

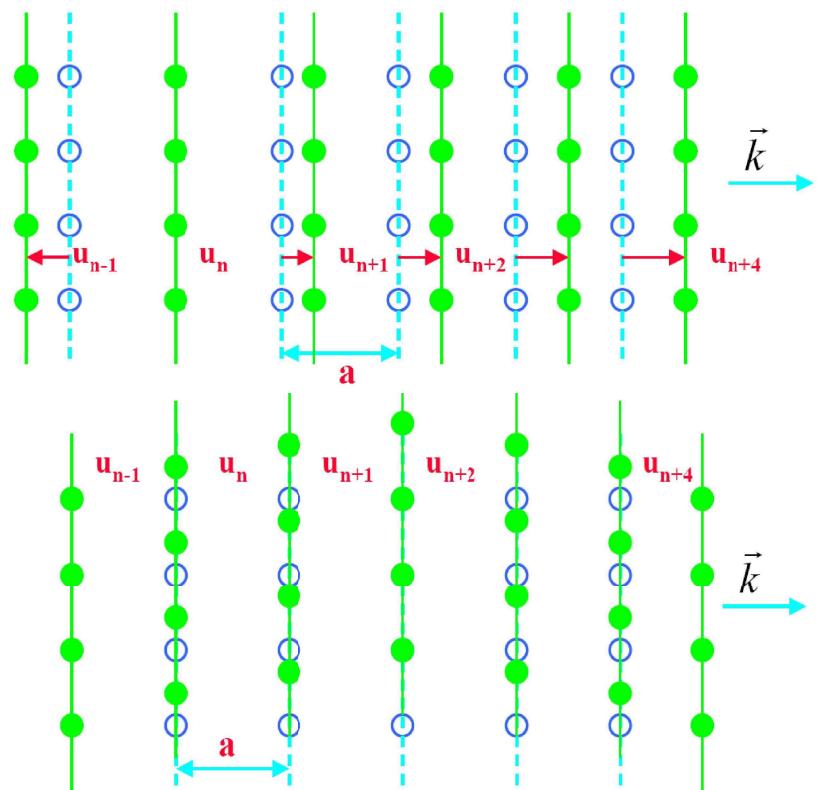
## Chapitre 4- Phonons I: Vibrations du réseau

- Nous avons vu que les atomes s'organisaient dans les cristaux pour former des structures cristallines bien définies.
- Si on se place à 0 K, les atomes sont fixes dans leurs positions d'équilibre. Si on augmente la température, les atomes vont vibrer autour de leurs positions d'équilibre.
- L'énergie d'une vibration est quantifiée et le quantum d'énergie est appelé phonon (par analogie avec les photons).
- Dans ce chapitre nous étudierons les modes de vibration d'un cristal et l'énergie de ces modes.

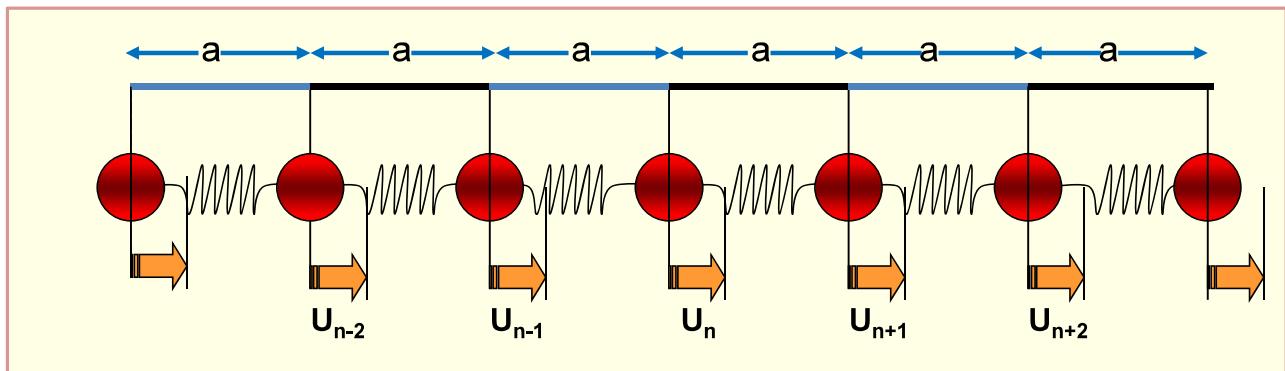
### 1. Chaîne monoatomique

Le cristal le plus simple est une chaîne unidimensionnelle d'atomes identiques. La solution la plus simple pour un cristal cubique correspond aux directions de propagation [100], [110], [111].

