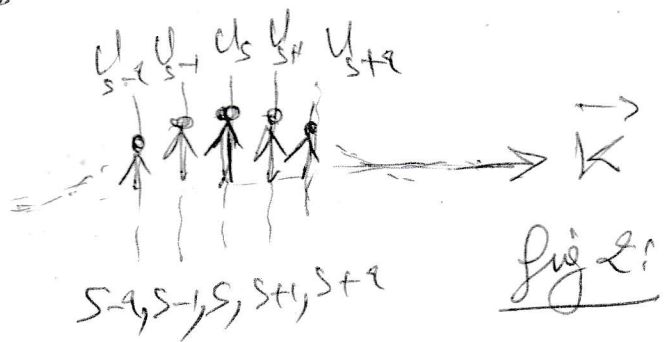
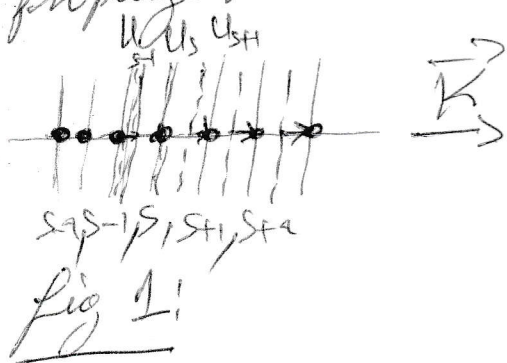


Vibrations du réseau et Phénomènes

Introduction: Les atomes d'un cristal ne sont pas fixes. Sous l'effet de la température ou d'une excitation électromagnétique ils oscillent par rapport à une position d'équilibre (stable). Si les amplitudes d'oscillation sont faibles, on dit qu'elles sont harmoniques c'est-à-dire que les forces sont proportionnelles aux déplacements [loi de Hooke].

→ Le mouvement est parallèle à la direction de propagation si l'onde est longitudinale (Figure 1).

→ Le mouvement est perpendiculaire à la direction de propagation si l'onde est transversale (Figure 2).



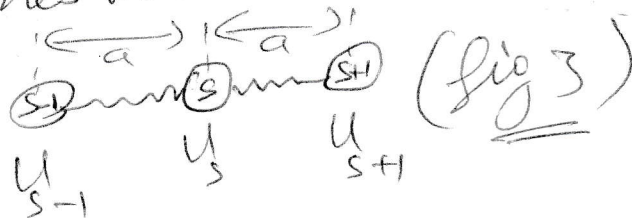
A - Cas d'un atome par maille élémentaire (chaîne monoatomique).

→ Nous considérons les cristaux dont la maille élémentaire contient un seul atome de masse M , et de distance entre les atomes les plus proches voisins et a .

→ Soit U le déplacement de l'atome $\underline{s}$ par rapport à son point d'équilibre (fig 3).

→ Comme première approximation, nous considérons les atomes comme étant reliés entre eux par des ressorts et on fait l'hypothèse de petites oscillations.

→ On se propose ici d'étudier le sième atome et ses deux proches voisins $(s-1)$ et $(s+1)$ ième atomes.



→ En appliquant le principe fondamental de la dynamique sur l'atome s on aura:

$$F = M\gamma = M \frac{d^2 U_s}{dt^2} \quad \text{--- (1)}$$

et on a d'autre part: $F = \sum_p c_p (U_{s+p} - U_s)$

pour notre cas: $F = c(U_{s+1} - U_s) + c(U_{s-1} - U_s)$

ou c est la constante du ressort.

Alors l'équation devient:

$$F = M\gamma = M \frac{d^2 U_s}{dt^2} = c(U_{s+1} + U_{s-1} - 2U_s) \quad \text{--- (2)}$$

→ nous cherchons des solutions aient une dépendance en temps et en déplacement de la forme: $U_s = U e^{i(ksa - \omega t)}$

d'où $\frac{d^2 U_s}{dt^2} = -\omega^2 U_s$ / $U_{s+1} = U_s e^{ika}$
 $U_{s-1} = U_s e^{-ika}$

