

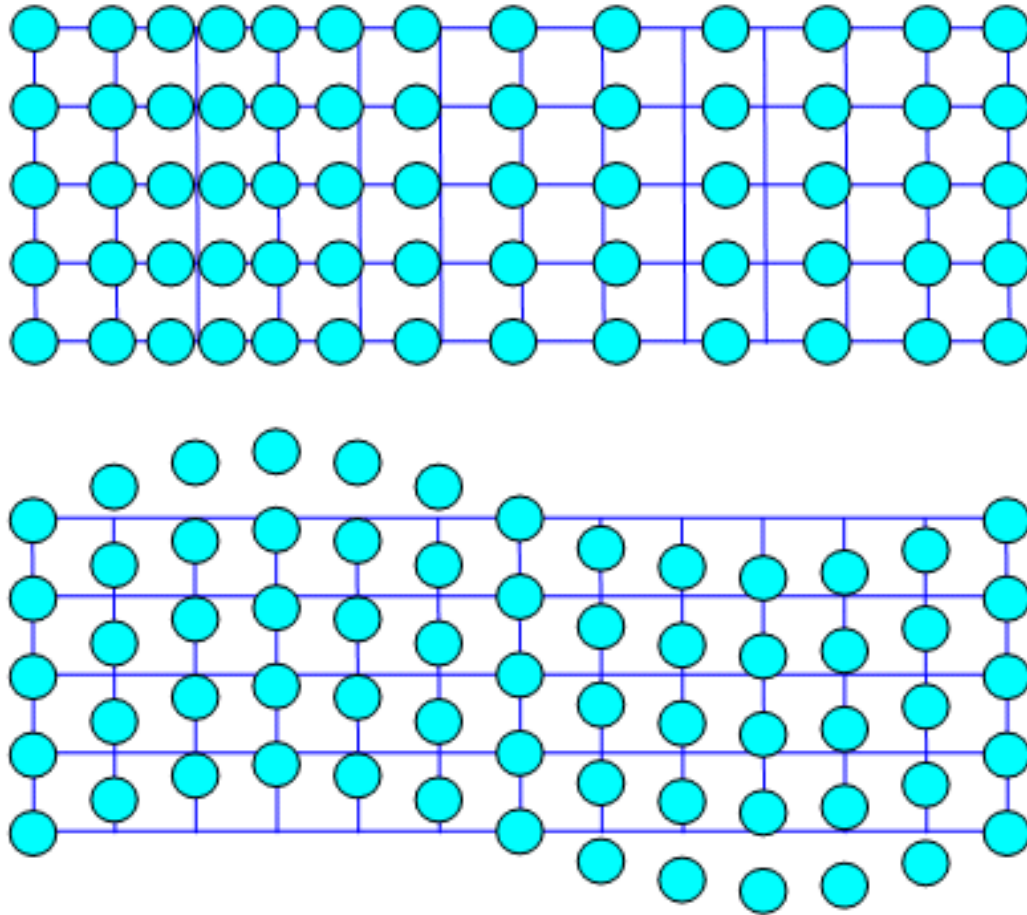
## **COURS 6. Phonons**

Ce cours définit les particules virtuelles correspondant aux vibrations du réseau cristallin, les phonons. L'objectif est d'appréhender plusieurs descriptions théoriques des phonons, et d'évoquer l'analogie entre la théorie des bandes électroniques et la théorie des bandes de phonons.

Plan du cours :

- Introduction
- A. Capacité thermique
- B. Propagation d'ondes en milieu continu
- C. Vibration en milieu discret : chaîne atomique 1D
- D. Vibration milieu discret : chaîne 1D, discussion
- E. Structure de bandes de phonon, calcul
- F. Structure de bandes de phonon, discussion
- G. Phonons, cas général 3D
- Résumé
- Annexe. Site interactif phonons

# Phonon = vibration du réseau cristallin



# Vibration du réseau, pourquoi est-ce important ?

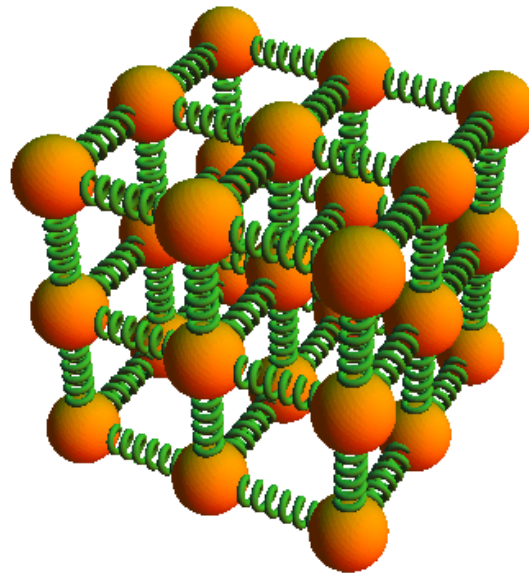
Capacité thermique

Résistivité électrique

Relaxation après excitation optique

Supraconductivité

...



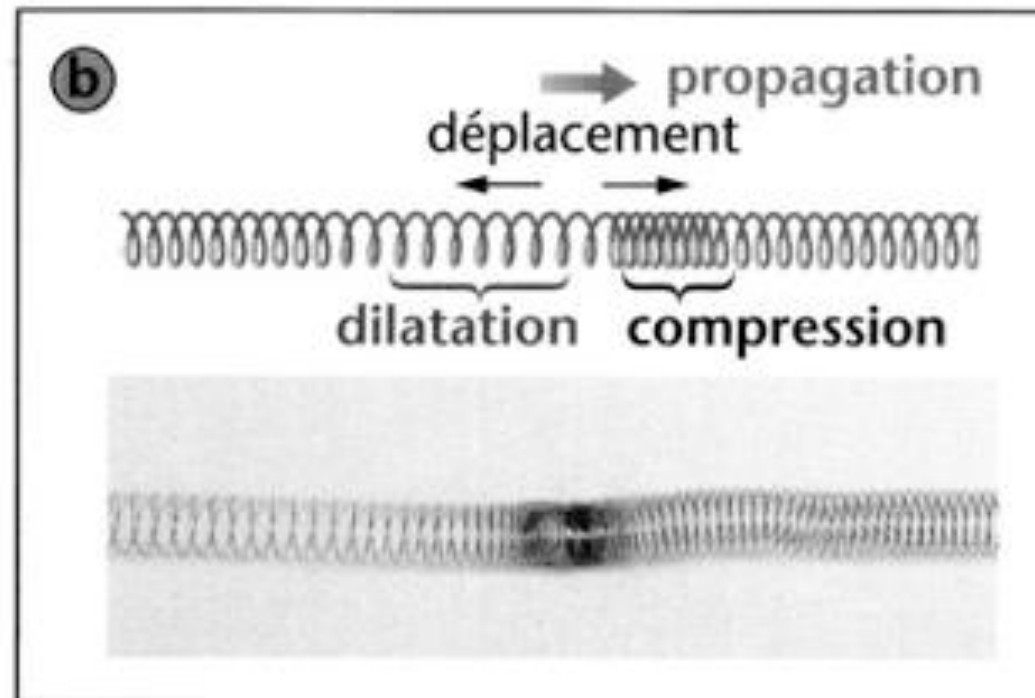
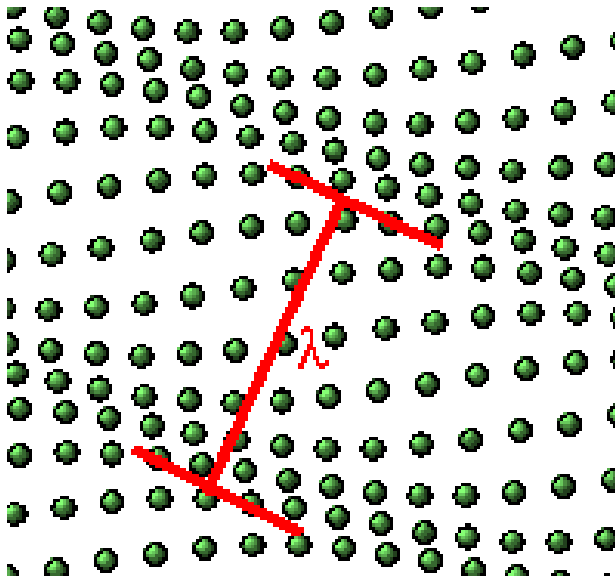
## Caractéristique des phonons : onde, particule

Onde - Vecteur d'onde  $q$  pulsation  $\omega$

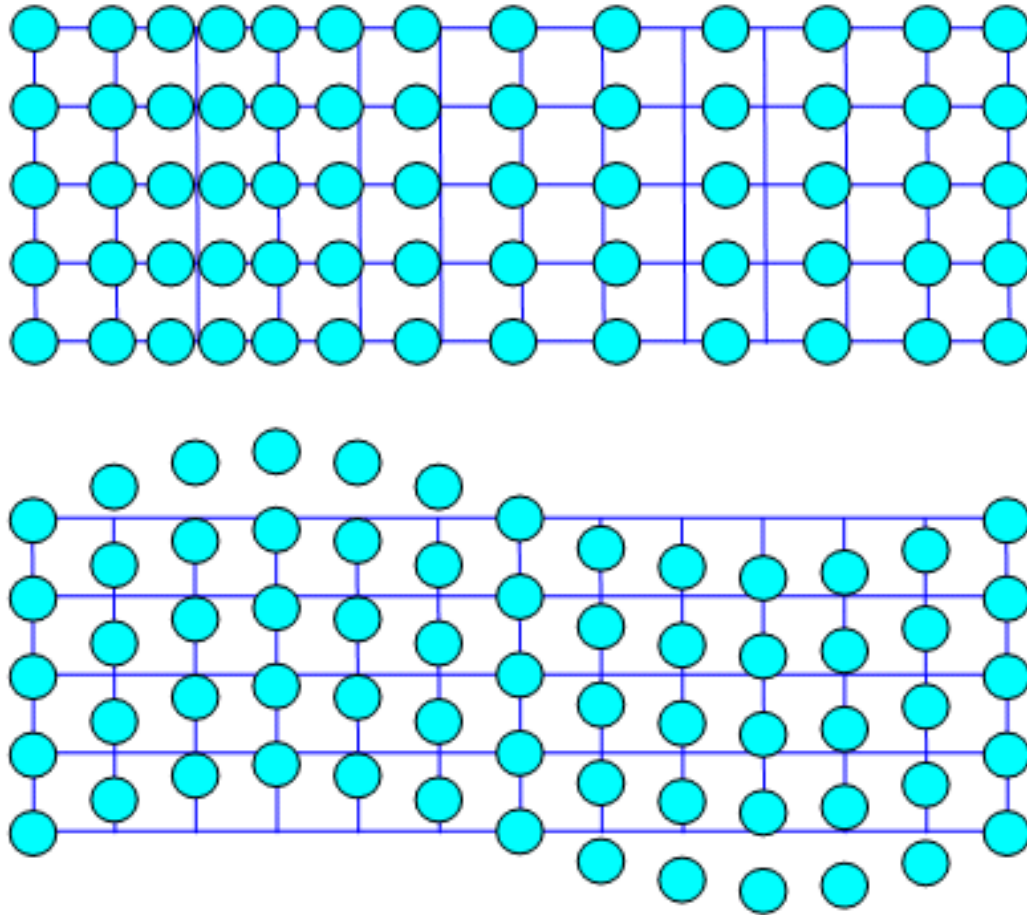
Particule, d'énergie quantifiée  $\hbar\omega$

Relation de dispersion  $\omega(q)$

Structure de bande



Phonon = vibration du réseau cristallin



# Vibration du réseau, pourquoi est-ce important ?

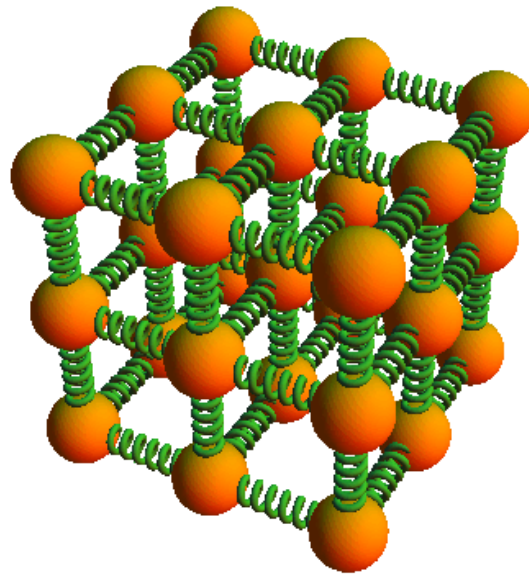
Capacité thermique

Résistivité électrique

Relaxation après excitation optique

Supraconductivité

...



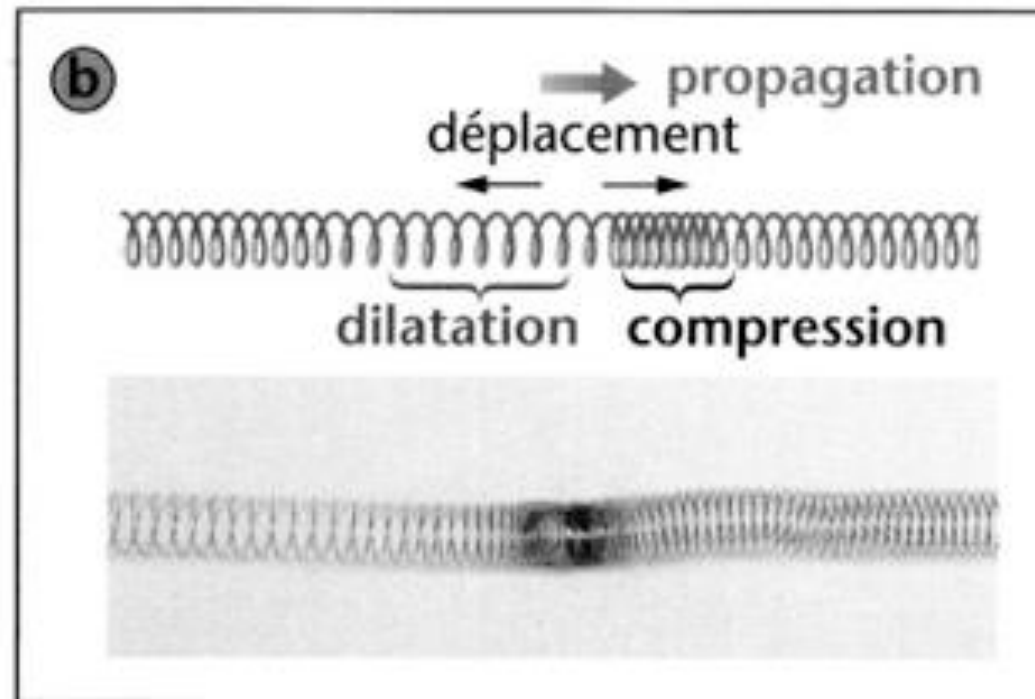
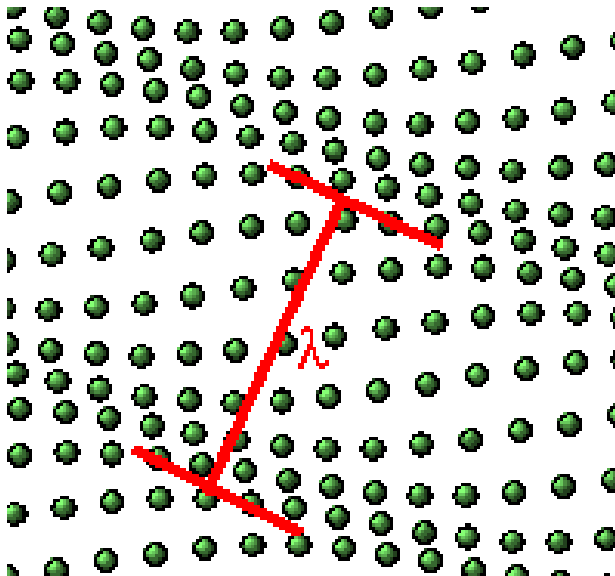
## Caractéristique des phonons : onde, particule