Les plans d'atomes à l'équilibre (en pointillés). Les plans d'atomes déplacés par une onde longitudinale (en traits pleins). La coordonnée  $u$  mesure le déplacement des plans



- $u_s$  est le déplacement de l'atome s par rapport à son point d'équilibre.
- Comme première approximation, nous pouvons considérer 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 n<sup>ième</sup> atome et ses deux proches voisins (n-1)<sup>ième</sup> et (n+1)<sup>ième</sup> atome



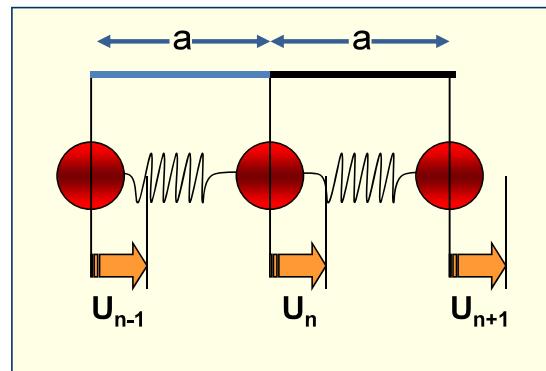
### La force a la n<sup>ième</sup> atome;

- La force a droite;

$$C(u_{n+1} - u_n)$$

- La force a gauche;

$$C(u_n - u_{n-1})$$



(C est la constante du ressort)

- La force totale = Force a droite – Force a gauche

$$F = C((u_{s+1}(t) - u_s(t)) - (u_s(t) - u_{s-1}(t)))$$

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

$$F = Ma = M \frac{d^2 u_s(t)}{dt^2} = C(u_{s+1}(t) + u_{s-1}(t) - 2u_s(t))$$

Equation de mouvement de tous les atomes sont de cette forme, seule la valeur de «s» varie

Dépendance en temps  $u_s(t) = u_s e^{-i\omega t}$   $\rightarrow \frac{d^2 u_s(t)}{dt^2} = -\omega^2 u_s e^{-i\omega t}$

$$-M\omega^2 u_s = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s)$$

Essayons une solution de la forme:  $u_s = ue^{iKsa}$

$$-M\omega^2 ue^{iKsa} = C(ue^{iK(s+1)a} + ue^{iK(s-1)a} - 2ue^{iKsa})$$

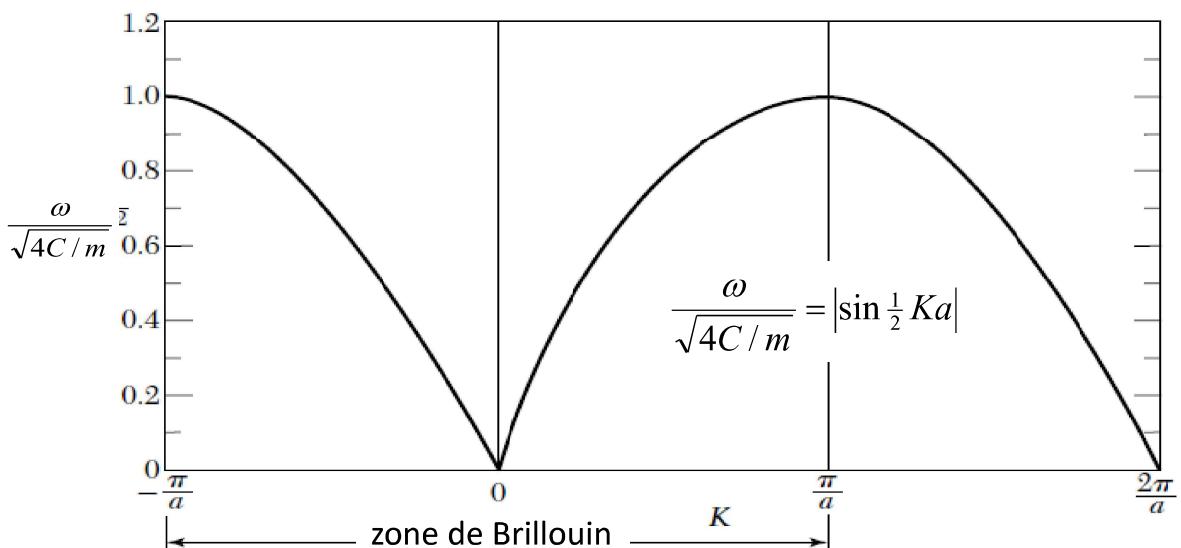
$$-M\omega^2 ue^{iKsa} = Cue^{iKsa} \left( e^{iKa} + e^{-iKa} - 2 \right)$$

