

Introduction à la Physique des Matériaux
Devoir 5 : Dynamique du réseau

1. L'équation du mouvement peut être écrite (équation 1) :

$$m\ddot{u}_n = \sum_{p=1}^{p=+\infty} \beta_p (u_{n+p} + u_{n-p} - 2u_n)$$

2.a. La force de Coulomb qui s'exerce entre deux charges distantes de r_{ij} est :

$$F_{ij} = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}^2}$$

2.b Sachant que :

$$\begin{aligned} q_n &= (-1)^n e \\ q_{n+p} &= (-1)^{n+p} e \\ r_{n,n+p} &= pa + u_{n+p} - u_n \end{aligned}$$

2.c. Considérons le développement limité au premier ordre :

$$\frac{1}{(1 + \epsilon)^2} = 1 - 2\epsilon$$

On obtient alors :

$$F_{n,n+p} = \frac{(-1)^p e^2}{4\pi\epsilon_0 (pa)^2} \left(1 - 2 \frac{u_{n+p} - u_n}{pa} \right)$$

3. Le premier terme participe à la cohésion du cristal par sa contribution à la constante de Madelung tandis que le deuxième terme représente la force de rappel qu'exerce l'atome $n + p$ sur l'atome n . En identifiant ce deuxième terme à $\beta(u_{n+p} - u_n)$, on obtient l'expression proposée pour β_p :

$$\beta_p = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{a^2} \frac{1}{a^3}$$

4.a Par substitution des β_p par leur expression dans l'équation (1) et en tenant compte de la constante β , on obtient :

$$\omega^2 = \frac{4}{m} (\beta - \beta_1) \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \frac{4}{m} \sum_{p>1} \beta_p \sin^2\left(p \frac{ka}{2}\right)$$

4.b. On obtient alors l'équation (2) :

$$\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 = (1 - \sigma) \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right) + \sum_{p>1} (-1)^p \frac{\sigma}{(2p)^3} \sin^2\left(p \frac{ka}{2}\right)$$

5. Quand $k \ll \frac{\pi}{a}$, c'est-à-dire pour les grandes longueurs d'ondes (au centre de la zone de Brillouin) on peut écrire :

$$\sin \alpha \approx \alpha$$

Ce qui donne :

$$\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 = \left(1 - \sigma \left[1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} \dots \dots \dots\right]\right) \left(\frac{ka}{2}\right)^2$$

On retrouve la série alternée conduisant à la constante de Madelung d'une chaîne linéaire (cours chapitre 5 et exercice 2 du devoir 4)

$$1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} \dots \dots \dots = \ln 2$$

On en déduit que :

$$\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 > 0 \Leftrightarrow 1 - \sigma \ln 2 > 0 \Leftrightarrow \sigma < \frac{1}{\ln 2}$$

6. Dans l'hypothèse inverse, $k = \frac{\pi}{a}$, c'est-à-dire au bord de la zone de Brillouin l'équation (2) devient :

$$\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 = 1 + \sigma \sum_{p>1} \frac{(-1)^p}{p^3} \sin^2\left(p \frac{\pi}{2}\right)$$

La sommation est limitée aux termes en p impairs, car le sinus relatif aux valeurs de p paires sont nuls. De plus en utilisant la fonction de Riemann :

$$\sum_{p>1} \frac{1}{p^3} = \zeta(3)$$

On a :

$$\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 > 0 \Leftrightarrow \sigma < 0,95$$

7. On conclue alors que si :

$$1,443 < \sigma < 0,95$$

alors :

$$\omega^2 \rightarrow 0$$

Le réseau est alors instable pour des valeurs du vecteur d'onde k telle que :

$$0 < k < \frac{\pi}{a}$$