Onde - Vecteur d'onde  $q$  pulsation  $\omega$

Particule, d'énergie quantifiée  $\hbar\omega$

Relation de dispersion  $\omega(q)$

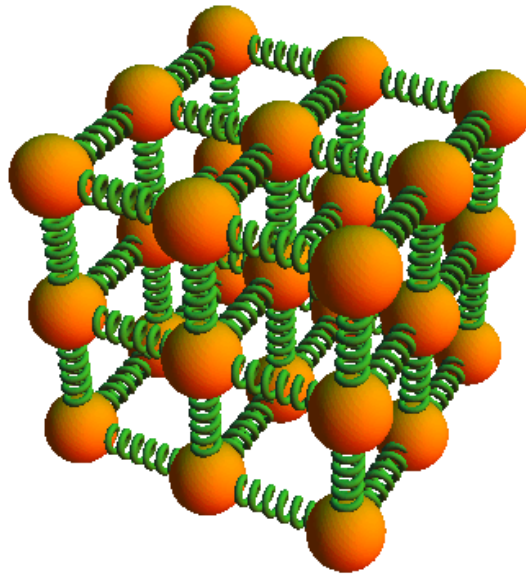
Structure de bande





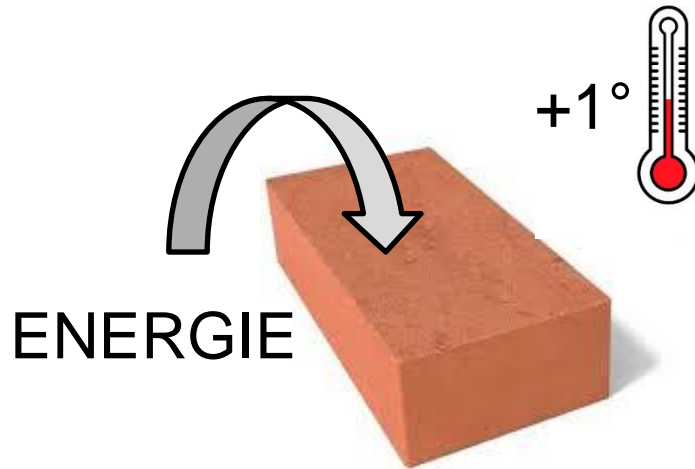


## Capacité thermique



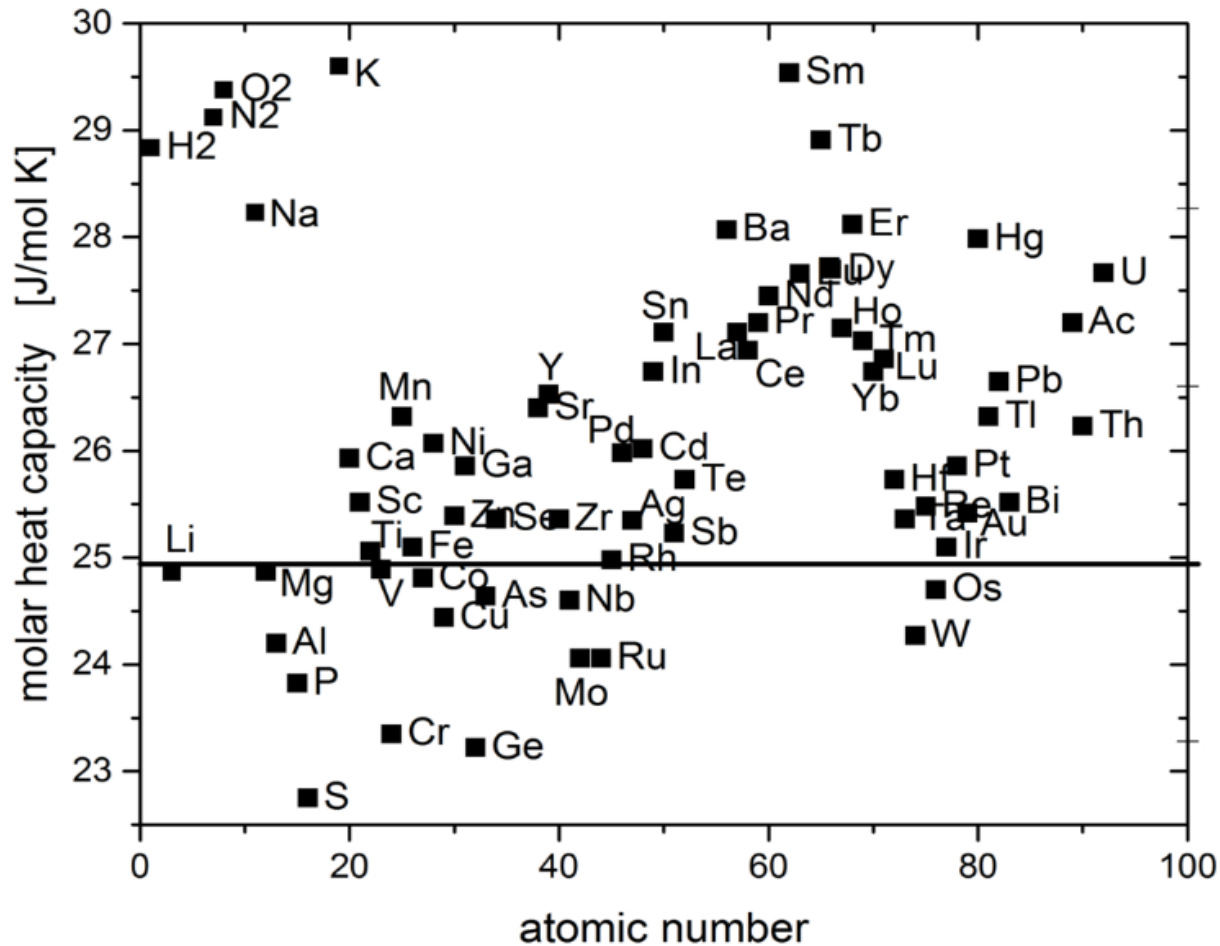
Une preuve de l'effet des vibrations des atomes

## Capacité thermique (défini à volume $V$ constant)



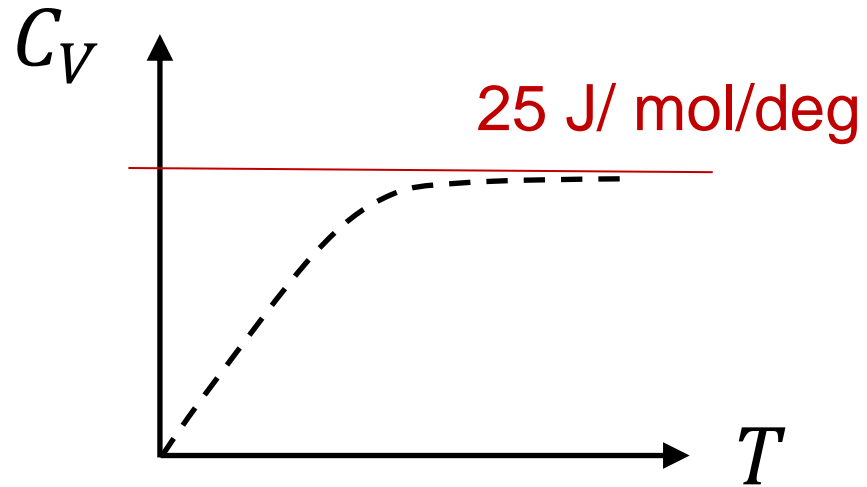
$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$$

Quantité d'énergie à donner à un matériau pour augmenter sa température de 1 degré



Dulong et Petit (~1819) mesurent approximativement la même valeur de  $C_V$  pour plusieurs composés

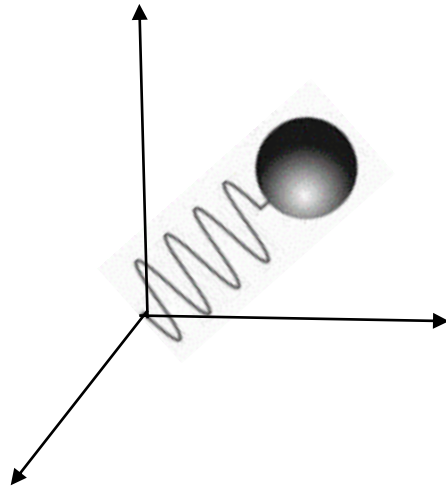
Dépendance en température mesurée



## Théorie classique (Boltzmann, ~1870)

Chaque atome est lié au solide par une force harmonique

Les atomes vibrent lorsque le solide est chauffé



Pour chaque N atome du solide

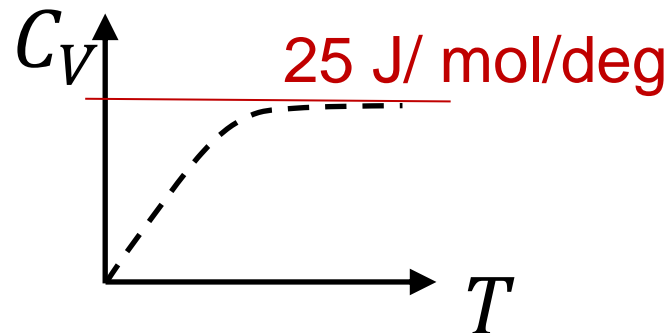
Pour un oscillateur (3D) :  $E_{atome} = 3k_B T$

[voir phys. stat., théorème d'équipartition]

$$E_{\text{atome}} = 3k_B T$$

$$E_{\text{mole}} = 3N_A k_B T = 3RT$$

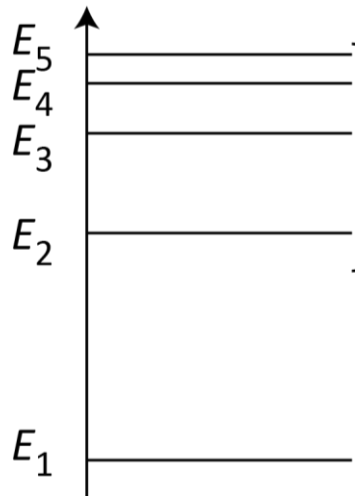
→ Capacité thermique  $C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = 3R \approx 25 \text{ J/mol/deg}$



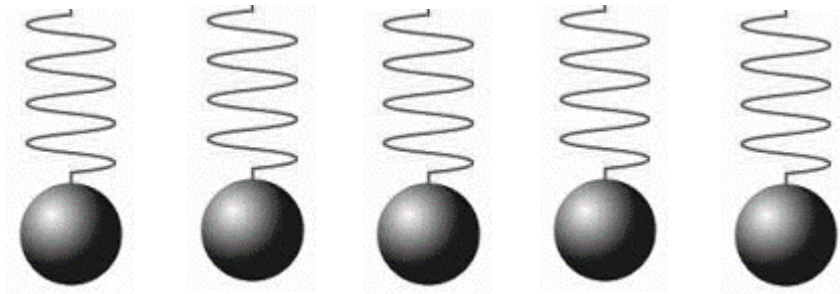
Permet de prédire la bonne valeur à haute température  
mais pas le comportement à basse température

# La description d'Einstein (1906-1907)

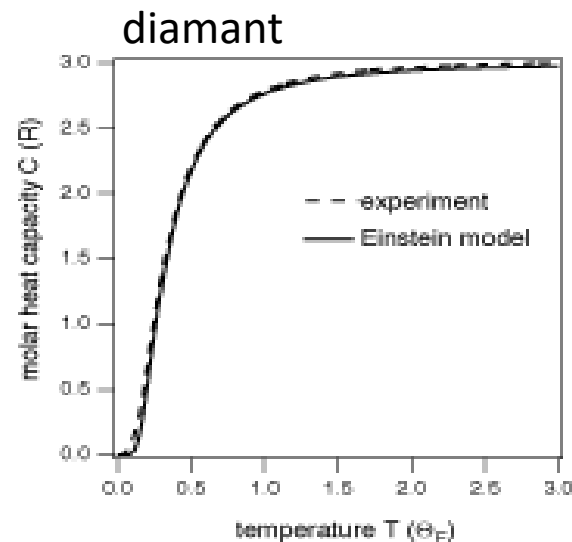
- **Energie**  
d'oscillation  
**quantifiée**



- Solide = **oscillateurs identiques et découplés** vibrant à la même fréquence  $\omega_E$ .