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

$$\rightarrow \omega^2 = \frac{4C}{M} \left( \sin^2 \left( \frac{Ka}{2} \right) \right) \rightarrow \omega(K) = \sqrt{\frac{4C}{M}} \left| \sin \left( \frac{Ka}{2} \right) \right|$$

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

### La relation de dispersion



Représentation de la relation  $\omega = f(K)$  pour un chaîne monoatomique avec interaction entre premiers proches voisins .

## - 1<sup>er</sup> zone de Brillouin

Le rapport de déplacement de deux plans successifs est donné par:

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = \frac{ue^{i(s+1)Ka}}{ue^{isKa}} = e^{iKa}$$

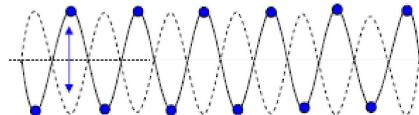
Pour des valeurs de  $Ka$  comprises entre  $-\pi$  et  $\pi$ , l'exponentielle prend toutes les valeurs indépendantes possibles.

$$-\pi \leq Ka \leq \pi \quad \rightarrow \quad \frac{-\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}$$

Ce domaine de valeur de  $K$  est confondu avec la première zone de Brillouin de la chaîne linéaire, les valeurs extrêmes en sont  $K_{\max} = \pm \pi/a$ .

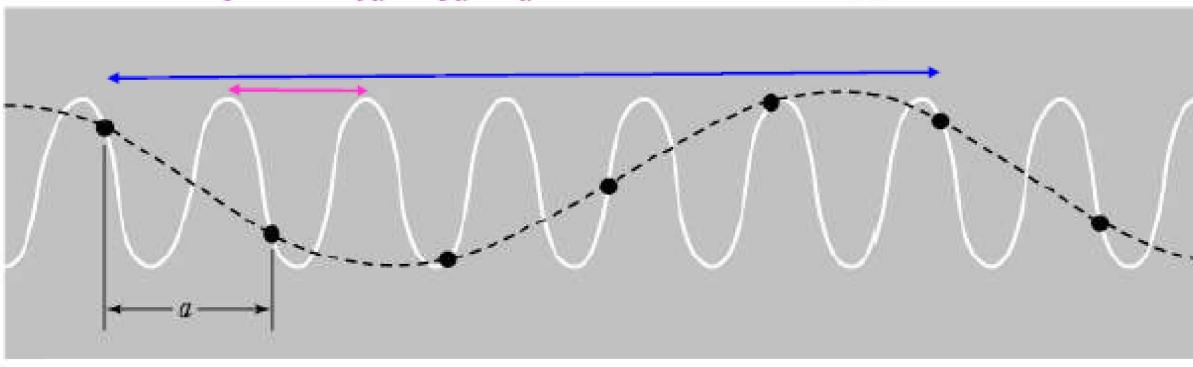
Aux limites de la 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin  $K_{\max} = \pm \pi/a$ , la solution est:

$$u_s = ue^{isKa} = ue^{\pm is\pi} = u(-1)^s$$



Ceci est une onde stationnaire: des atomes voisins vibrent en opposition de phase Car  $u_s = \pm 1$  suivant que  $n$  est entier pair ou impair. La situation est équivalente à la réflexion de Bragg des rayons X.

