Série III M1 physique des matériaux 2025/2026

Exercice1 :

Soit un réseau linéaire d'atomes identiques, de masse **m** et équidistantes de **a**.

Chaque atome est soumis à une constante de rappel C_1 exercée par ses premiers voisins et C_2 exercée par ses seconds voisins.

1) Etablir l'équation régissant le déplacement de l'atome **S** soit U_s en fonction de U_{s+1} , U_{s-1} **et** U_{s+2} , U_{s-2}.
2) Etablir la relation de dispersion des phonons longitudinaux, à partir d'une solution de la forme
   $U_s = U\exp i(ksa-wt)$.
3) Dans cette relation, mettre en évidence le facteur correctif **S(k),** lie à l'influence des seconds voisins.
4) Indiquer l'allure de la courbe de dispersion pour $C_2=0$, $C_2>0$, $C_2<0$ ($C_1>0$).

Exercice2 :

Considérons une chaine d'atomes de carbones du type **-C=C-C=C-C=C-** possédant des liaisons simples et doubles alternées.

Le paramètre de maille est **a** et la double liaison à une longueur **b=a/4.**

Les interactions sont limitées aux premiers voisins et caractérisées par une constante de rappel C_1 pour les liaisons doubles et $C_2 = C_1/3$ pour les liaisons simples.

1) Ecrire les équations du mouvement et établissez les relations de dispersion des modes de vibrations longitudinaux.
2) Déterminer les valeurs de fréquences au centre et au bord de la **1ZB.**

III) La relation de dispersion pour une chaine diatomique

$$\omega_\pm^2 = C\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right) \pm C\sqrt{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)^2 - \frac{4}{mM}\sin^2\frac{Ka}{2}}$$

1) Donner l'expression de $\omega_\pm$ au centre et au bord de 1ZB.

2) Représenter graphiquement $\omega(K)$ dans la 1ZB.

3) Estimer la valeur de ω_+ en $K=0$, avec : $C = 42\ N/m$ et $m(Na) = 23\ amu$, $M(Cl) = 35{,}5\ amu$ / ($1\ amu = 1{,}6\times10^{-27}\ kg$).

IV) On considère une rangée de longueur L formée de $2N$ ions de charges $\pm q$ équidistants de $\underline{\underline{a}}$ à l'équilibre.

1) Decrire la relation de dispersion des phonons acoustiques (AL) par le modèle de Debye, et la dispersion des phonons optique (OL) par le modèle d'Einstein.

2) Trouver les Densités de modes pour les deux branches et déduire ω_D et K_D.

3) Representer les courbes de dispersion dans la 1ZB.

4) Ecrire l'expression de l'energie interne $\underline{\underline{U}}$ du réseau.

5) Etablir l'expression de C_v à haute et à basse T.

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

6) Evaluer les temperature de Debye $\underline{\underline{\theta_D}}$ et de Einsteine $\underline{\underline{\theta_E}}$. Calculer la contribution à la chaleur spécifique à $T = 20K$ par pair de ions de chacune des branches.

pour : $a = 3\,Å$, $v_s^l = 8800\ m/s$, $\omega_E = 6.10^{13}\ rad/s$

Suite Serie 3

SUITE SERIE 3 M1 Phy(M)

I-1. Montrer que l'énergie totale U des N oscillateurs harmoniques à 3 dimensions peut

s'écrire sous la forme: $U= 3N\hbar w(\frac{1}{2}+\frac{1}{\exp(\beta\hbar w)-1})$

2. Etablir l'expression de la capacité calorifique à volume constant C_v (T) de ce cristal.

En posant $\theta_E = \beta\hbar w$ (appelée température d'Einstein), donner la nouvelle expression de C_v.

3. Déterminer la loi de variation de Cv à haute température et sa loi de variation

à basse température . Comparer ces résultats aux résultats expérimentaux.

4. Tracer l'allure de Cv en fonction de la température.

II- A une température T donnée, les atomes du solide vibrent et les ondes de phonons

correspondantes peuvent s'écrire sous la forme: $U(x,y,z) = U_0\exp(\vec{K}.\vec{r} - wt)$

1. En utilisant les Conditions aux Limites Périodiques (CLP) de Born von Karman:

a) Montrer que les composantes du vecteur d'onde K sont quantifiées.

b) Préciser l'espace occupé par les vecteurs d'ondes K des phonons puis déterminer la densité de vibrations g(K).

2. Par la suite, on suppose que la relation de dispersion des phonons peut s'écrire sous la forme

W(k) = vK (approximation de Debye), où v la vitesse de son.

a) En déduire l'expression de la densité de vibrations (ou densité de modes) D(ω) pour

chacun des trois modes de vibrations. Tracer l'allure de D(ω).

b) Déterminer l'expression de la fréquence maximale de vibration w_D (fréquence de

coupure de Debye). En déduire la température de Debye θ_D.

3. Donner l'expression de l'énergie interne totale U due aux vibrations des atomes.

4. Etablir les expressions de U(T) à haute température et à basse température

. On pourra utiliser le résultat de l'intégrale suivante: $\int_0^\infty \frac{x^3dx}{e^x-1} = \frac{\pi^4}{15}$

5. En déduire les expressions de la capacité calorifique à volume constant Cv(T) à haute

température et à basse température. Tracer l'allure de Cv(T) en fonction de la température puis comparer cette courbe aux résultats expérimentaux.