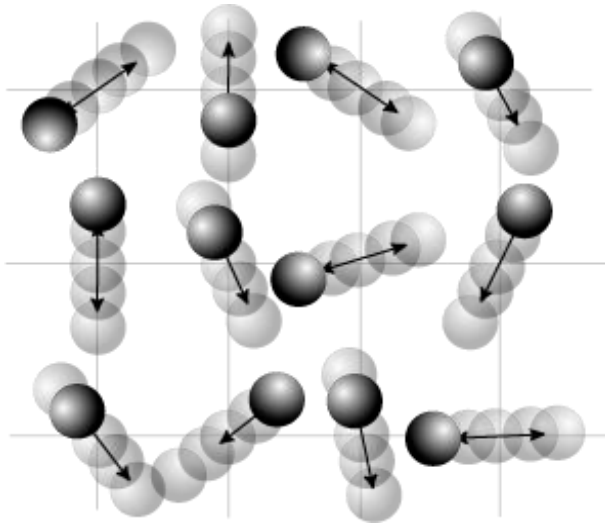
Rend compte de la dépendance en température avec un seul paramètre libre



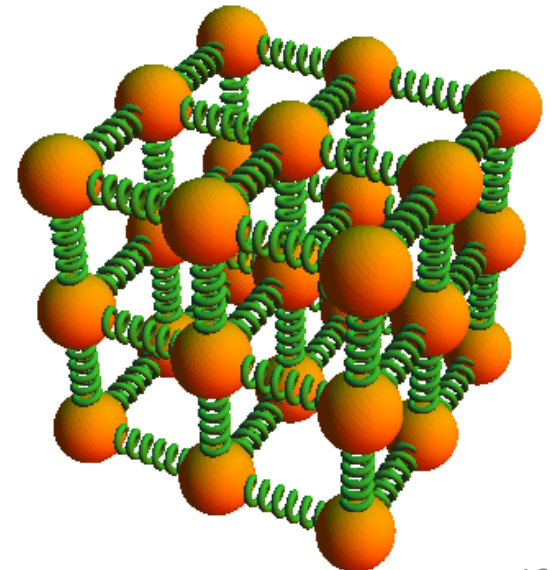
## POUR RESUMER

Capacité thermique  $\rightarrow$  les atomes oscillent

On a vu : modèle d'**oscillateurs découplés**



A venir. **oscillateurs en interaction**  
indispensable pour la description d'autres propriétés

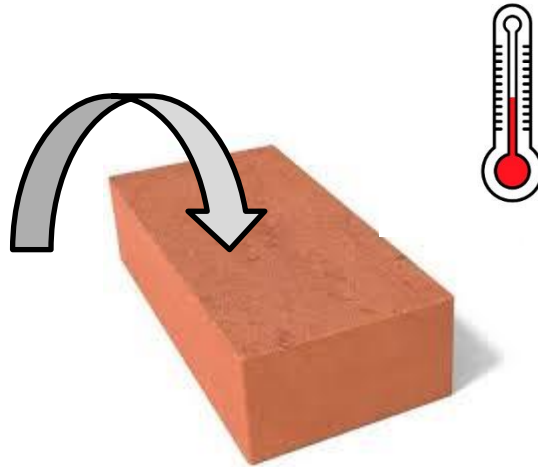




a1. La capacité thermique est

1. La température maximale d'un matériau

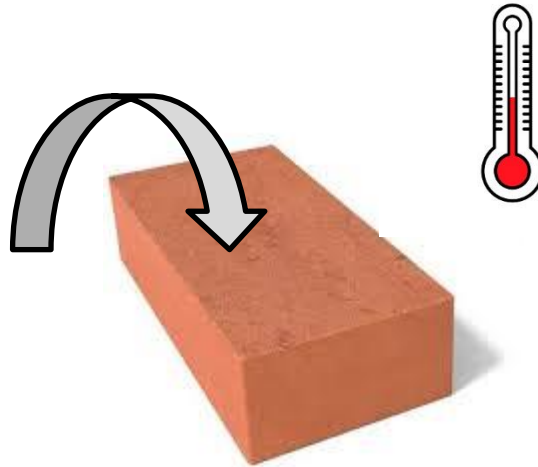
2. l'énergie à donner à un matériau pour augmenter sa température de 1 degré.



a1. La capacité thermique est

1. La température maximale d'un matériau

**2. l'énergie à donner à un matériau pour augmenter sa température de 1 degré.**



a2. La capacité thermique est principalement liée :

1. Aux vibrations du réseau cristallin
2. A l'émission d'électrons
3. A l'absorption de photons

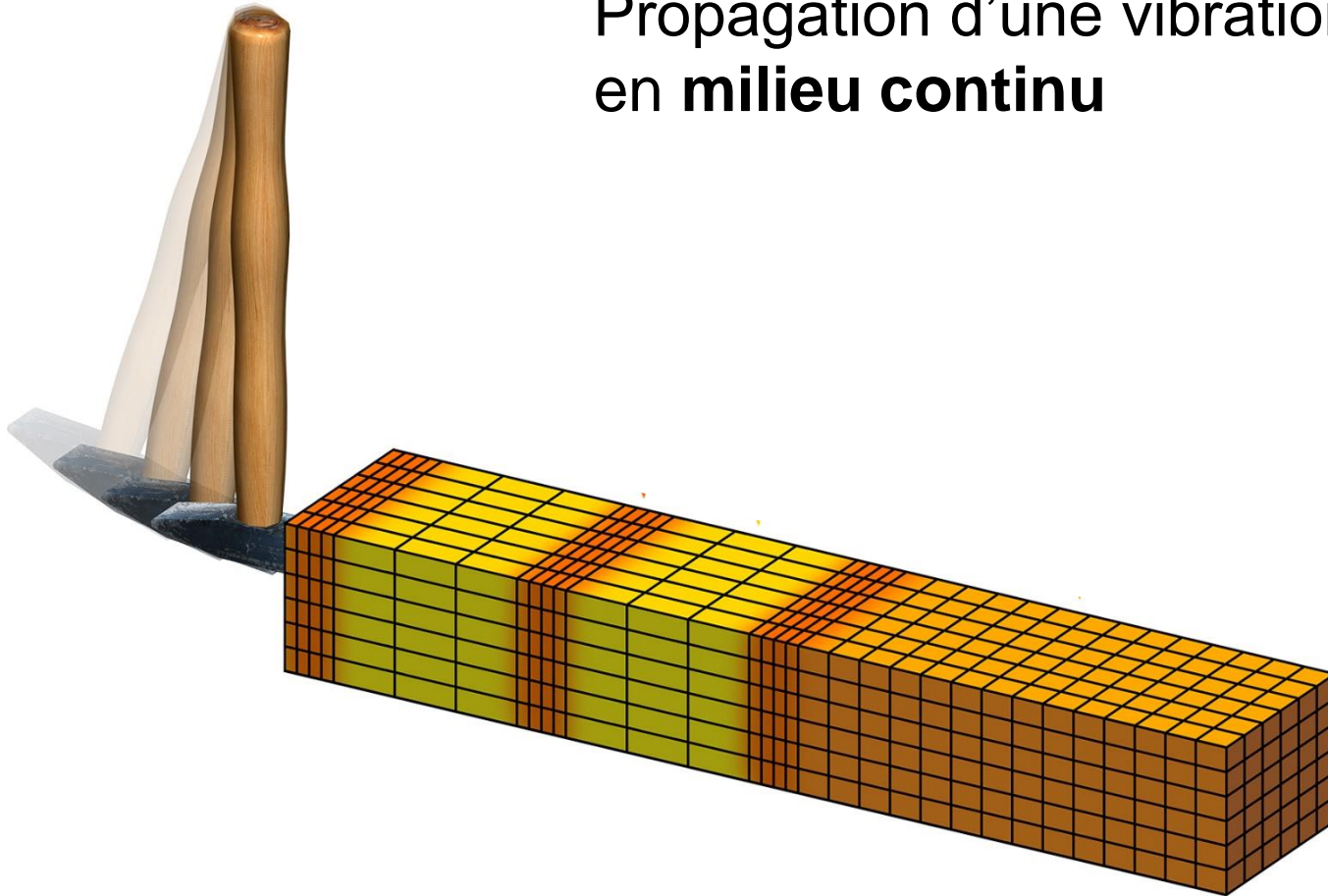
a2. La capacité thermique est principalement liée :

**1. Aux vibrations du réseau cristallin**

2. A l'émission d'électrons

3. A l'absorption de photons

## Propagation d'une vibration en **milieu continu**

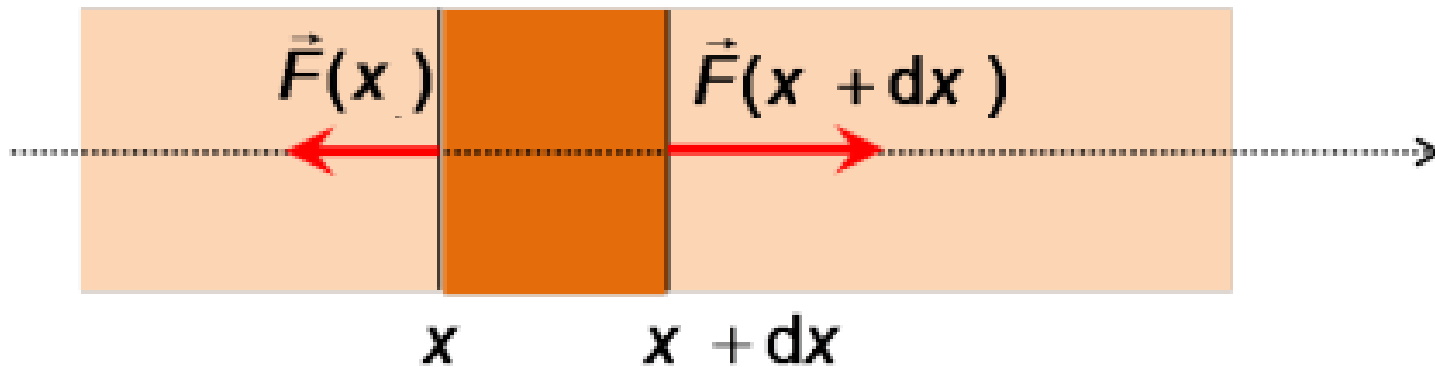


$$F = Y \frac{du}{dx} S$$

[Loi de Hookes]

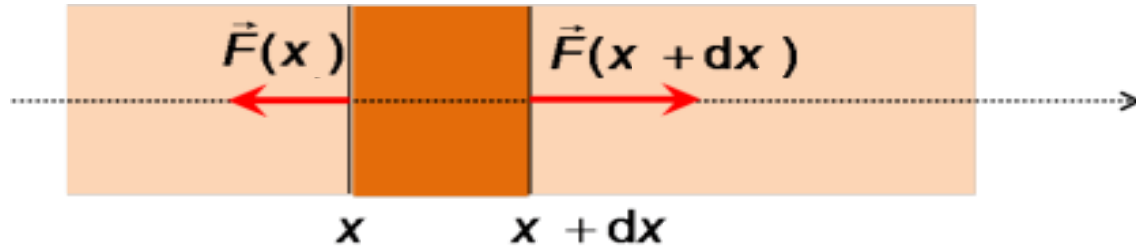
module de Young = cste

section



$$YS \left( \frac{du(x+dx)}{dx} - \frac{du(x)}{dx} \right) = (\rho S dx) \frac{d^2 u}{dt^2} \quad [\text{Newton}]$$

densité volumique



$$Y \underbrace{S \left( \frac{du(x+dx)}{dx} - \frac{du(x)}{dx} \right)}_{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx} = (\rho S dx) \frac{d^2 u}{dt^2} \quad [\text{Newton}]$$

On obtient :

$$\boxed{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\rho}{Y} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0} \quad \rightarrow \text{Equation d'onde 1D}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\rho}{Y} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$$

→ Equation d'onde 1D

Solution générale de la forme

$$u = Ae^{i(qx - \omega t)}$$

Onde plane  
progressive

Amplitude

Nombre d'onde

$$q = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Pulsation



$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\rho}{Y} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$$

Solution générale  $u = Ae^{i(qx - \omega t)}$

Substitution de  $u$  dans l'équation d'onde

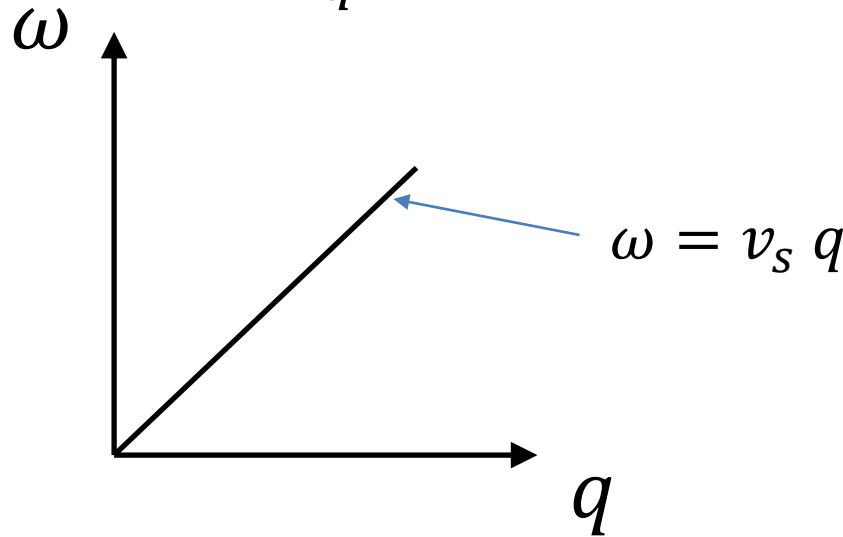
$$\omega = \sqrt{\frac{Y}{\rho}} q$$

*relation de dispersion*

Relation de dispersion

$$\omega = \sqrt{\frac{Y}{\rho}} q$$

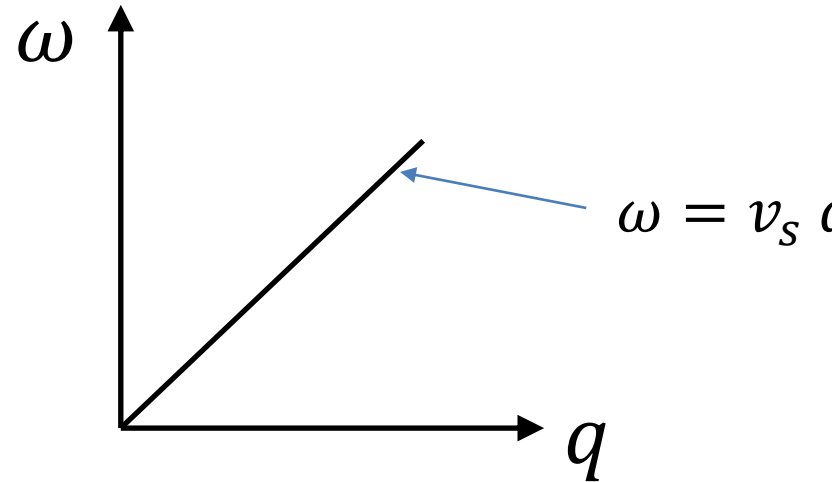
Vitesse de l'onde :  $v_s = \frac{\omega}{q}$  (par définition )



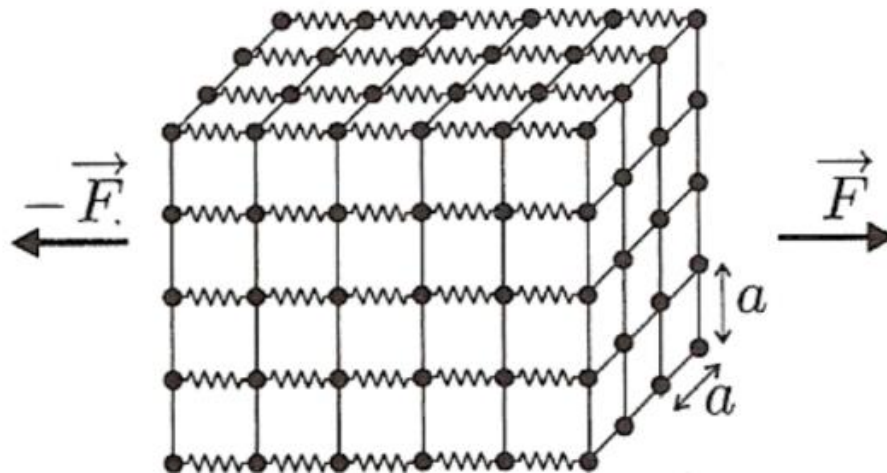
$\rightarrow v_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$  vitesse d'une onde élastique, acoustique ou sonore