$$\lambda = \frac{5a}{6} \Rightarrow k = \frac{12\pi}{5a} = \frac{2\pi}{5a} + \frac{2\pi}{a} \quad \lambda = 5a \Rightarrow k = \frac{2\pi}{5a}$$



$$K_{\max} = \pm \frac{\pi}{a} \rightarrow u_s(K + 2K_{\max}) = u_0 e^{iKas} e^{\pm i2\pi s} = u_0 e^{iKas} = u_s(K)$$

L'onde représentée par la courbe continue n'apporte aucune information supplémentaire par rapport à la courbe en pointillés. Pour représenter le mouvement on n'a besoin que de longueurs d'ondes supérieures à  $2a$ .

## - Vitesse de groupe

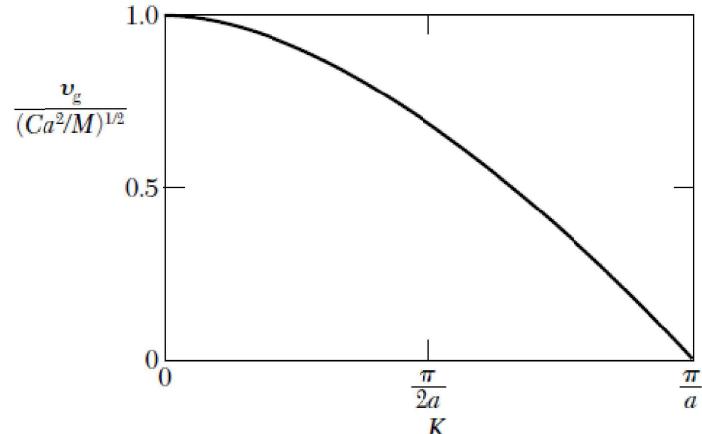
La vitesse d'un paquet d'ondes est la vitesse de groupe, définie par:

$$v_g = \frac{d\omega}{dK} = \sqrt{\frac{Ca^2}{M}} [\cos(\frac{Ka}{2})]$$

La vitesse de groupe est nulle en bord de la première zone de Brillouin  $\mathbf{K} = \pm \pi / a$ . Ceci ne surprend pas dans le cas d'une onde stationnaire.

Pour  $Ka \ll 1$ , nous avons:  $\cos Ka \approx 1 - \frac{1}{2}(Ka)^2 \rightarrow \omega^2 = \frac{2C}{M}(1 - \cos(Ka)) \approx (\frac{Ca^2}{M})K^2$

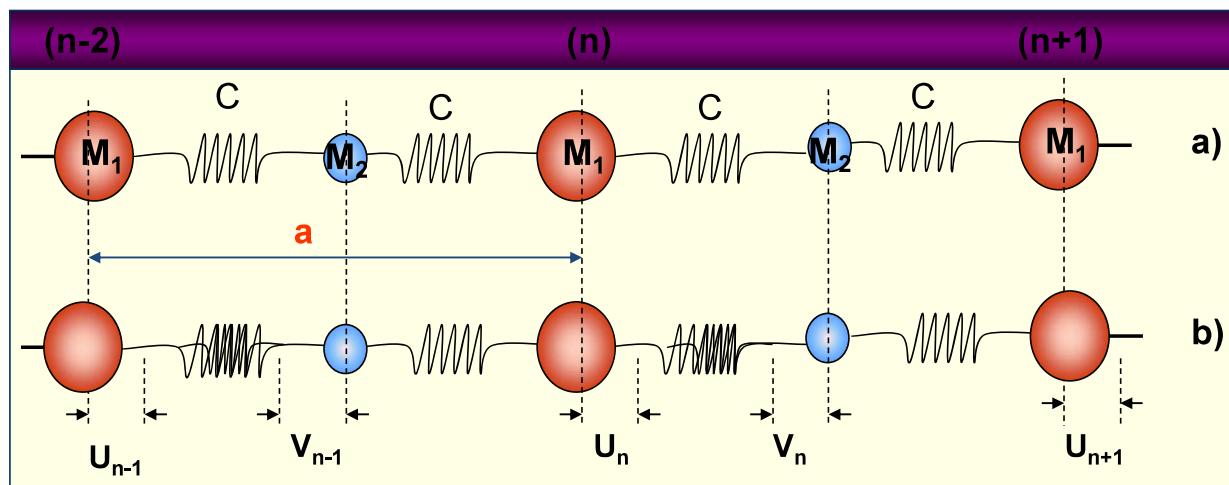
La proportionnalité trouvée entre la fréquence et le vecteur d'onde montre que la vitesse du son est indépendante de la fréquence dans le cas des grandes longueurs d'onde.



