

Physique des Matériaux I

Devoir 5 Phonons et vibrations du réseau- Correction

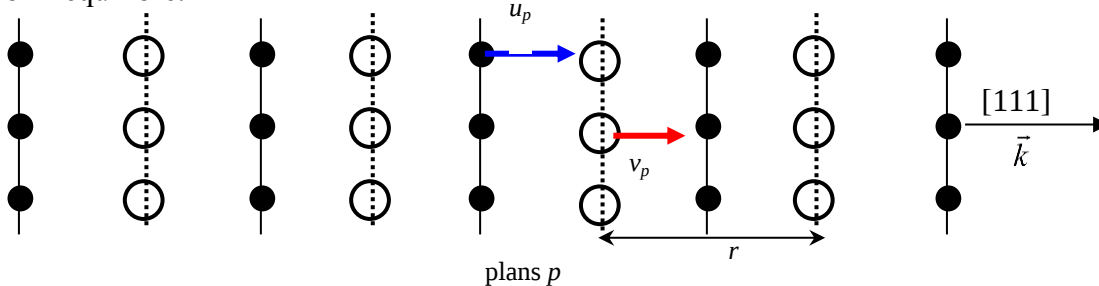
Exercice 3 : Vibrations dans un cristal cubique diatomique

1. Les résultats obtenus pour le chlorure de potassium sont :

- Réseau de Bravais C.F.C.
- Le paramètre de la maille $a = 6,30 \cdot 10^{-10}$ m.
- Chaque plan contient un seul type d'atome.
- La distance séparant deux plans consécutifs contenant le même type d'atome est :

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

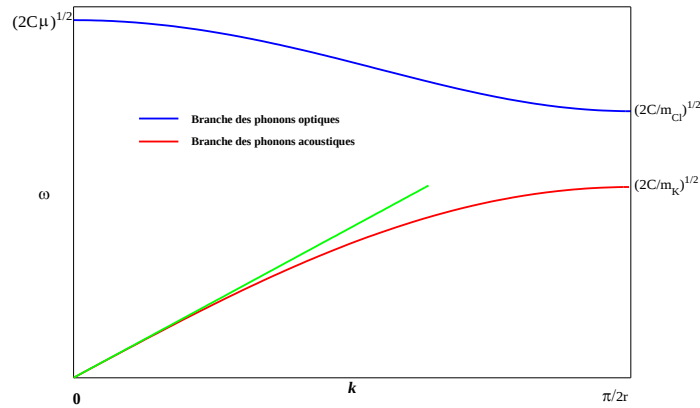
4. On effectue les changements de variable en fonction de μ et M définies au début de la question 2. et on remplace le cosinus par le sinus. L'équation précédente devient :

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

C'est une équation bicarrée dont les solutions sont :

$$\omega_1^2 = C\mu + C \left[\mu^2 - 4M\mu^{-1} \cdot \sin^2 \left(\frac{kr}{2} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \text{ et } \omega_2^2 = C\mu - C \left[\mu^2 - 4M\mu^{-1} \cdot \sin^2 \left(\frac{kr}{2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

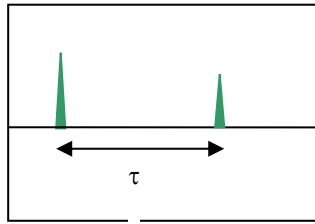
5. Les représentations graphiques pour ω sont données sur la figure suivante :



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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

On peut ainsi calculer :

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

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

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

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

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar \times \Delta\omega}{2\pi} = 1,69 \cdot 10^{-22} \text{ J} = 1,06 \cdot 10^{-3} \text{ eV} = 1,06 \text{ meV}$$