## Relation de dispersion

$$\omega = \sqrt{\frac{Y}{\rho}} q$$



Relation non valide quand  $q$  est grand /  $\lambda$  petit  
du fait de la nature discrète des solides (atomes). Quand  $\lambda \approx a$  « dispersion »



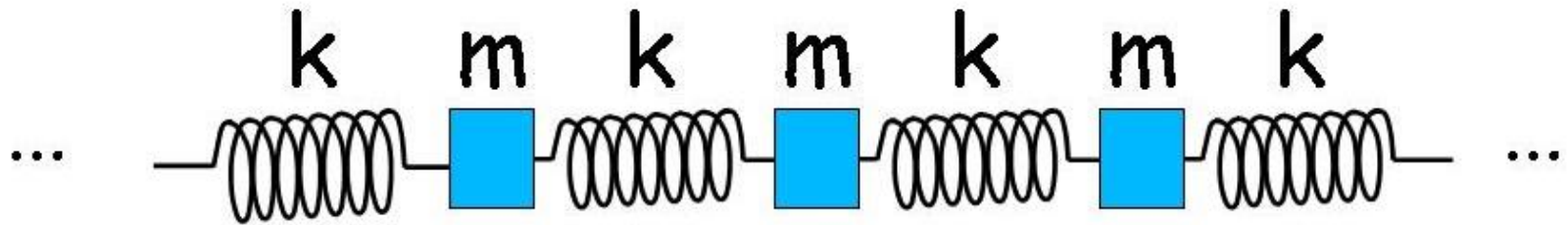
b. Compléter :

la relation de dispersion d'une onde qui se propage dans un milieu continu est une relation (linéaire/exponentielle) qui traduit une (atténuation/vitesse) constante.

b. Compléter :

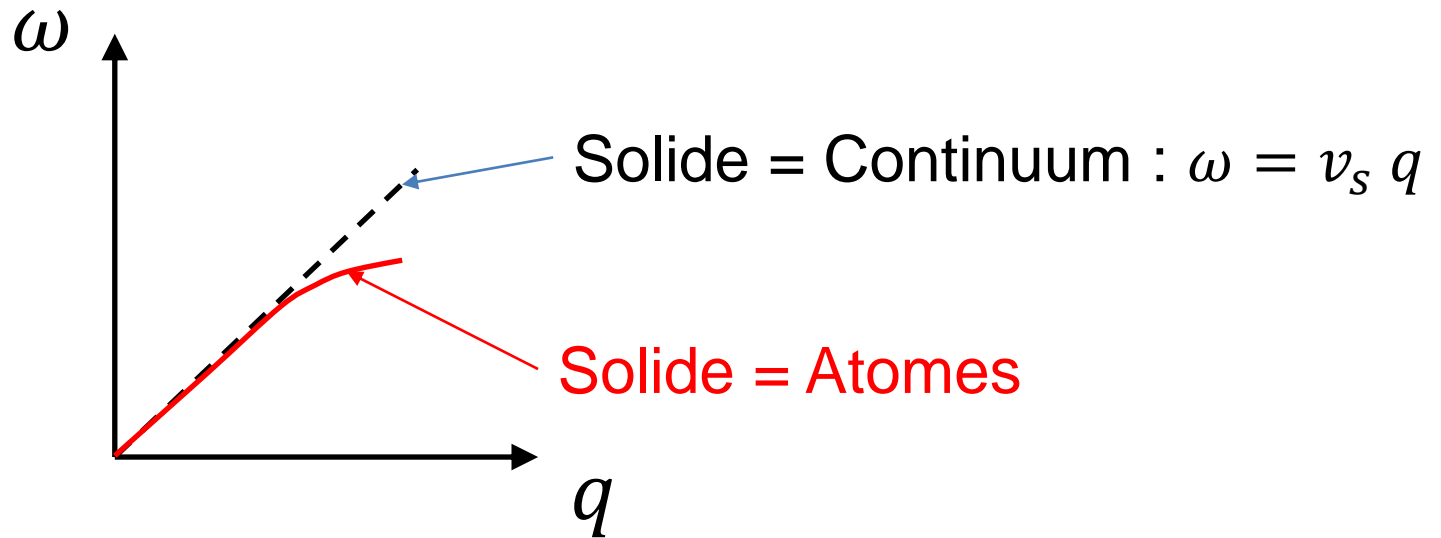
la relation de dispersion d'une onde qui se propage dans un milieu continu est une relation (**linéaire**/exponentielle) qui traduit une (atténuation/**vitesse**) constante.

Atomes en interaction: chaîne monoatomique 1D



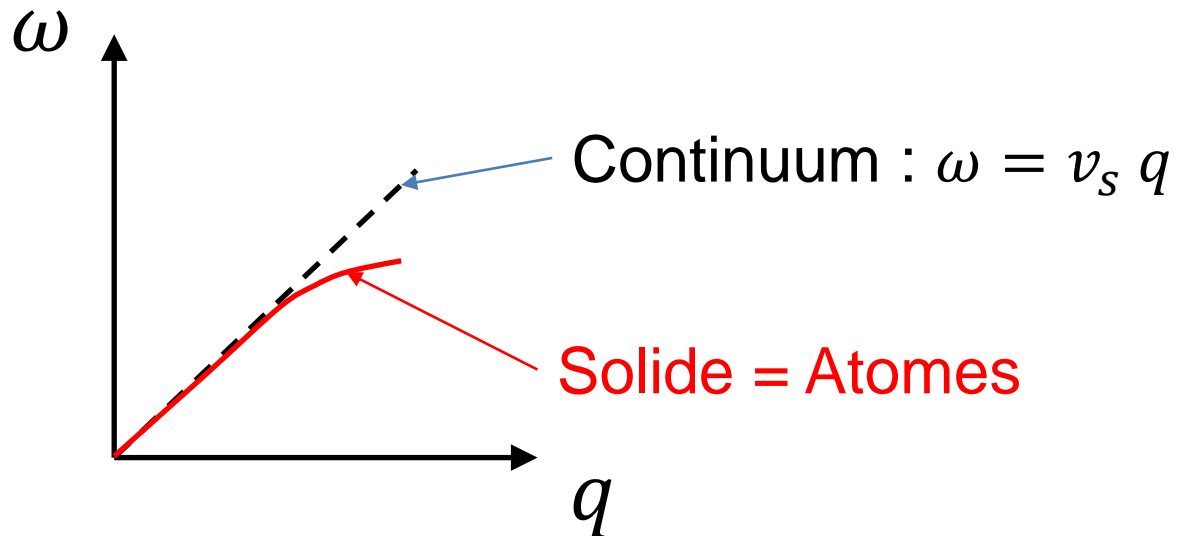
On a vu que

Solide = continuum élastique  $\rightarrow$  Relation de dispersion linéaire

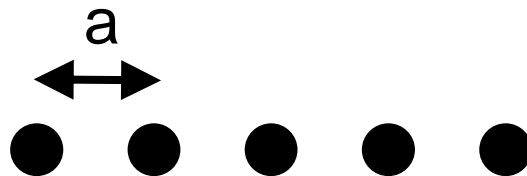


On va voir que

Solide = système discret  $\rightarrow$  Déviations au comportement linéaire



Pourquoi cette déviation, qualitativement ?

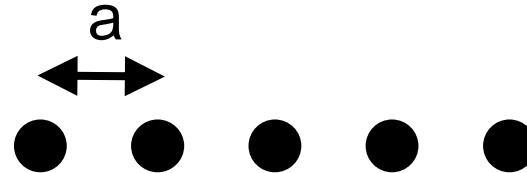


$q = 2\pi/\lambda$  et  $\lambda$  ne peut pas être plus petit que la distance interatomique  $a$



Ce qu'on va étudier maintenant :

Chaîne monoatomique 1D



On applique  $\Sigma \vec{F} = m \vec{a}$

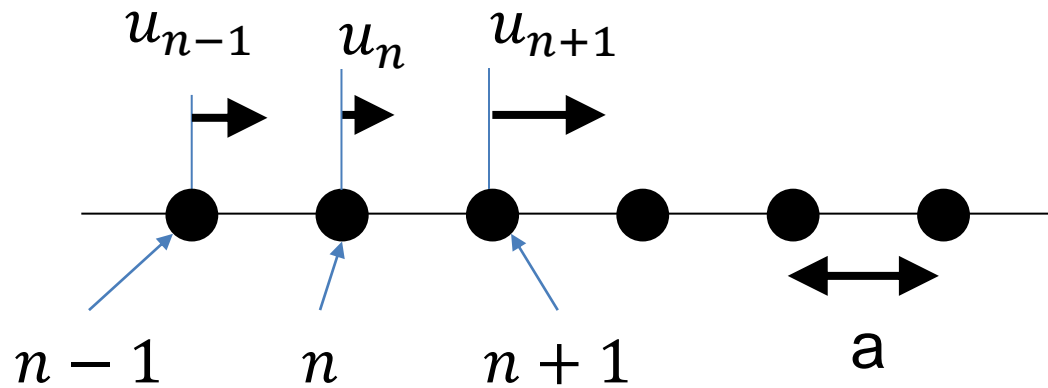
avec  $F$  = force de rappel des atomes voisins



→ Solution = équation d'onde

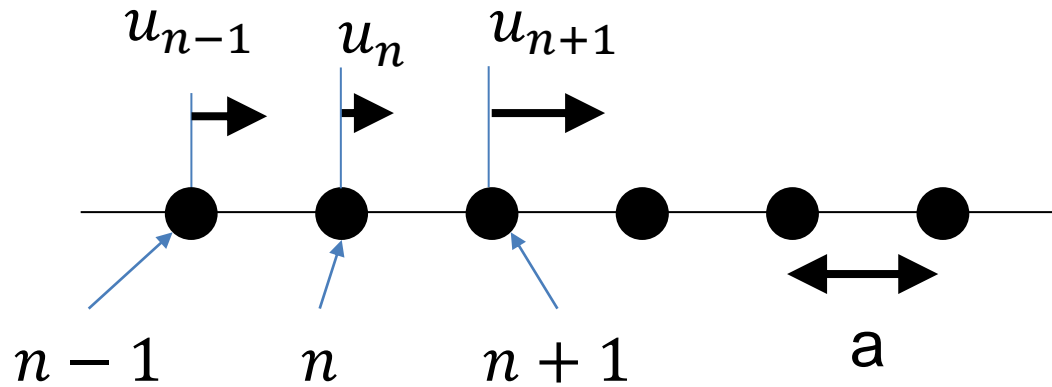
→ Dérivation d'une **expression entre  $\omega$  et  $q$**

## Chaîne monoatomique 1D



à  $T = 0K$       $u_{n-1} = 0 = u_n = u_{n+1} \dots$

à  $T \neq 0K$      Les  $u_n$  peuvent être non nuls



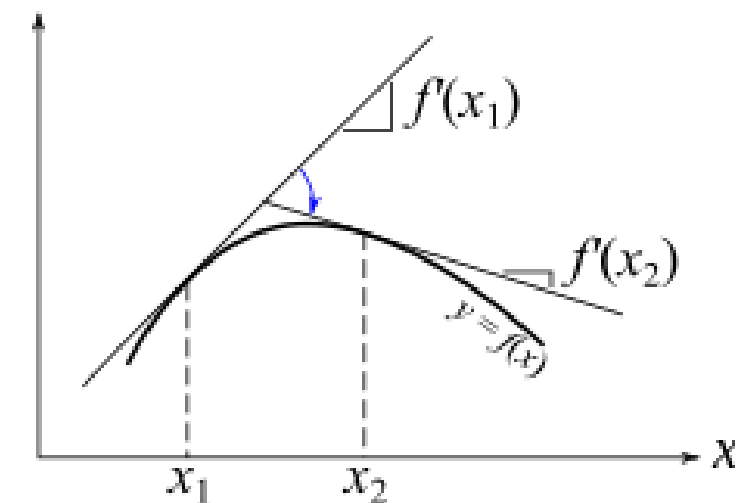
Atome  $n$  de masse  $M$   
 soumis à la force de rappel ( $\alpha \delta x$ ) des atomes voisins

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \alpha(u_{n+1} - u_n) + \alpha(u_{n-1} - u_n)$$

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\alpha(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\alpha(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})$$

$2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}$   
 = définition de la dérivée  
 seconde, en notation discrète



→ Equation différentielle du second ordre, en fonction du temps ET de la position

Solution générale de la forme :  $u_n = A e^{i(qX_n - \omega t)}$

Position d'équilibre de l'atome  $n$  :  $X_n = na$

## Relation de dispersion $\omega(q)$ ?

On a

$$\left\{ \begin{array}{l} M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\alpha(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \\ u_n = Ae^{i(qna - \omega t)} \end{array} \right.$$