Vitesse de groupe  $v_g$  en fonction du module du vecteur d'onde  $K$ . A la limite de la première zone de Brillouin la vitesse de groupe est nulle.

## 2. Chaîne diatomique

On considère un cristal à une dimension géométrique et ayant 2 atomes différents par maille élémentaire de masses  $M_1$  et  $M_2$ . Les atomes sont connecté par des ressorts identiques de constante de rappel  $C$ ;



Équations de mouvement pour tous les atomes de la chaîne:

$$M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s)$$

$$M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_s - 2v_s)$$

**Cherchons des solutions sous la forme d'une onde de propagation d'amplitudes u et v.:**

$$\begin{array}{ll} \text{Pour la masse } M_1 & u_s = ue^{isKa-i\omega t} \\ \text{Pour la masse } M_2 & v_s = ve^{isKa-i\omega t} \end{array}$$

$$\rightarrow \begin{cases} (2C - M_1\omega^2)u - C(1 + e^{-iKa})v = 0 \\ -C(1 + e^{iKa})u + (2C - M_2\omega^2)v = 0 \end{cases}$$

Le système d'équations linéaires homogènes à deux inconnues u et v n'a de solutions non nulles que si le déterminant du système est nul.

$$\begin{vmatrix} [2C - M_1\omega^2] & -C[1 + e^{-iKa}] \\ -C[1 + e^{iKa}] & [2C - M_2\omega^2] \end{vmatrix} = 0$$

$$\rightarrow M_1M_2\omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos(Ka)) = 0$$

C'est une équation bicarré en  $\omega$ .

Pour  $K$  petit:  $\cos Ka \approx 1 - \frac{1}{2}K^2a^2 + \dots$

$$M_1M_2\omega^4 - 2C(M_1 + M_2)\omega^2 + C^2K^2a^2 = 0$$

$$\omega_{\pm}^2 \approx \frac{2C(M_1 + M_2) \pm \sqrt{4C^2(M_1 + M_2)^2 - 4M_1M_2C^2K^2a^2}}{2M_1M_2}$$

$$\omega_{\pm}^2 \approx \frac{2C(M_1 + M_2) \pm 2C(M_1 + M_2)\sqrt{1 - \frac{4M_1M_2C^2K^2a^2}{4C^2(M_1 + M_2)^2}}}{2M_1M_2}$$