Remplaçant les dans (2) on aura alors:

$$-\omega^2 M U_s = c(U_s e^{ika} + U_s e^{-ika} - 2U_s)$$

$$-\omega^2 M = c(e^{ika} + e^{-ika} - 2)$$

$$-\omega^2 M = C(2 \cos(Ka) - 2)$$

$$\Rightarrow \omega^2 = \frac{2C}{M} (1 - \cos(Ka))$$

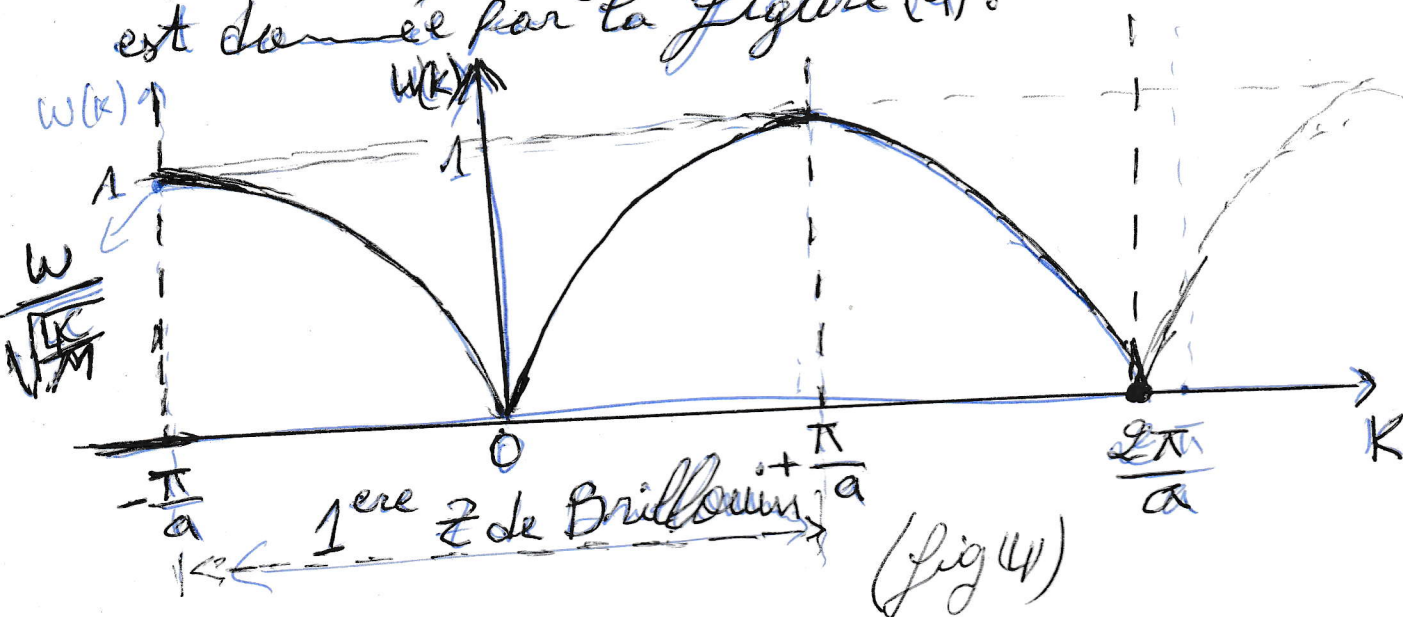
et comme : $\cos 2\theta = 1 - 2\sin^2(\theta)$

Alors : $\omega^2 = \frac{4C}{M} \left(\sin^2\left(\frac{1}{2}Ka\right) \right)$

D'où $\boxed{\omega(K) = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin\left(\frac{1}{2}Ka\right) \right|}$ (3)

c'est la relation de dispersion.

- La présentation graphique de ω en fonction de K est donnée par la figure (4) :



Remarques :

- L'onde se propage vers la droite comme vers la gauche, d'où le domaine de K à considérer peut être spécifié par : $-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}$ ou $-\pi \leq Ka \leq \pi$

- Ce domaine de valeurs de K s'appelle la première zone de Brillouin (p.z.B.) du réseau linéaire.

