$$

$$u_{l,m} = u_{l,m+N} \qquad e^{ik_y Na} = 1$$

$$k_x = \pm n_1 \frac{2\pi}{L} \quad \text{et} \quad k_y = \pm n_2 \frac{2\pi}{L} \qquad \| \; L = Na \; \| \; n_1 \text{ et } n_2 \in \mathbb{N}$$

b) densité de modes de vibrations $g(k)$

~~$N(k)$~~ nombre de mode dans un élément de surface compris entre k et $k+dk$:



$$g(k)\,dk = \frac{2\pi k\,dk}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \quad \text{pour } \|\vec{k}\| \leq \frac{\pi}{a}$$

$$\boxed{g(k) = \frac{kL^2}{2\pi}}$$

$\frac{\text{air de la couronne}}{\text{surface occupée par 1 mode}}$

Pour $\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi\sqrt{2}}{a}$

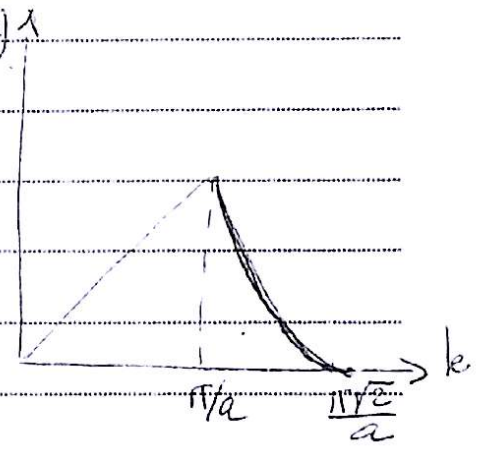
$$\overset{\frown}{CD} = k\beta \quad , \quad \beta = \frac{\pi}{2} - 2\theta$$

$$\cos\beta = \cos\left(\frac{\pi}{2} - 2\theta\right) = \sin 2\theta = 2\cos\theta \sin\theta$$

$$\cos\theta = \frac{\pi/a}{k} \quad , \quad \sin\theta = \frac{\sqrt{k^2 - (\pi/a)^2}}{k}$$

$$\overset{\frown}{CD} = k \arccos\left[\frac{2\pi}{ak^2}\left(k^2 - \left(\frac{\pi}{a}\right)^2\right)^{1/2}\right]$$

$$\boxed{g(k) = \frac{L^2}{\pi^2} k \arccos \frac{2\pi\left(k^2 - (\pi/a)^2\right)^{1/2}}{a^2 k^2}}$$



c) ~~Approx~~ modèle de Debye : $\omega = v_s k$ et on remplace la 1ère zone de Brillouin par la zone de Debye de rayon k_D.

$$g(\omega)\,d\omega = g(k)\,dk \qquad (\text{mode transversal})$$

$$g(\omega) = g(k)\frac{dk}{d\omega} = \frac{kL^2}{2\pi}\frac{1}{v_s} \qquad \boxed{g(\omega) = \frac{L^2}{2\pi}\frac{\omega}{v_s^2}}$$

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega)\,d\omega = 2N^2 \quad \left(= \text{nbre de DOF de la base } N^2 \text{ maille primitives}\right)$$

$$\Rightarrow \omega_D^2 = \frac{8\pi N^2 v_s^2}{L^2} \qquad \boxed{\omega_D = \sqrt{8\pi}\,\frac{v_s}{a}}$$

$$\omega_D = k_D v_s \qquad \boxed{k_D = \frac{2\sqrt{\pi}}{a}} \quad \sqrt{8\pi}$$

d) Energie interne

$$U = \int_0^{\omega_D} \left(\bar{n} + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega\, g(\omega)\, d\omega \quad ; \quad \bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \quad (F.D)$$

$$= \int_0^{\omega_D} \left(\frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1} + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega\, g(\omega)\, d\omega$$

On pose $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$, $\omega^2 = \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2 x^2$, $dx = \frac{\hbar}{k_B T} d\omega$

L^2
$N^2 a^2$

$$U = \frac{S\hbar}{2\pi v_s^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^2}{e^x - 1}\, dx \qquad x_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B T}$$

* à haute température $\exp\frac{\hbar\omega}{k_B T} \simeq 1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T} + \cdots$

$$U = \frac{S\hbar}{2\pi v_s^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{x_D} x\, dx = \frac{S\hbar}{2\pi v_s^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar\omega_D}{k_B T}\right)^2$$

$$= N^2 k_B T \implies \boxed{C_V = N^2 k_B}$$

Pour les vibrations transversales.