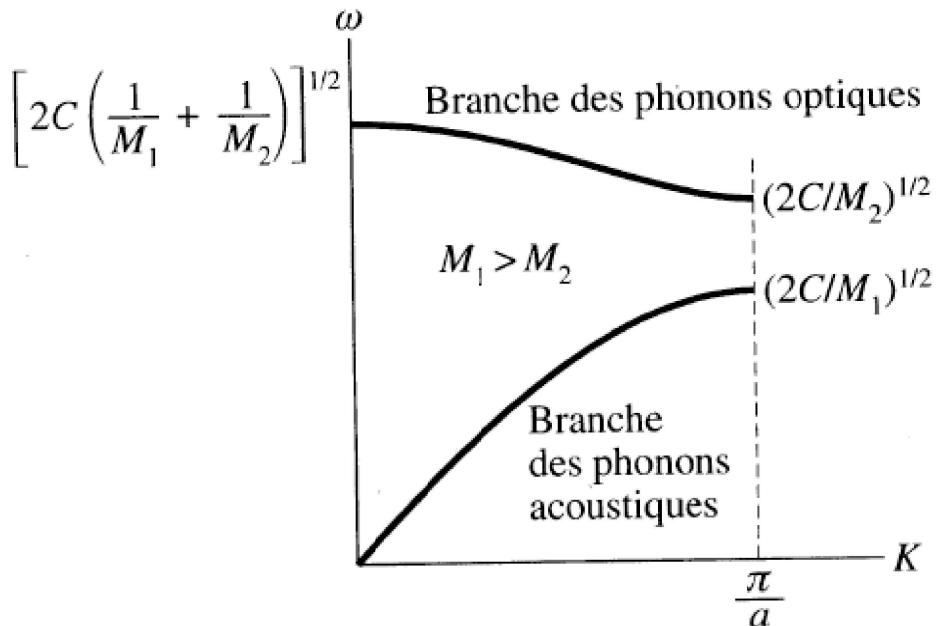
$$\omega_{\pm}^2 \approx \frac{2C(M_1 + M_2) \pm 2C(M_1 + M_2)\left(1 - \frac{1}{2}\frac{M_1M_2K^2a^2}{(M_1 + M_2)^2}\right)}{2M_1M_2}$$

$$\omega_{\pm}^2 \approx \frac{2C(M_1 + M_2) \pm \left(2C(M_1 + M_2) - \frac{M_1M_2CK^2a^2}{(M_1 + M_2)}\right)}{2M_1M_2}$$

mode optique

### mode acoustique

$$\omega_+^2 \approx \frac{2C(M_1 + M_2)}{M_1 M_2}, \quad \omega_-^2 \approx \frac{C}{2(M_1 + M_2)} K^2 a^2$$



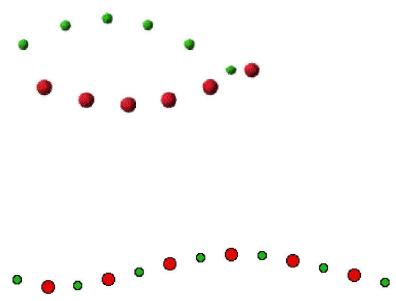
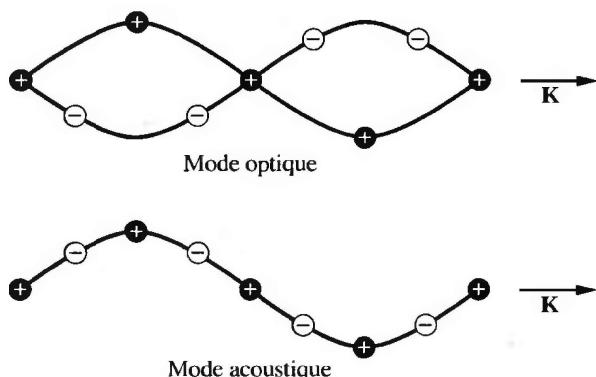
Courbes de dispersion des vibrations dans un réseau linéaire de 2 atomes par maille primitive.

- Pour la branche optique à  $K = \mathbf{0}$ , on a:  $\frac{u}{v} = -\frac{M_2}{M_1}$

Les deux atomes vibrent l'un par rapport à l'autre mais leurs centres de gravité restent fixes. Si les atomes ont des charges opposées, on peut engendrer une vibration de ce type par le champ électrique d'une onde lumineuse, c'est pourquoi cette branche est appelée branche optique.

- Pour  $K$  petit une autre solution possible est le rapport:  $\frac{u}{v} = 1$

