

TD 5 – Dynamique du réseau et phonons

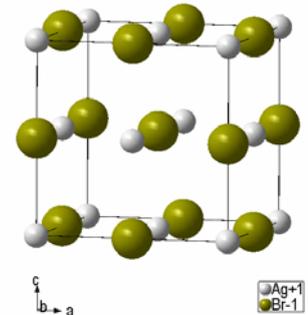
1. On rappelle que, pour un réseau 1D de  $N$  atomes égaux de masse  $M$  et de paramètre de maille  $a$ , le déplacement  $u_n(t)$  de l'atome  $n$  par rapport à sa position d'équilibre  $x_n=na$  est décrit par l'expression suivante :

$$u_n(t) = \sum_q \left[ u_q e^{i(qna - \omega_q t)} + c.c. \right]$$

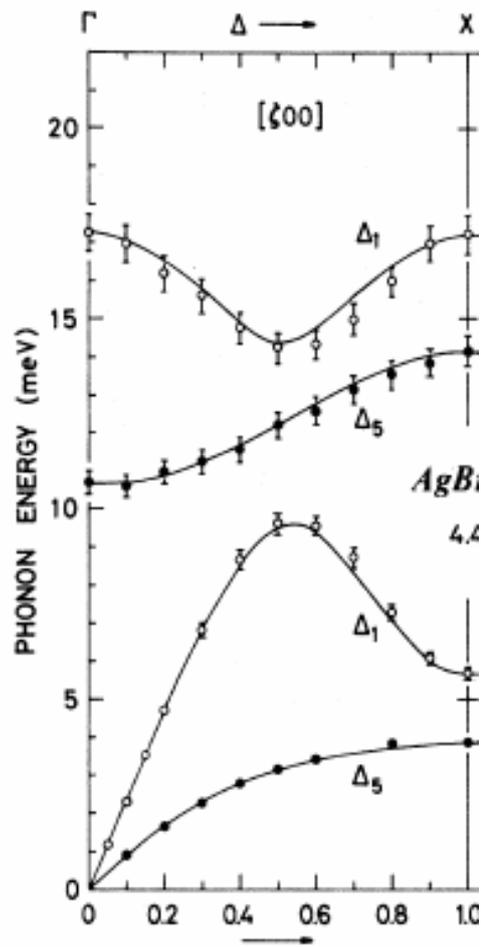
A partir de cette expression et en utilisant le théorème du viriel, calculer l'énergie totale (cinétique et vibratoire) d'un tel réseau.

2. Pour un réseau unidimensionnel ayant deux atomes par maille, de masse  $M_1$  et  $M_2$
- vérifier l'orthogonalité des modes acoustique et optique ;
  - en utilisant les résultats des questions 1 et 2a, vérifier que l'énergie totale (cinétique et vibratoire) du système est la somme de l'énergie de chaque mode.
3. On considère le composé cubique AgBr (voir figure, paramètre de maille  $a = 5.77 \text{ \AA}$ ).

- Determiner le nombre d'atomes par maille réduite et en déduire le nombre de modes de vibration.
- A partir des courbes de dispersion selon la direction  $\Gamma$ -X [100] de la figure à la page suivante, identifier les modes acoustiques et leurs polarisations transverse et longitudinale. Discuter le résultat obtenu, en particulier la dégénérescence des modes transverses, sachant que la structure du cristal est à faces centrées.



- Estimer la vitesse du son des modes acoustiques longitudinaux et transverses.



[Y. Fujii *et al.*, 1976]