B) Réseaux ayant deux atomes par maille élémentaire

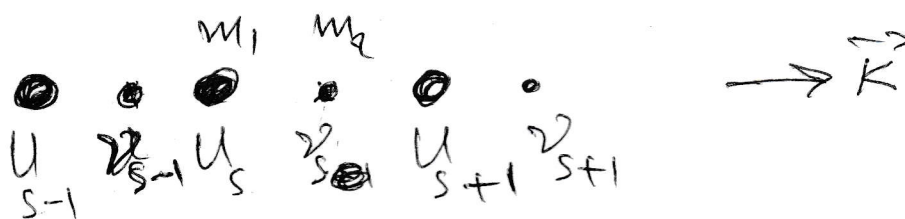
→ nous étudions le cas ~~des~~ 2 atomes par maille primitive, comme pour la structure NaCl. Pour chaque mode de polarisation dans une direction de propagation donnée, la relation de dispersion de $\omega(k)$ donne deux branches, nommées branches acoustique et optique.

→ nous avons les modes acoustiques Longitudinal LA et Transverse TA et les modes optiques Longitudinal LO et Transverse TO.

→ Si la maille élémentaire a p atomes, il y aura $3p$ branches correspondant à la relation de dispersion. $\times 3$ branches acoustiques et $3p - 3$ branches optiques.

(chaque atome possède 3 degrés de liberté, correspondant aux directions x, y, z).

→ Considérons un cristal cubique avec des atomes de masse M_1 sur une famille de plans et des atomes de masse M_2 sur les plans intercalés avec les premiers.
- soit a le paramètre du réseau



- Écrivons les équations de mouvement en faisant l'hypothèse que chaque plan n'interagit qu'avec ses proches voisins et que les constantes d'interaction sont identiques.

$$\left. \begin{aligned} m_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} &= c (v_s + v_{s-1} - 2u_s) \\ m_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} &= c (u_{s+1} + u_s - 2v_s) \end{aligned} \right\} \quad \text{--- (1)}$$

~~4~~ 4-

→ Nous cherchons des solutions ayant la forme d'onde de propagation,

$$u_s = u e^{i(ksa - \omega t)}, \quad v_s = v e^{i(ksa - \omega t)} \quad \text{--- (2)}$$

$$\text{ou a: } \left. \begin{aligned} \frac{d^2 u_s}{dt^2} &= -\omega^2 u e^{i(ksa - \omega t)} \\ \frac{d^2 v_s}{dt^2} &= -\omega^2 v e^{i(ksa - \omega t)} \end{aligned} \right\} \rightarrow (3)$$

de (3) en (1) on a :

$$\left. \begin{aligned} -\omega^2 m_1 u &= c v (1 + e^{-ika}) - c u \\ -\omega^2 m_2 v &= c u (1 + e^{ika}) - c v \end{aligned} \right\} \rightarrow (4)$$

→ Ces équations linéaires homogènes admettent une solution non triviale si et seulement si le déterminant des coefficients de u et v s'annule :

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

→ pour ka petit: $\cos ka \approx 1 - \frac{1}{2} k^2 a^2$

et les deux racines sont

$$(3) \quad \omega_+^2 \approx 4C \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)$$

branche optique

$$(6) \quad \omega_-^2 \approx \frac{1}{2} \frac{c}{m_1 + m_2} k^2 a^2$$

acoustique

→ pour $k = \pm \frac{\pi}{a}$:

$$(7) \quad \omega_+^2 = \frac{2C}{m_1 m_2} m_1 m_2$$

$$(8) \quad \omega_-^2 = \frac{2C}{m_1}$$

→ Les déplacements des particules pour les branches Transverses acoustique et optique sont représentés à la figure suivante:

→ Pour la branche optique à $k=0$ nous trouvons, en substituant (3) dans (4):

$$\frac{u}{v} = - \frac{m_2}{m_1} \quad (5)$$

→ Les atomes vibrent l'un par rapport à l'autre, mais leur centre de masse est fixe.

→ Si les deux atomes sont de charges opposées, nous pouvons engendrer une vibration de ce type par le champ électrique d'une onde lumineuse, c'est pourquoi cette branche est appelée **branche (O)**.

→ Une autre solution pour les rapport des amplitudes pour k petit, est $u=v$, obtenue comme dans le cas limite $k=0$. Les atomes (et leur centre de masse) vibrent ensemble de (6). Les atomes (et leur centre de masse) vibrent ensemble comme dans le cas des vibrations acoustiques de grande longueur d'onde, d'où l'appellation de **branche acoustique**.