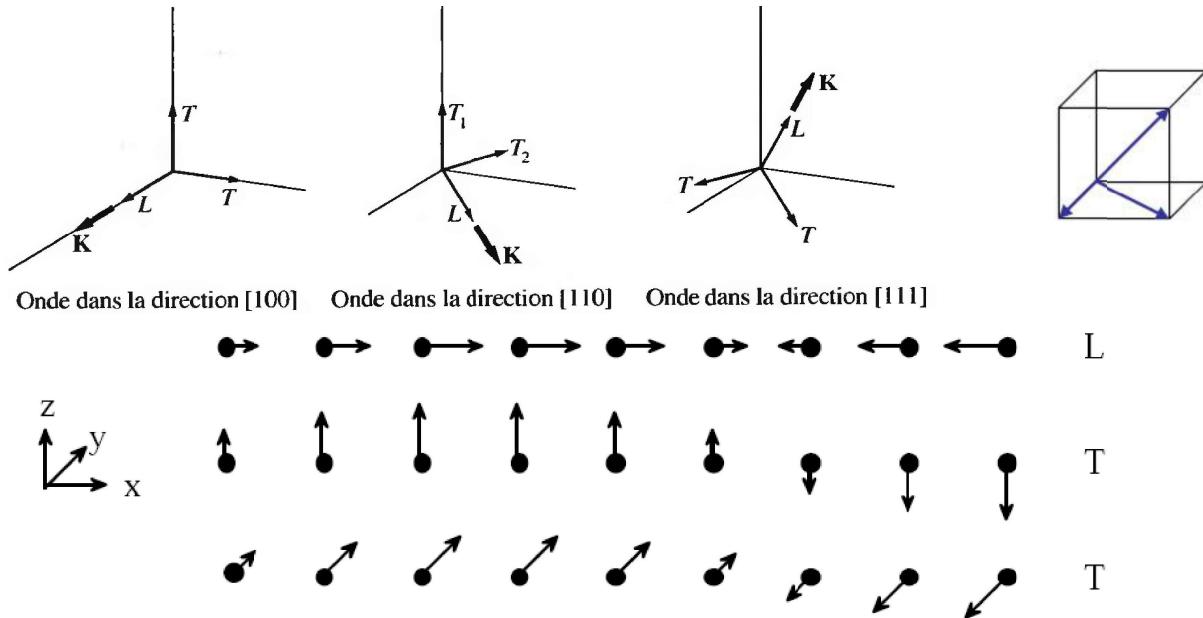
Les atomes vibrent ensemble comme dans les vibrations acoustiques de grande longueur d'onde d'où l'appellation branche acoustique.



Vibrations 1D transverses selon les branches acoustiques et optiques.

## - Généralisation à un cristal 3D

Dans un cristal 3D l'espace réciproque devient également 3D et aux modes longitudinaux (acoustiques et optiques) que l'on a en 1D s'ajoutent dans chaque cas 2 modes transverses polarisés à 90° l'un de l'autre, comme illustré sur la Figure suivante



Le mode de vibration longitudinal (L) et les 2 modes transverses (T) d'un réseau 3D.

### 3. Diffusion inélastique des neutrons par des phonons

- La diffusion inélastique des neutrons est la méthode idéale de détermination expérimentale du spectre des phonons.
- La méthode n'est pas applicable lorsqu'il y a une forte absorption des neutrons par les noyaux du cristal.
- La largeur angulaire du faisceau diffusé permet aussi d'obtenir la durée de vie du phonon.
- Un neutron voit principalement par interaction avec les noyaux des atomes
- La cinématique de la diffusion d'un faisceau diffusé par un réseau cristallin est décrite par la relation de conservation du vecteur d'onde ci-dessous, ainsi que par la relation de conservation de l'énergie:

$$\mathbf{k}' \pm \mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$$

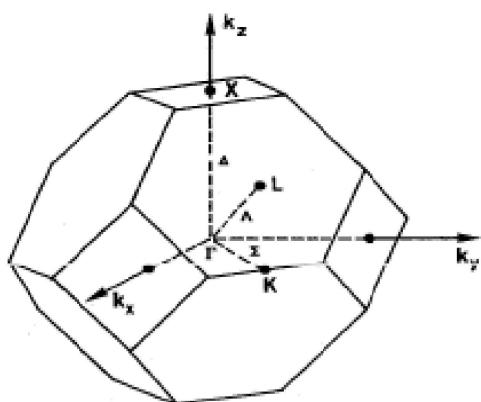
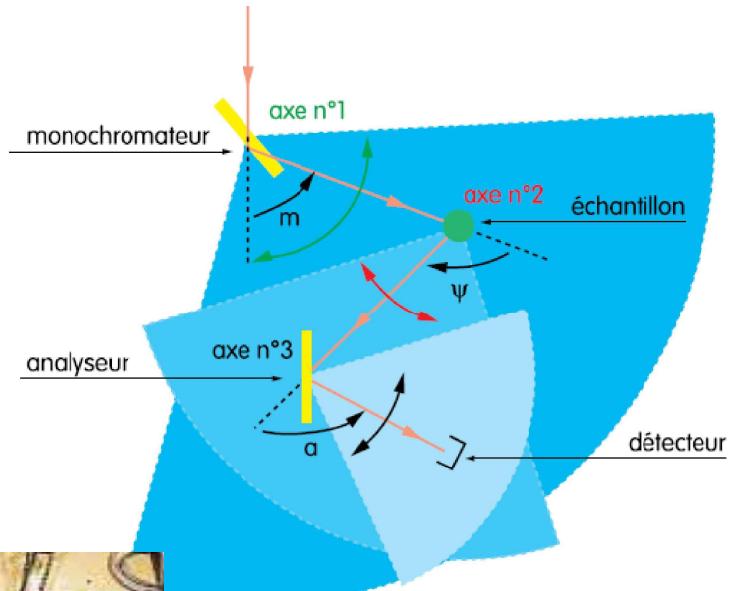
$\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$ ; le vecteur d'onde du neutron incident et diffusé

$\mathbf{G}$ : vecteur du réseau réciproque, pour que  $\mathbf{K}$  appartienne à la 1ère Z.B.

$\mathbf{K}$  : vecteur d'onde du phonon créé (+) ou absorbé (-)

- Conservation de l'énergie : 
$$\frac{\hbar^2 k^2}{2M_n} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2M_n} \pm \hbar\omega$$

## spectromètre à trois axes 1T1



Point  $\Gamma$  : centre de zone

Directions  $\Delta$  : direction 100 et équivalentes

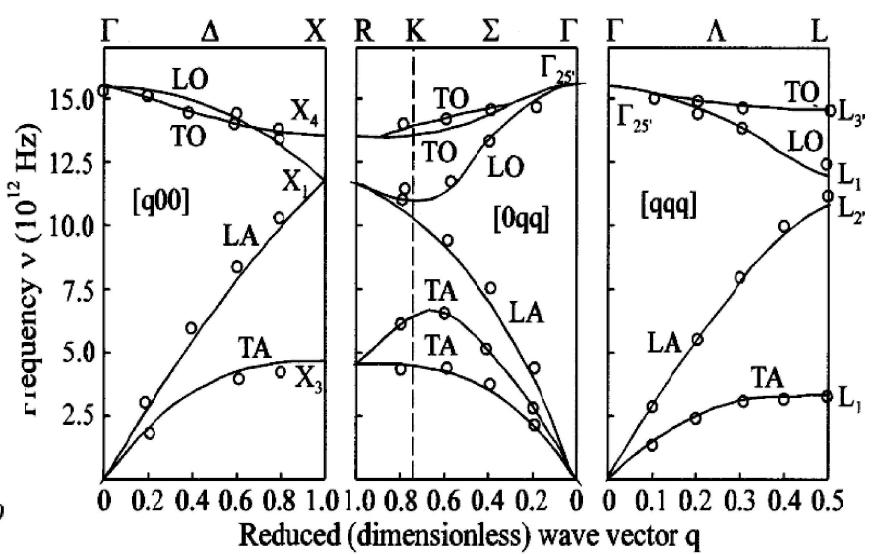
Directions  $\Lambda$  : direction 111 et équivalentes

Directions  $\Sigma$  : direction 110 et équivalentes

Points  $X$  : bord de zone dans la direction 100 et les directions équivalentes

Points  $L$  : bord de zone dans la direction 111 et les directions équivalentes

Points  $K$  : bord de zone dans la direction 110 et les directions équivalentes



Courbes de dispersion expérimentales du silicium suivant 3 directions cristallographiques. Dolling (1963) and Tubino et al. (1972)