* à basse température $T \to 0$ $x_D \to \infty$

$$U = \frac{S\hbar}{2\pi v_s^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^2}{e^x - 1}\, dx = \frac{2{,}4\, S\hbar}{2\pi v_s^2}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3$$

$$C_V = \frac{dU}{dT} = \frac{2{,}4\, S\hbar}{2\pi v_s^2}\, 3\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^2 \frac{k_B}{\hbar}$$

On pose $\hbar\omega_D = k_B T_D$

et on a $\omega_D = \frac{\sqrt{4\pi}}{a} v_s$

$$\boxed{C_V = 14{,}4\, N^2 k_B \left(\frac{T}{T_D}\right)^2}$$

V Chaleur spécifique d'une chaîne avec deux atomes par maille

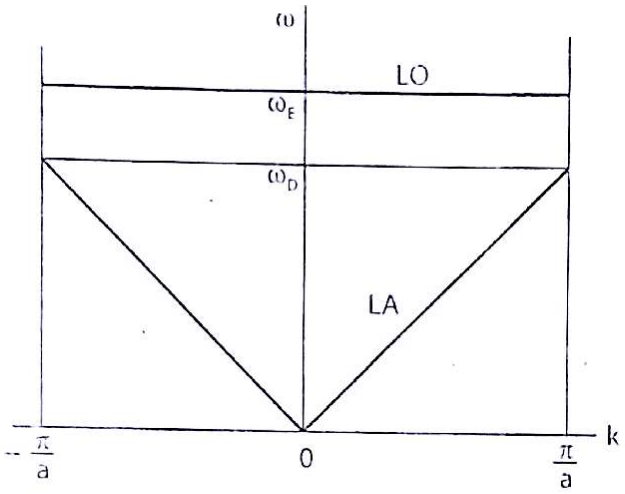
(a) Le volume du système dans l'espace réel est $L = Na$, donc le volume occupé par chaque état k dans l'espace réciproque est $\frac{2\pi}{Na}$. Il y a N valeurs de k dans la première zone de Brillouin. Comme on décrit seulement la branche acoustique avec le modèle de Debye, k_D doit être tel que la "sphère" (à 1D c'est un segment) de Debye contient N valeurs de k :

$$2k_D \frac{Na}{2\pi} = N$$

Donc on obtient

$$k_D = \frac{\pi}{a} \qquad \text{et} \qquad \omega_D = v_s \frac{\pi}{a}$$

La figure suivante représente les courbes de dispersion approximées par les modèles de Debye et de Einstein dans la première zone de Brillouin :



(b) Dans chaque branche il y a N valeurs de k permises et donc N modes. Au total, il y a $2N$ modes.
Le nombre d'états permis dans le volume infinitésimal de l'espace réciproque $2\,dk$ (1D) par unité de volume dans l'espace direct est

$$\frac{Na}{2\pi}\frac{1}{Na}2dk$$

2T

Pour obtenir l'expression de $g_{ac}(\omega)$, il faut réécrire cette relation en fonction de ω en utilisant la relation de dispersion $\omega = v_s k$ pour faire le changement de variable :

$$g_{ac}(\omega)d\omega = \frac{Na}{2\pi}\frac{1}{Na}2dk = \frac{1}{\pi}dk \quad \rightarrow \quad g_{ac}(\omega) = \frac{1}{\pi v_s} = \frac{1}{a\omega_D}$$

Pour la branche optique tous les modes ont la même énergie $\hbar\omega_E$. $g_{op}(\omega)$ est une fonction δ en ω_E de poids $n = \frac{1}{a}$ (n est la densité de mailles ou de paires).

(c) L'énergie interne u est donnée par la contribution des deux termes : $u = u_{ac} + u_{op}$.

La contribution de la branche acoustique est :

$$u_{ac} = \int_0^{\omega_D} \hbar\omega\, g_{ac}(\omega)\left(\langle n(\omega)\rangle + \frac{1}{2}\right)\mathrm{d}\omega = \frac{1}{a\omega_D}\int_0^{\omega_D} \hbar\omega\left(\frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT} - 1} + \frac{1}{2}\right)\mathrm{d}\omega$$

où $\langle n(\omega)\rangle$ est la distribution de Bose-Einstein.

La contribution de la branche optique est :

$$u_{op} = \frac{\hbar\omega_E}{a}\left(\langle n(\omega_E)\rangle + \frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar\omega_E}{a}\left(\frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega_E}{k_BT} - 1} + \frac{1}{2}\right)$$

(d) La chaleur spécifique est définie comme :

$$c_v = \left.\frac{\partial u}{\partial T}\right|_v$$

Dans l'évaluation de la chaleur spécifique on peut négliger le demi quantum, puisque il ne dépend pas de la température.

$$c_v{}^{ac} = \frac{\partial u_{ac}}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}\frac{1}{a\omega_D}\int_0^{\omega_D} \hbar\omega\frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT} - 1}\mathrm{d}\omega$$

$$c_v{}^{op} = \frac{\partial u_{op}}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}\frac{\hbar\omega_E}{a}\frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega_E}{k_BT} - 1}$$

Pour la branche acoustique :

1. A haute température : $k_BT \gg \hbar\omega_D$, on peut approximer $e^x \approx 1 + x$ avec $x = \hbar\omega/k_BT$ et on obtient (avec $\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$) :

$$c_v{}^{ac} = \frac{\partial}{\partial T}\frac{1}{a\omega_D}\int_0^{\omega_D}\hbar\omega\frac{k_BT}{\hbar\omega}\mathrm{d}\omega = \frac{\partial}{\partial T}\frac{1}{a\omega_D}k_BT\omega_D = \frac{\partial}{\partial T}\frac{k_BT}{a} = nk_B$$