Donc

$$M(-\omega^2)Ae^{i(qna - \omega t)} = -\alpha A(2e^{iqna} - e^{iq(n+1)a} - e^{iq(n-1)a})e^{-i\omega t}$$

$$-M\omega^2 = -\alpha(2 - e^{iqa} - e^{-iqa})$$

$$-M\omega^2 = -\alpha(2 - 2\cos qa)$$

$$-M\omega^2 = -2\alpha \left( 2 \sin^2 \frac{qa}{2} \right)$$

## Relation de dispersion $\omega(q)$ ? (suite)

$$M\omega^2 = 2\alpha \left( 2 \sin^2 \frac{qa}{2} \right)$$

$$\omega^2 = \frac{4\alpha}{M} \left( \sin^2 \frac{qa}{2} \right)$$

On obtient :

$$\omega = \omega_M \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

avec

$$\omega_M = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}}$$

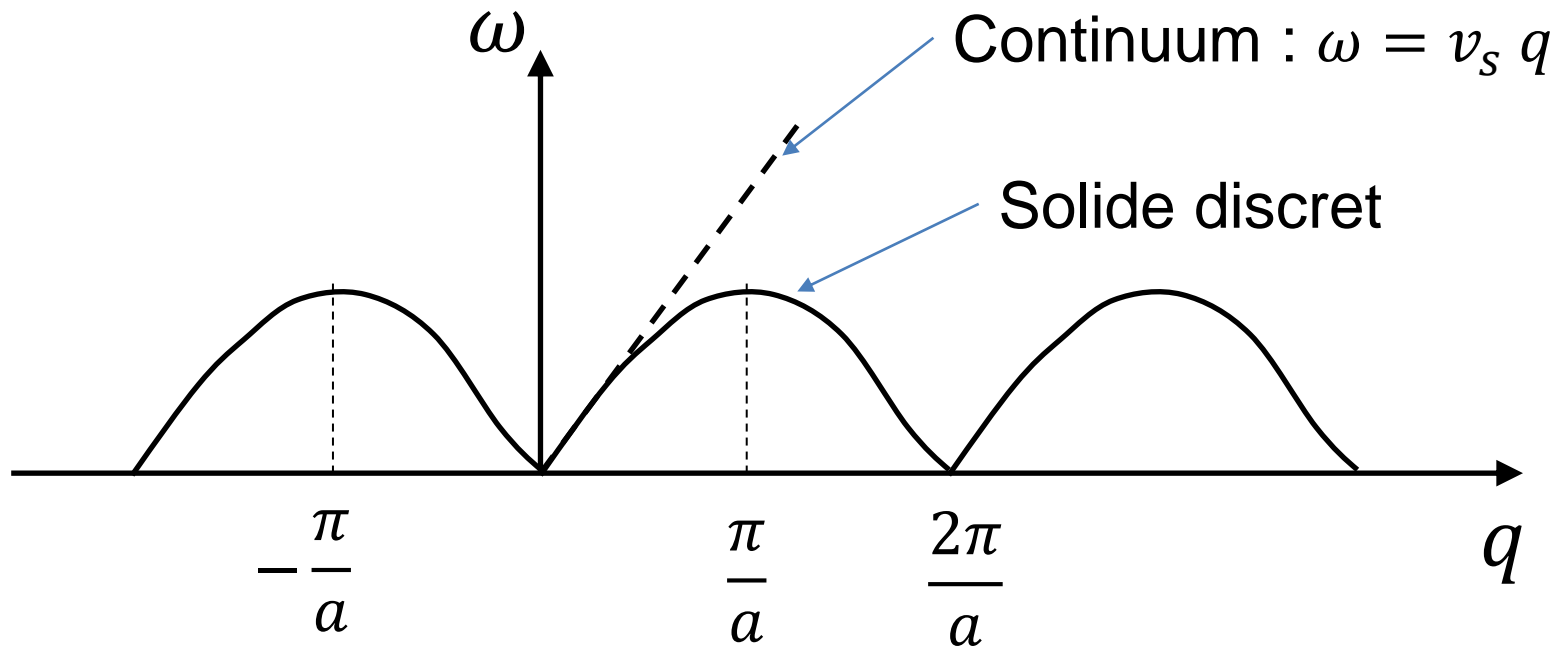
**Relation de dispersion des phonons (vibrations des atomes) d'un cristal monoatomique 1D**

# Relation de dispersion des phonons (vibrations des atomes) d'un cristal monoatomique 1D

$$\omega = \omega_M \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

avec

$$\omega_M = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}}$$



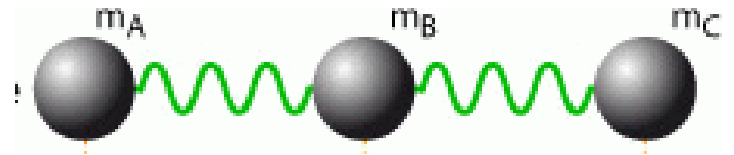
### c. Compléter.

Pour modéliser les vibrations des atomes, on décrit le système comme un ensemble (d'ondes/de masses) connectés par des ressorts et on applique (les lois de Newtons / l'équation de Schrodinger). On obtient une équation (de particule/d'ondes) et on en déduit une relation de dispersion qui est (périodique/linéaire).



c. Compléter.

Pour modéliser les vibrations des atomes, on décrit le système comme un ensemble (d'ondes/**de masses**) connectés par des ressorts et on applique (**les lois de Newtons** / l'équation de Schrodinger). On obtient une équation (de particule/**d'ondes**) et on en déduit une relation de dispersion qui est (**périodique**/linéaire).

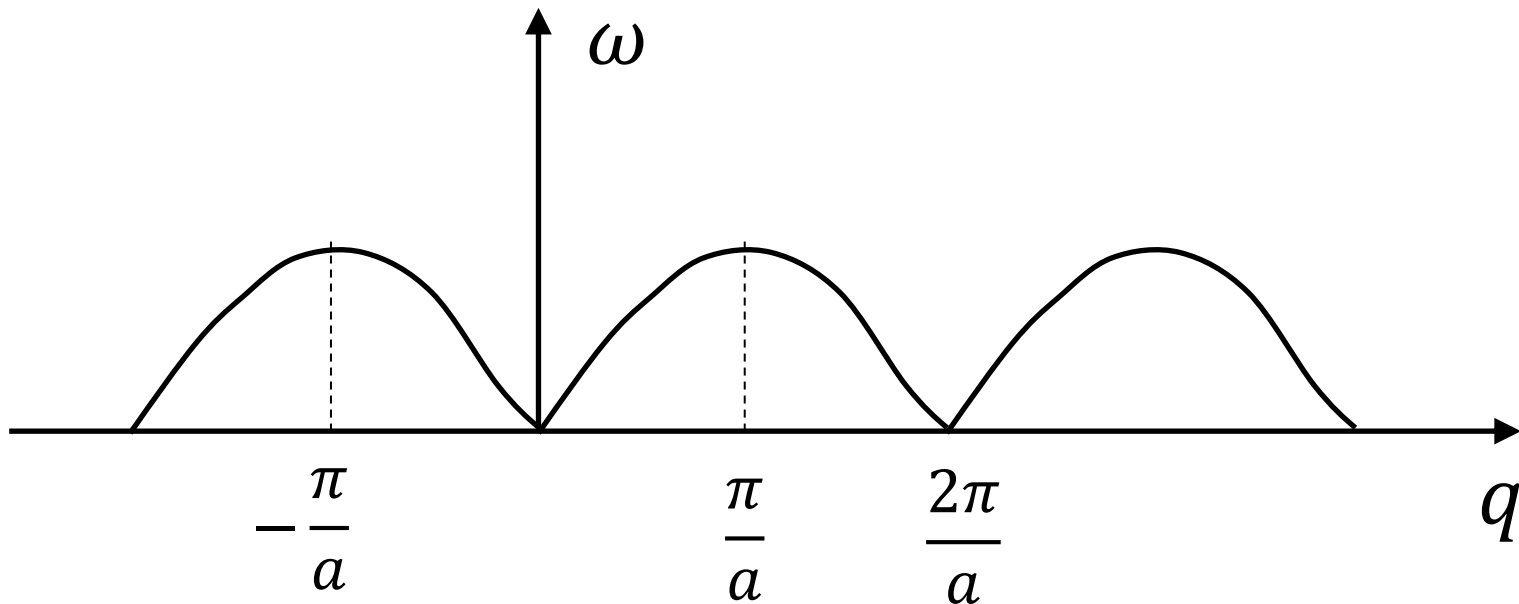


**Relation de dispersion des phonons** (vibrations des atomes) d'un cristal monoatomique 1D

$$\omega = \omega_M \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

avec

$$\omega_M = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}}$$

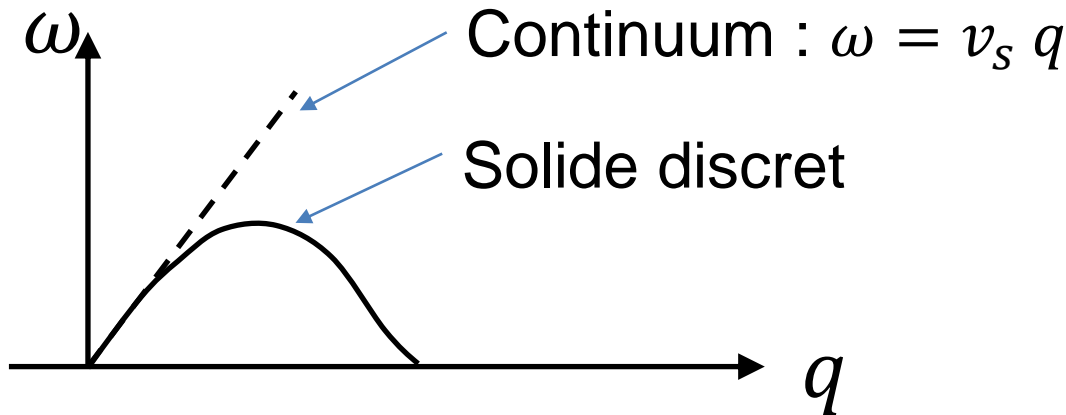


Remarque 1.

Les modèles du solide continu et du  
solide discret coïncident à  $q \rightarrow 0$

Limite des grandes longueurs d'onde

$$\omega = \omega_M \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

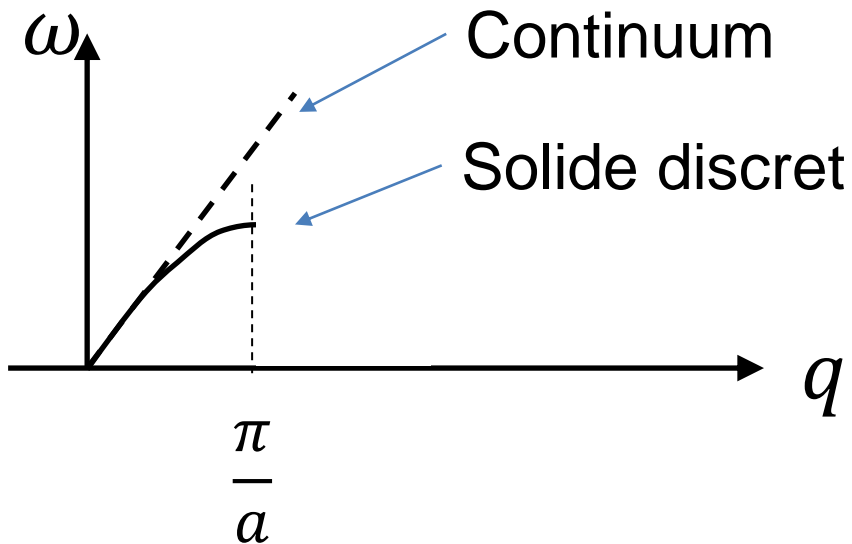


Note pour la suite.  $q \rightarrow 0$  :  $\omega \approx \frac{\omega_M a}{2} q$  donc  $v_s = \frac{\omega_M a}{2}$ ,

or  $v_s = \sqrt{\frac{Y}{\rho}}$  et  $\omega_M = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}}$  donc  $\alpha = aY$

$$\omega = \omega_M \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

Remarque 2. à  $q \rightarrow \pi/a$  , écart max entre les modèles



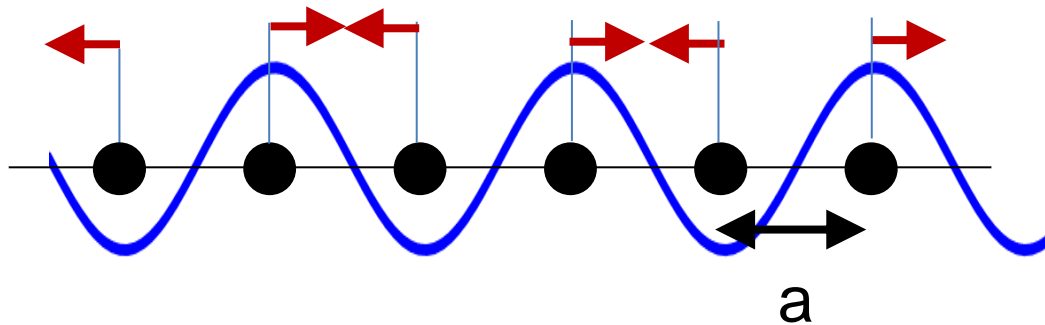
Aussi, à  $q = \pi/a$   
Vitesse de groupe  $\frac{d\omega}{dk} = 0$

→ Onde stationnaire lorsque la longueur d'onde correspond au pas du réseau cristallin

$$\omega = \omega_M \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

Remarque 2. à  $q \rightarrow \pi/a$

→ Onde stationnaire lorsque la longueur d'onde correspond au pas du réseau cristallin

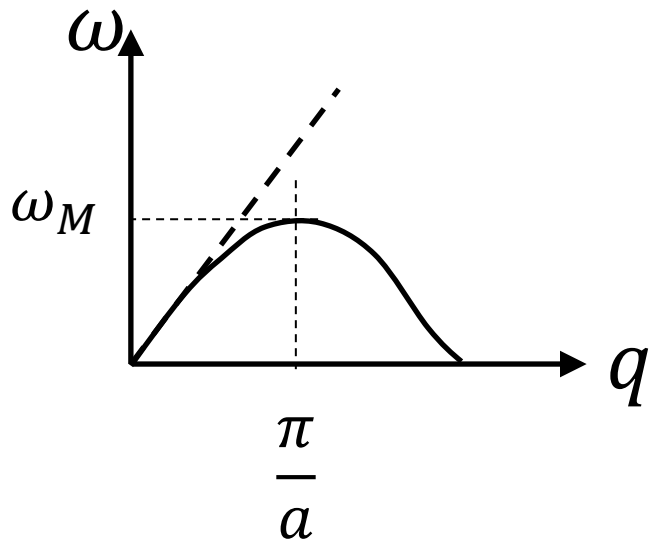


Mouvement local, mais pas de déplacement global de gauche à droite (autant de flèches allant à gauche qu'à droite)

$$\omega = \omega_M \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

Remarque 3.

Le réseau 1D ne peut véhiculer que des fréquences inf. à  $\omega_M$



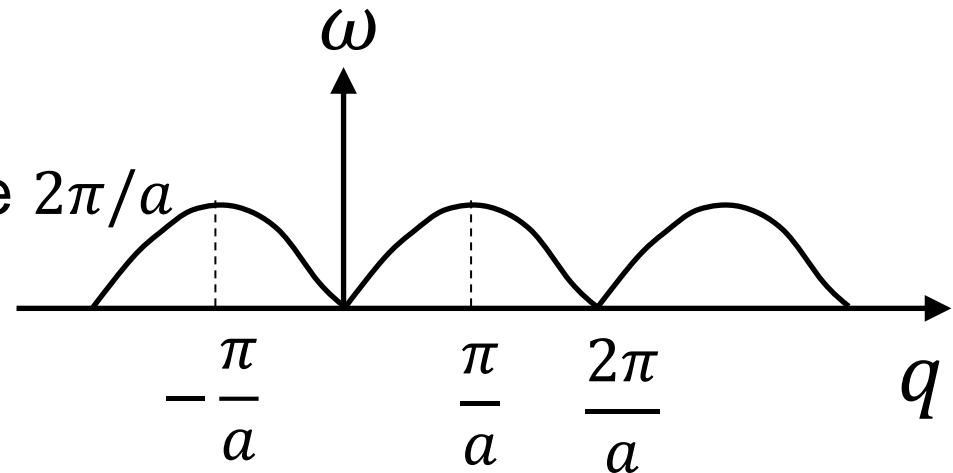
Fréquence de coupure

$$\omega_M = \sqrt{\frac{4\alpha}{M}} = \sqrt{\frac{4aY}{M}} \rightarrow 10^{13} \text{ Hz}$$

Régime infrarouge

Remarque 4.

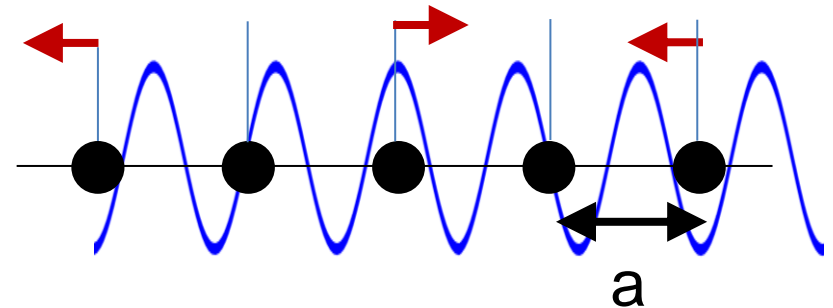
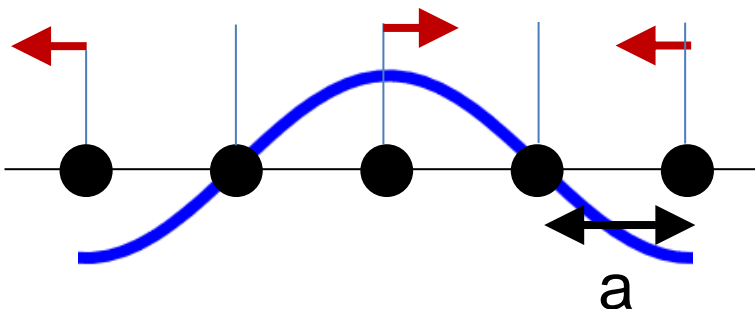
$\omega(q)$  est périodique de période  $2\pi/a$



Des ondes avec des longueurs d'ondes différentes ont la même fréquence... Signification ?

$$q = \frac{\pi}{2a} \rightarrow \lambda = 4a$$

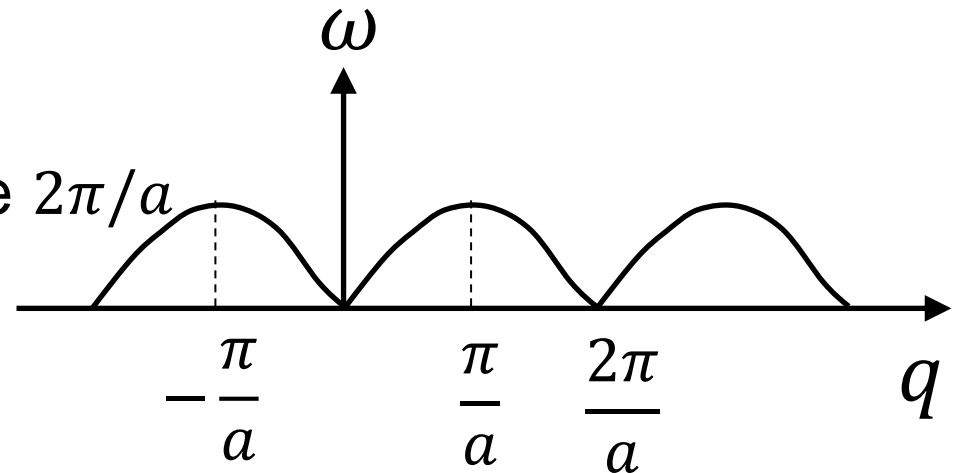
$$q' = q + \frac{2\pi}{a} = \frac{5\pi}{2a} \rightarrow \lambda = \frac{4a}{5}$$



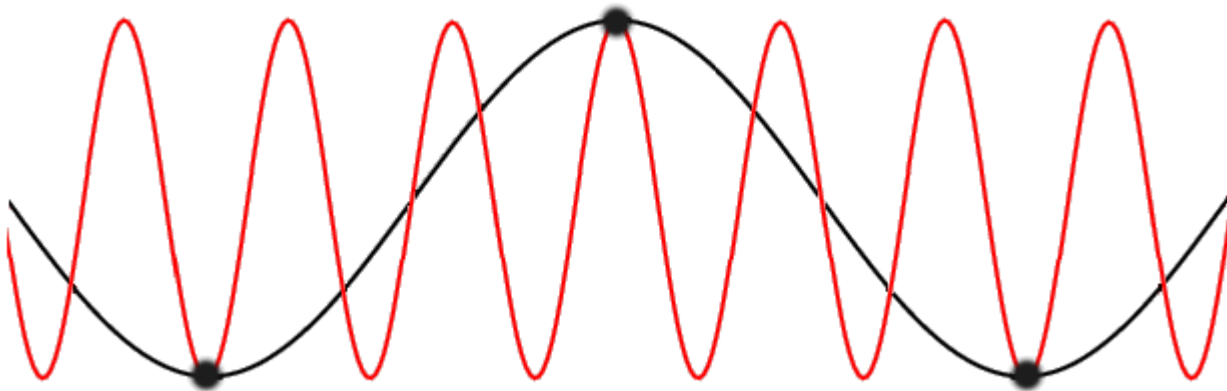
Même déplacement des atomes dans les 2 cas

Remarque 4.

$\omega(q)$  est périodique de période  $2\pi/a$



→ Toute l'information physique se trouve dans l'intervalle  $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$  (« 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin » )



k-vectors exceeding the first Brillouin zone (red) do not carry more information than their counterparts (black) in the first Brillouin zone.

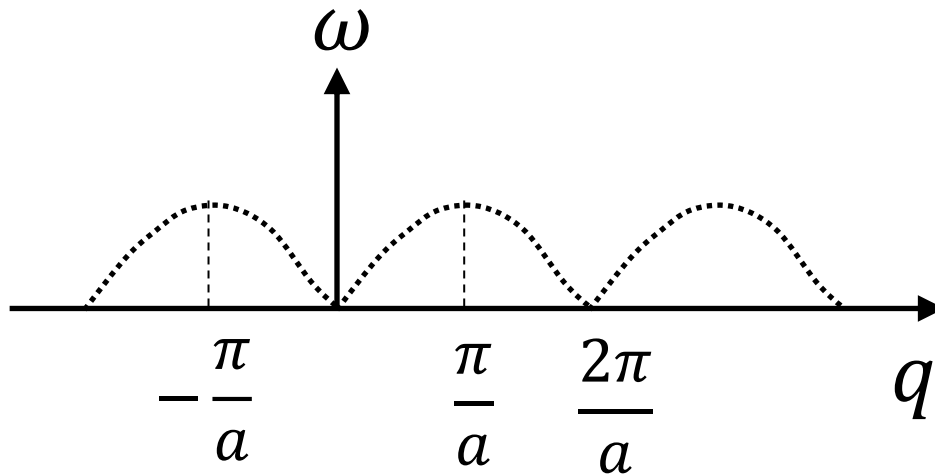


Remarque 5.

Cristal de longueur  $L$

Conditions aux limites de Born Von-Karman

$$\rightarrow q = n \left( \frac{2\pi}{L} \right) \text{ avec } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$



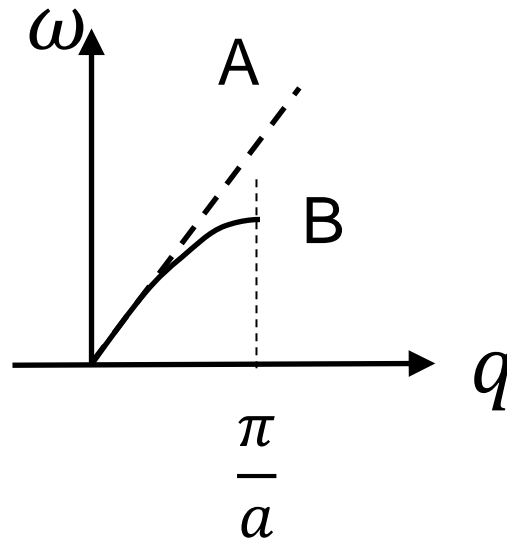
quand  $L$  est grand  
 $q \rightarrow \text{continuum}$

Nombre de modes

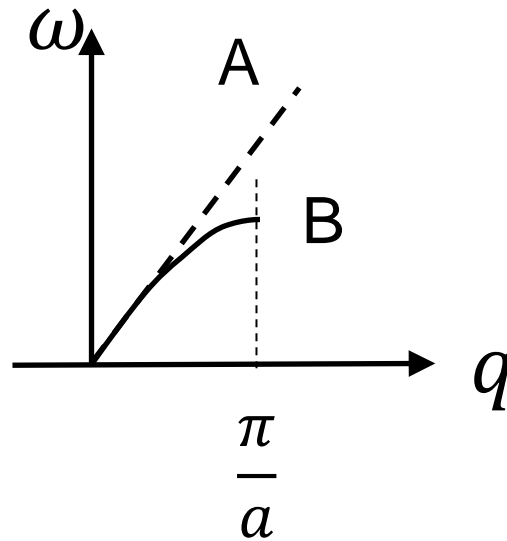
= nombre total de points dans la 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin

$$= \frac{2\pi/a}{2\pi/L} = \frac{L}{a} = N$$

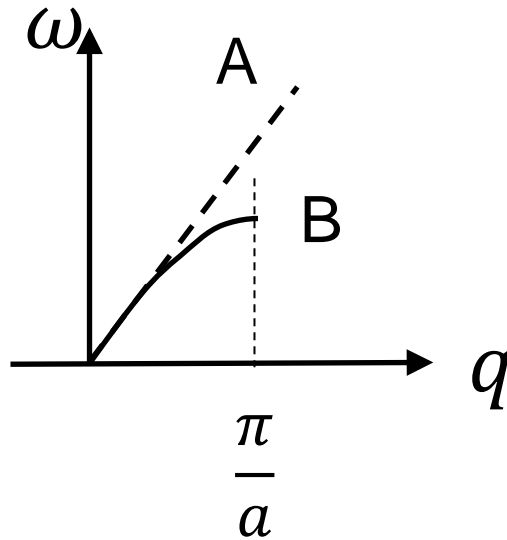
d1. Dans le graphe suivant, la relation de dispersion correspondant à un modèle en milieu continu est la A/B et celle correspondant à un modèle en milieu discret (chaîne d'atomes) est la A/B



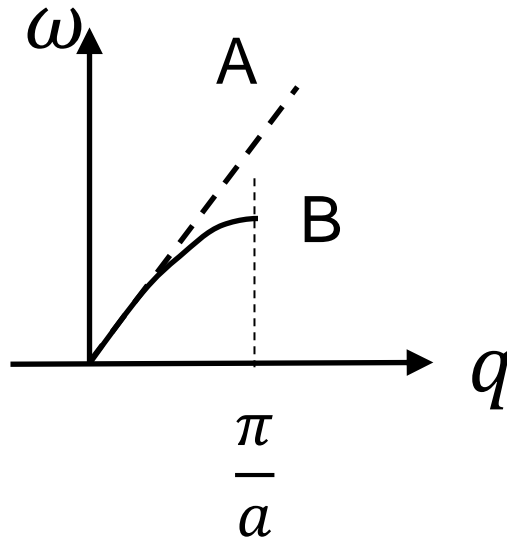
d1. Dans le graphe suivant, la relation de dispersion correspondant à un modèle en milieu continu est la **A/B** et celle correspondant à un modèle en milieu discret (chaîne d'atomes) est la **A/B**



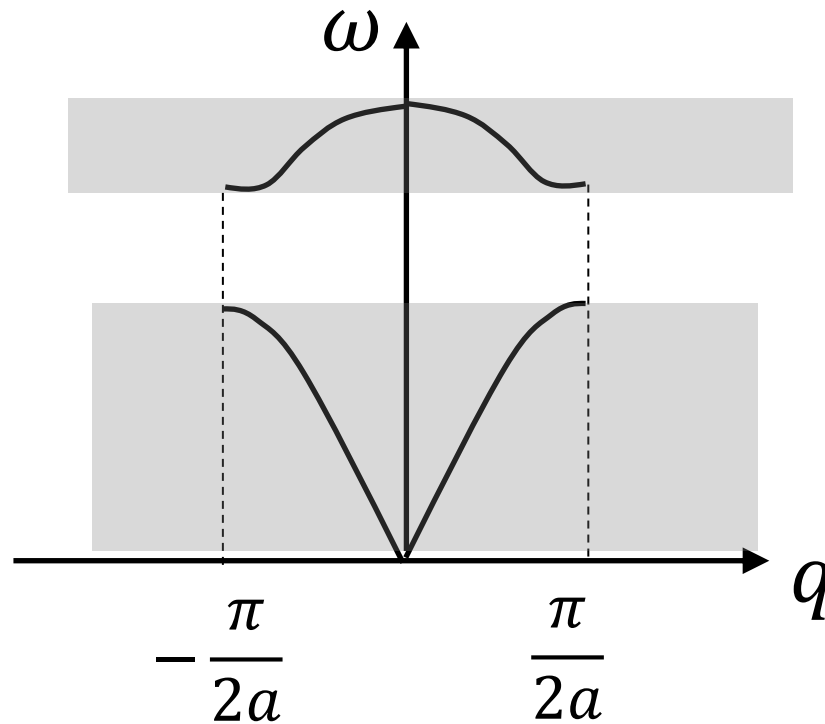
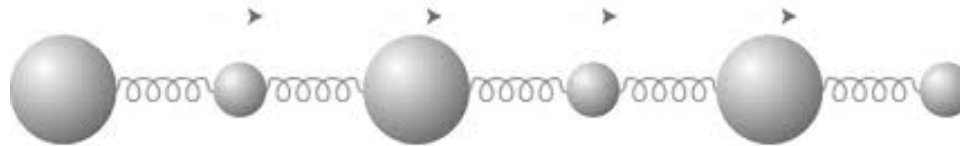
d2. Dans le graphe suivant, la pente est nulle pour la courbe B lorsque le vecteur d'onde vaut  $\pi/a$  car cela correspond à une longueur d'onde de vibration égale à la distance interatomique ( $a / \omega / q$ ), l'onde est alors stationnaire.



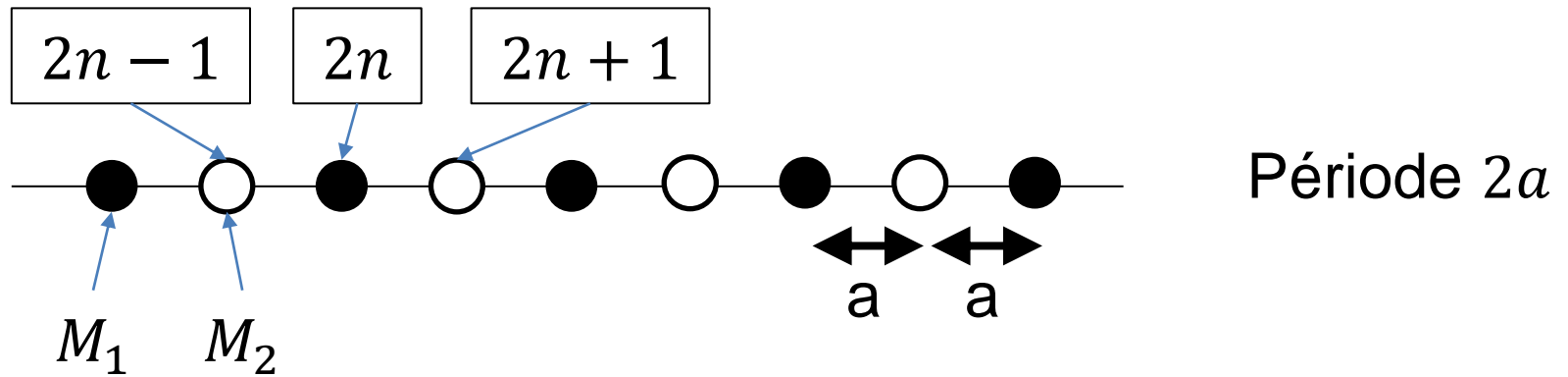
d2. Dans le graphe suivant, la pente est nulle pour la courbe B lorsque le vecteur d'onde vaut  $\pi/a$  car cela correspond à une longueur d'onde de vibration égale à la distance interatomique ( $\underline{a}$  / omega / q), l'onde est alors stationnaire.