2. A basse température : $k_BT \ll \hbar\omega_D$, on peut étendre l'integrale jusqu'à ∞. Avec la substitution $x = \hbar\omega/k_BT$, on obtient :

$$c_v{}^{ac} = \frac{\partial}{\partial T}\frac{1}{a\omega_D}\int_0^{\infty}\hbar\omega\frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega}{k_BT}-1}\mathrm{d}\omega = \frac{\partial}{\partial T}\frac{1}{a\omega_D}\frac{(k_BT)^2}{\hbar}\int_0^{\infty}\frac{x}{e^x-1}\mathrm{d}x =$$
$$= \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\pi^2}{6}nk_B\frac{T^2}{\Theta_D}\right) = \frac{\pi^2}{3}nk_B\frac{T}{\Theta_D}$$

Pour la branche optique :

1. A haute température : $k_BT \gg \hbar\omega_E$, on peut approximer $e^x \approx 1 + x$ avec $x = \hbar\omega/k_BT$ et on obtient :

$$c_v{}^{op} = \frac{\partial}{\partial T}\frac{\hbar\omega_E}{a}\frac{k_BT}{\hbar\omega_E} = \frac{\partial}{\partial T}(nk_BT) = nk_B$$

2. A basse température : $\exp\frac{\hbar\omega_E}{k_BT} \gg 1$, on peut ecrire (avec $\Theta_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B}$) :

$$c_v{}^{op} = \frac{\partial}{\partial T}\frac{\hbar\omega_E}{a}\exp(-\frac{\hbar\omega_E}{k_BT}) = \frac{\partial}{\partial T}nk_B\Theta_E\exp(-\frac{\Theta_E}{T}) = nk_B\frac{\Theta_E^2}{T^2}\exp(-\frac{\Theta_E}{T})$$

Au total on obtient :

1. A haute température :

$$c_v = c_v{}^{ac} + c_v{}^{op} = 2nk_B$$

soit $2k_B$ par paire de ions, donc k_B par ion, ce qui correspond à la loi de Dulong et Petit.

2. A basse température : $k_BT \ll \hbar\omega_D,\ \hbar\omega_E$

$$c_v = c_v{}^{ac} + c_v{}^{op} = nk_B\left(\frac{\pi^2T}{3\Theta_D} + \frac{\Theta_E^2}{T^2}\exp(-\frac{\Theta_E}{T})\right)$$

(e) Application numérique .
Avec les constantes : $\hbar = 6.58 \cdot 10^{-16}$ eV s et $k_B = 8.617 \cdot 10^{-5}$ eV K^{-1}, on trouve :

$$\omega_D = v_s \frac{\pi}{a} = 4.6 \cdot 10^{13} \text{ rad s}^{-1}$$

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = 352 \text{ K}$$

$$\Theta_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B} = 456 \text{ K}$$

A $T = 20$ K, les contributions respectives des phonons acoustiques et optiques par paire de ions sont :

$$c_v{}^{ac} = \frac{\pi^2 k_B T}{3\Theta_D} \approx 1.6 \cdot 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$$

et

$$c_v{}^{op} = k_B \frac{\Theta_E^2}{T^2} \exp(-\frac{\Theta_E}{T}) \approx 5.6 \cdot 10^{-12} \text{ eV K}^{-1}.$$

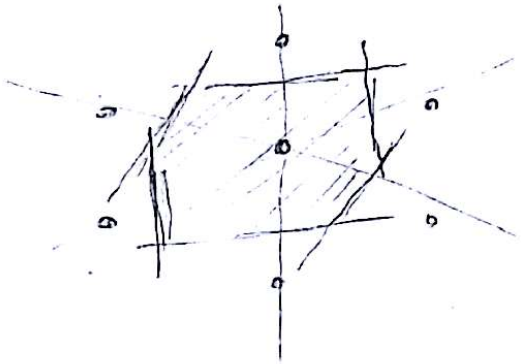
La chaleur spécifique à basse température est uniquement due à l'excitation des phonons acoustiques, alors que les deux contributions ont le même poids à haute température.

A basse température, la chaleur spécifique est proportionnelle à T pour un réseau 1D. Elle est proportionnelle à T^2 pour un réseau 2D et à T^3 pour un réseau 3D.

30

Maille de Wigner - Seitz

est une maille elementaire (ie le plus petit volume du reseau cristallin qui contient toute l'information).
Elle est obtenue de la manière suivante :

1- On trace les lignes qui relient un noeud donné à tous ses voisins.
2- On trace les plans médiateurs de ces segments
le plus petit volume enclos de cette façon est la maille elementaire de Wigner-Seitz.
tout l'espace peut être rempli par ces mailles.

Rq : la maille de WS est la 1ère Z.B de le l'espace Reciproque