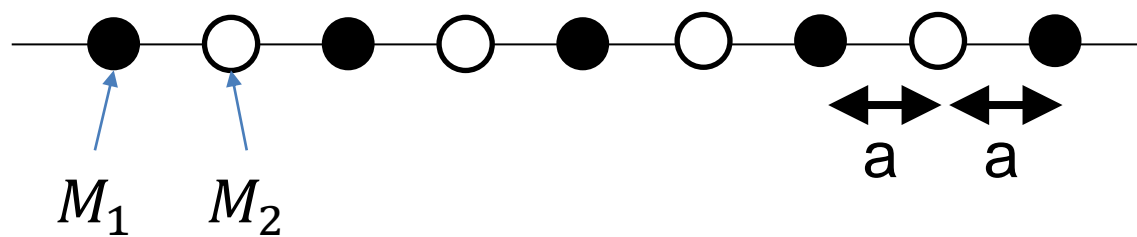
# Structure de bandes des phonons



## Chaîne 1D diatomique

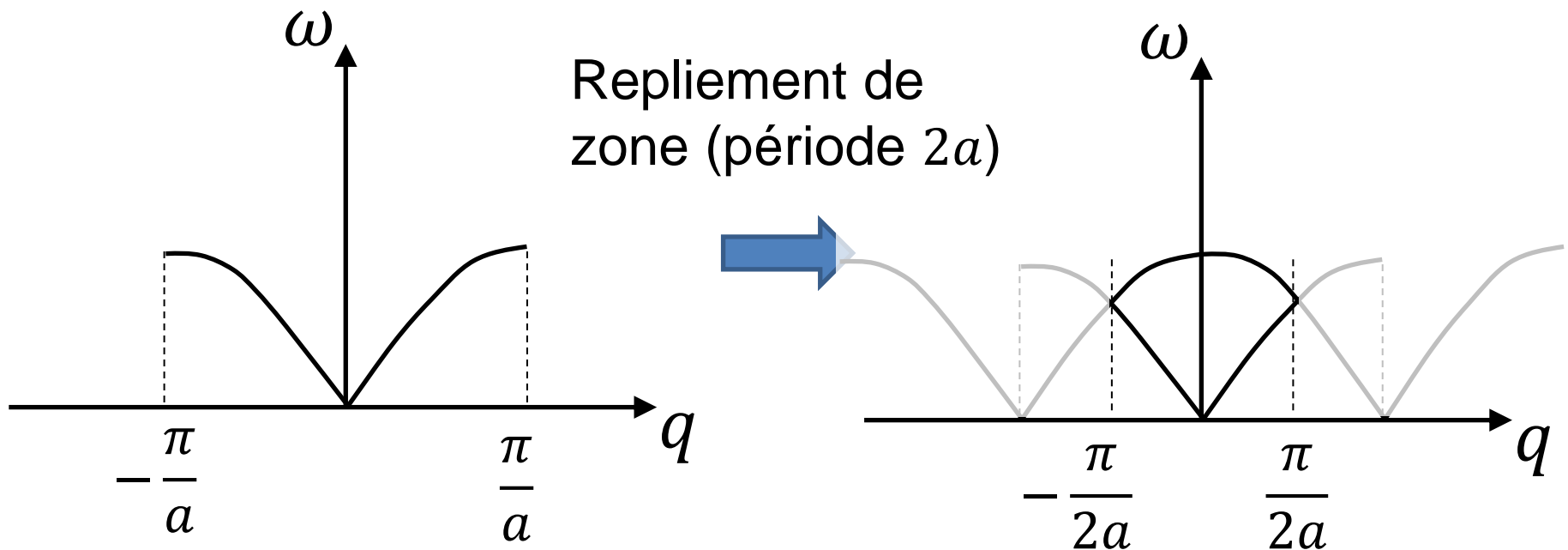


$M_1$  et  $M_2$  : masses des 2 types d'atomes



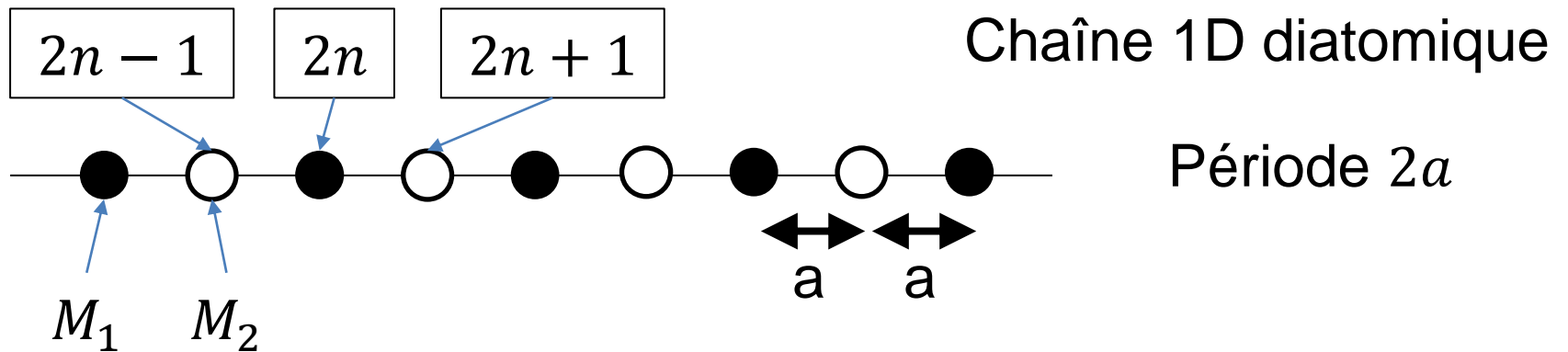
Période  $2a$

Que se passe-t-il si  $M_1 = M_2$  ?



On va voir que lorsque  $M_1 \neq M_2$  un gap apparaît à  $\pm\pi/2a$





Calcul : (2 équations car 2 masses différentes)

$$\left\{ \begin{array}{l} M_2 \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+1} - u_{2n} - u_{2n+2}) \\ M_1 \frac{d^2 u_{2n+2}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+2} - u_{2n+1} - u_{2n+3}) \end{array} \right.$$

$$\begin{cases} M_2 \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+1} - u_{2n} - u_{2n+2}) \\ M_1 \frac{d^2 u_{2n+2}}{dt^2} = -\alpha(2u_{2n+2} - u_{2n+1} - u_{2n+3}) \end{cases}$$

Solutions de la forme

$$u_{2n+1} = A_1 e^{i(qX_{2n+1} - \omega t)}$$

$$u_{2n+2} = A_2 e^{i(qX_{2n+2} - \omega t)}$$

En injectant ces solutions dans les équations du haut on obtient :

$$\begin{pmatrix} 2\alpha - M_1 \omega^2 & -2\alpha \cos qa \\ -2\alpha \cos qa & 2\alpha - M_2 \omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = 0$$

Résolution. Solution non triviale ( $A_1 \neq 0$  ou  $A_2 \neq 0$ ) si :

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - M_1\omega^2 & -2\alpha \cos qa \\ -2\alpha \cos qa & 2\alpha - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

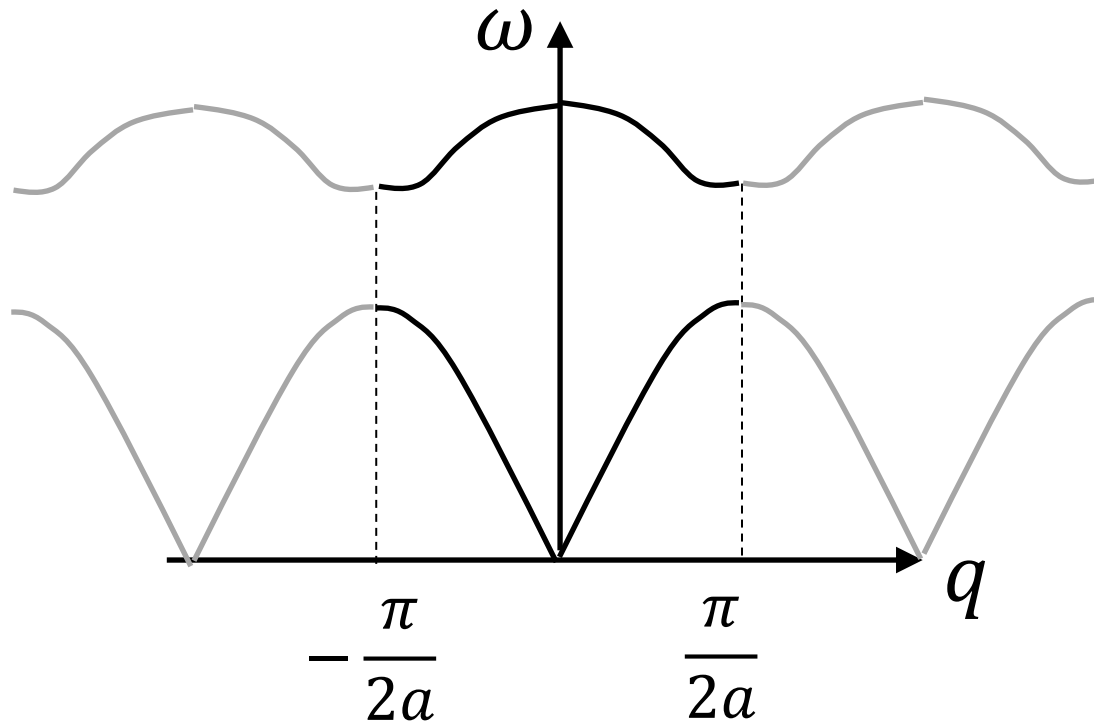
Déterminant

Objectif : trouver la relation de dispersion  $\omega(q)$

On évalue le déterminant pour trouver cette relation. On obtient :

$$\omega^2 = \alpha \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{M_1 M_2}}$$

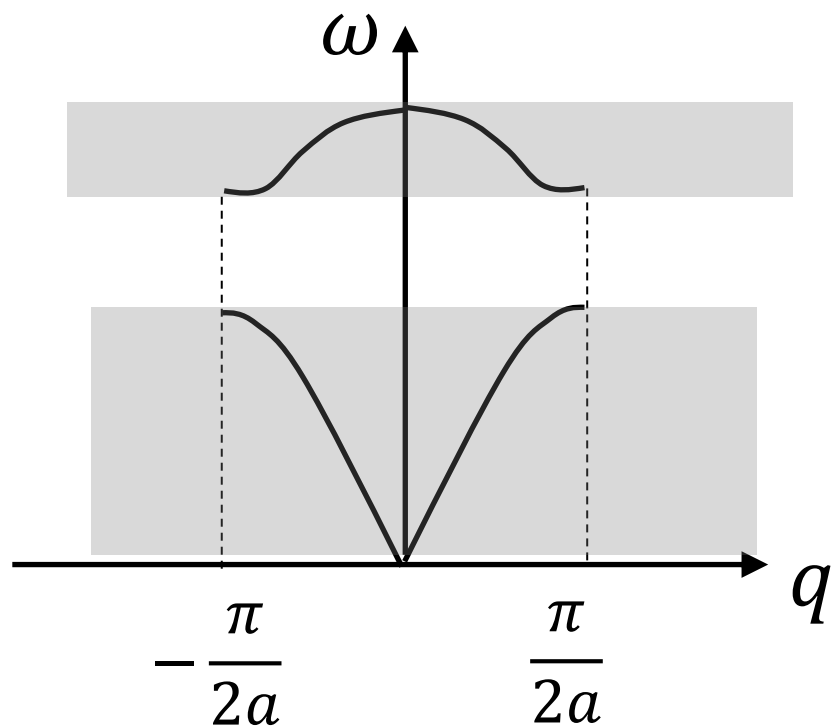
$$\omega^2 = \alpha \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{M_1 M_2}}$$



Courbes périodiques,  
toute l'information est  
contenue dans  $\left[-\frac{\pi}{2a}; \frac{\pi}{2a}\right]$

« 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin »

## Structure de bandes



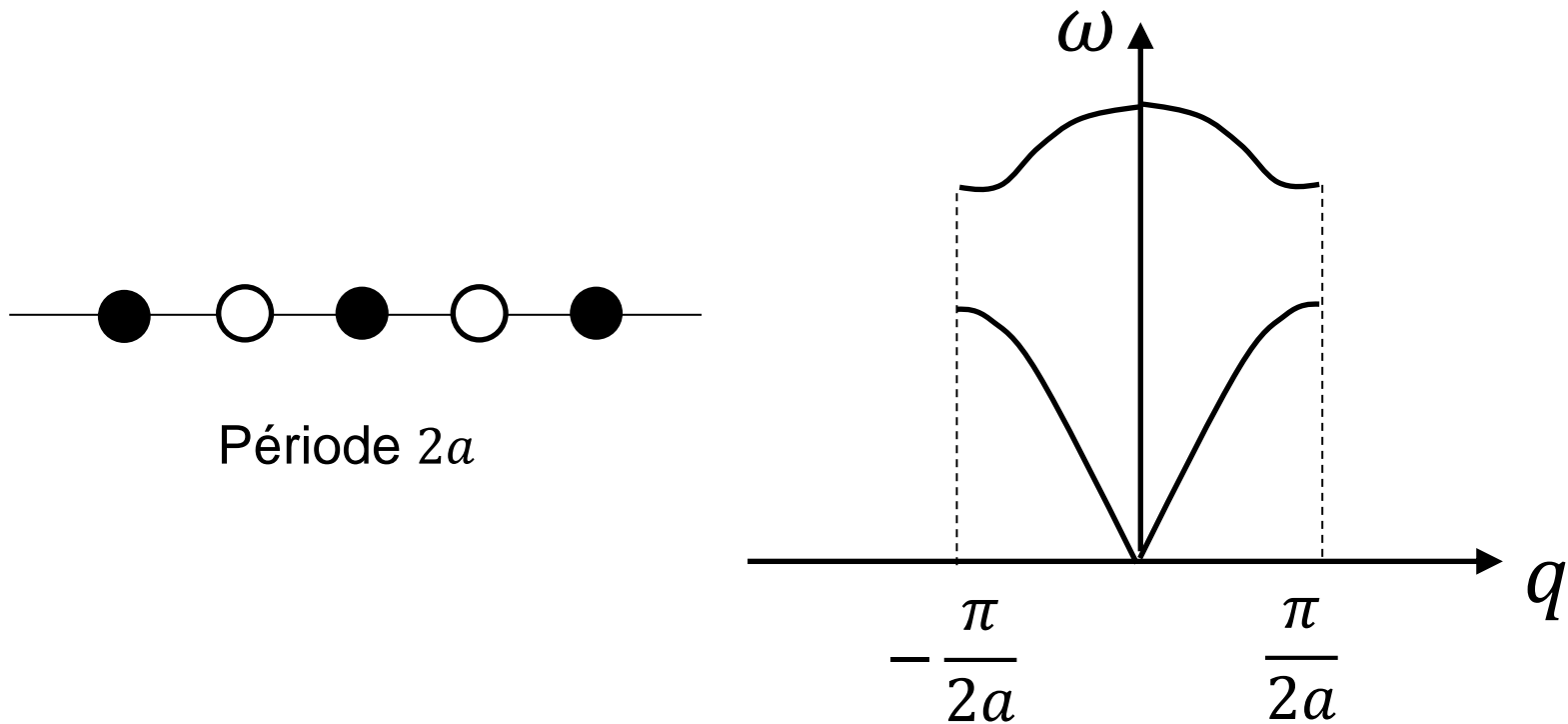
e. Compléter.

La structure de bandes d'une chaîne atomique avec (un/deux) type(s) d'atome comporte (zéro/deux/quatre) bandes

e. Compléter.

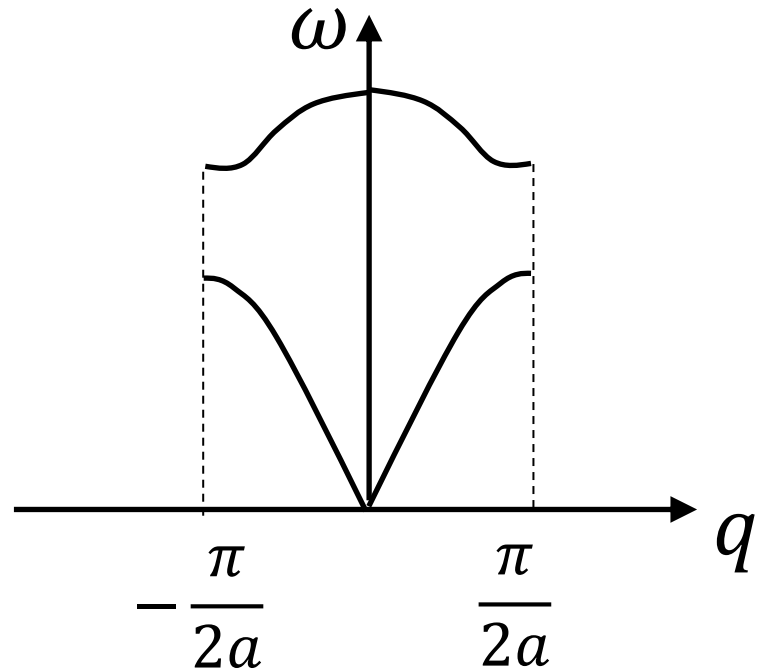
La structure de bandes d'une chaîne atomique avec (un/**deux**) type(s)  
d'atome comporte (zéro/**deux**/quatre) bandes

# Structure de bande des phonons



« Branches **acoustiques** et branches **optiques** »



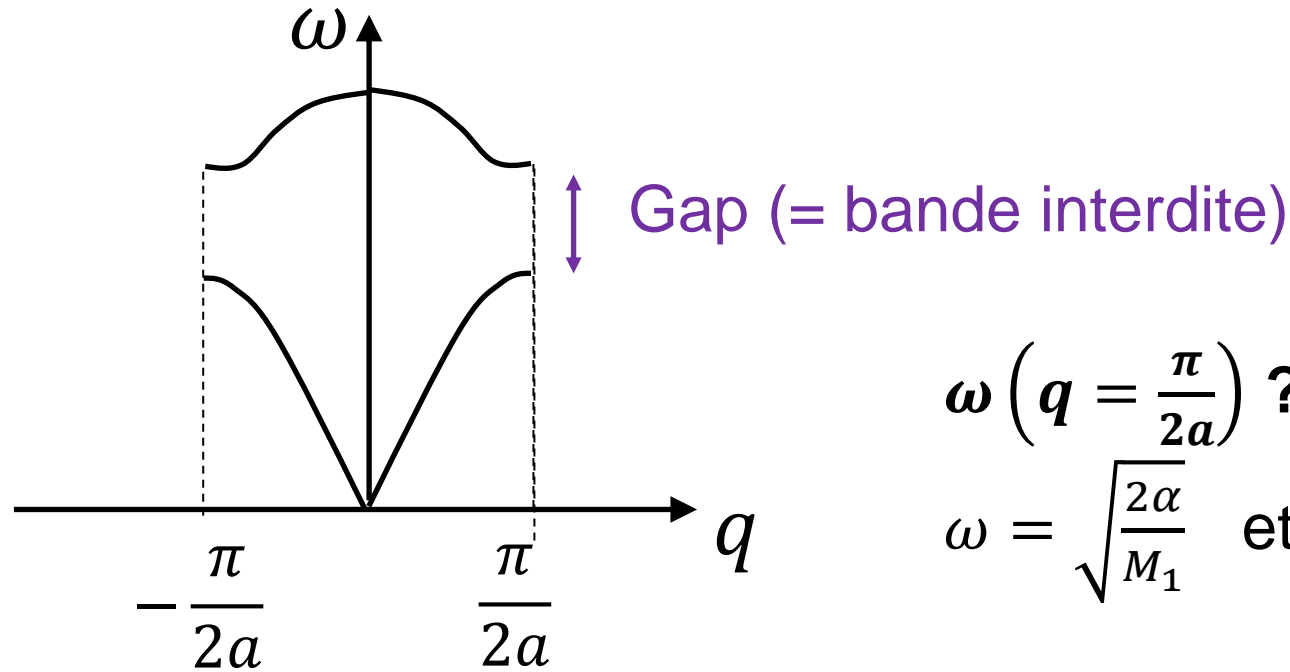


$\omega(q = 0) ?$

$\omega(q = 0) = 0$  (branche du bas)

$\omega = \sqrt{2\alpha \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)}$  (branche du haut)

$$\omega^2 = \alpha \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{M_1 M_2}}$$

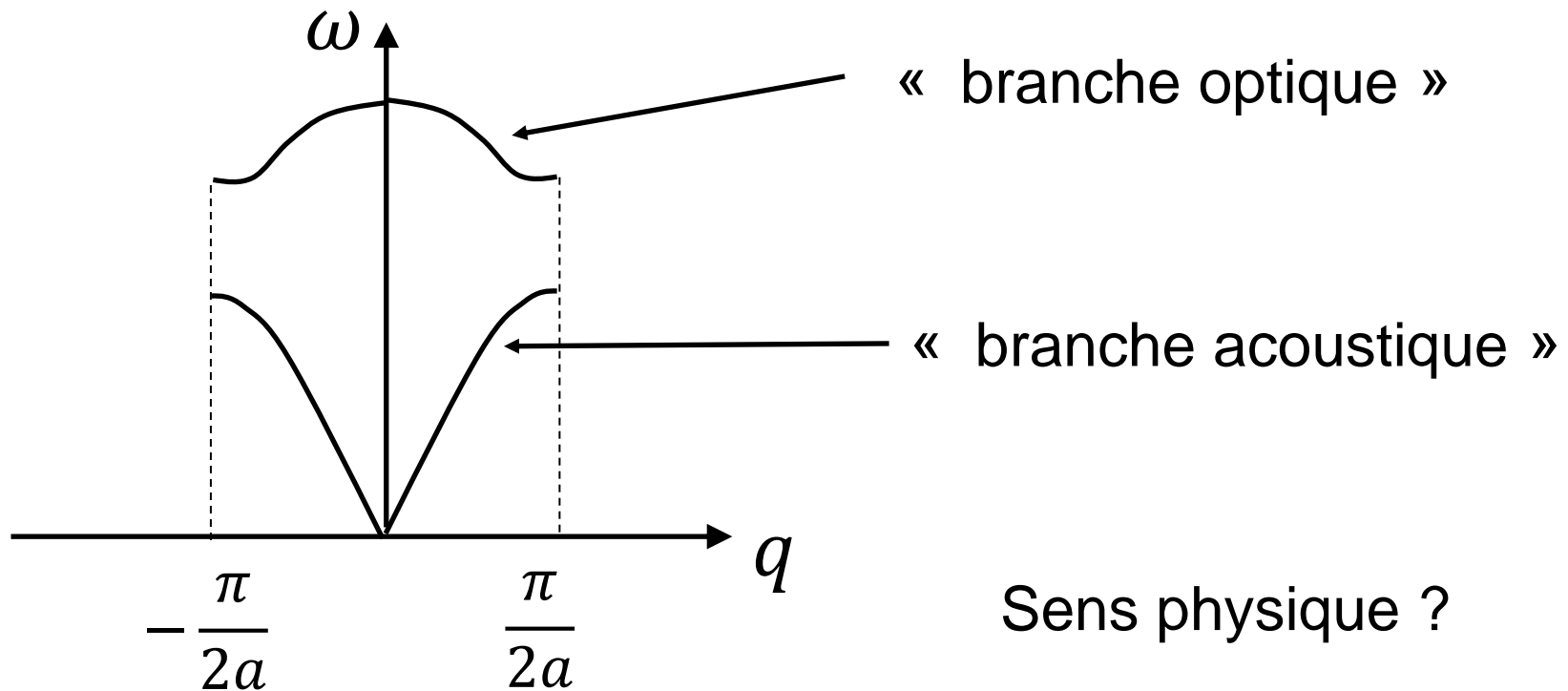


$$\omega \left( q = \frac{\pi}{2a} \right) ?$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2\alpha}{M_1}} \quad \text{et} \quad \omega = \sqrt{\frac{2\alpha}{M_2}}$$

→ Gap = 0 lorsque  $M_1 = M_2$

$$\omega^2 = \alpha \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 qa}{M_1 M_2}}$$

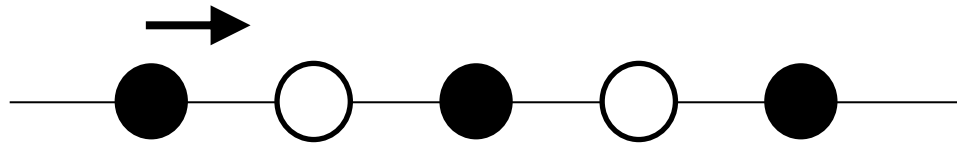


Sens physique ?

Evaluons les 2 branches à grande longueur d'onde  $q \rightarrow 0$

**Branche acoustique à  $q \rightarrow 0$  et  $\omega = 0$  - déplacement  $u$ ?**

$$u_n = A_1 e^{i(qX_n - \omega t)}$$



$$\begin{pmatrix} 2\alpha - M_1 \omega^2 & -2\alpha \cos qa \\ -2\alpha \cos qa & 2\alpha - M_2 \omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = 0$$

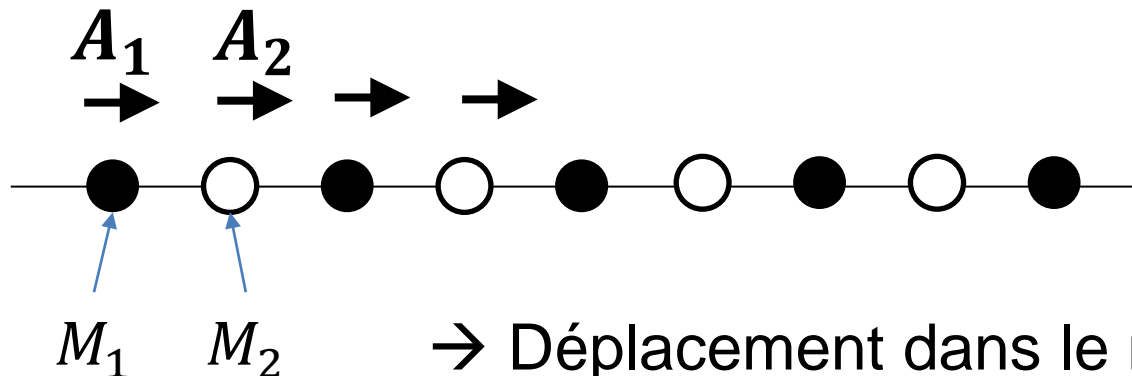
→ Déplacement dans le même sens

## Branche acoustique à $q \rightarrow 0$ et $\omega = 0$ ?

$$u_n = A_1 e^{i(qX_n - \omega t)} \quad \boxed{\begin{pmatrix} 2\alpha - M_1 \omega^2 & -2\alpha \cos qa \\ -2\alpha \cos qa & 2\alpha - M_2 \omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = 0}$$

devient :

$$\begin{pmatrix} 2\alpha & -2\alpha \\ -2\alpha & 2\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad A_1 = A_2$$



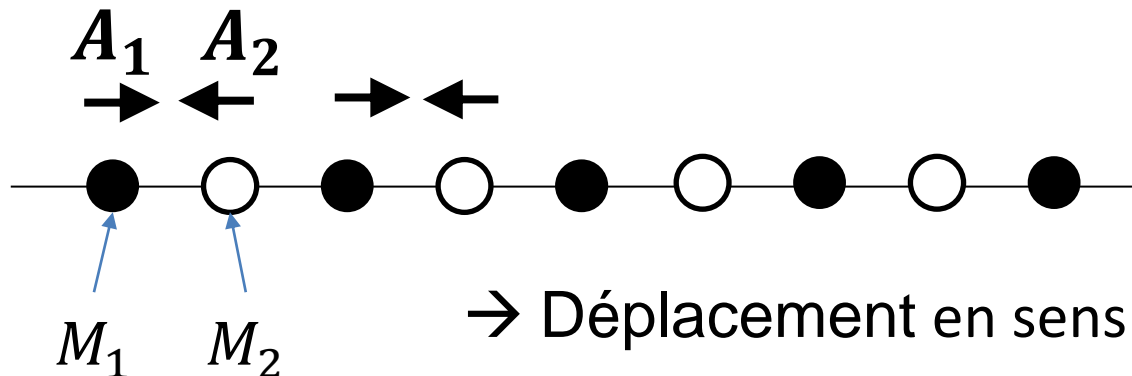
## Branche optique

à grande longueur d'onde  $q \rightarrow 0$  et  $\omega = \sqrt{2\alpha \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)}$

$$\begin{pmatrix} 2\alpha - M_1\omega^2 & -2\alpha \cos qa \\ -2\alpha \cos qa & 2\alpha - M_2\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = 0$$

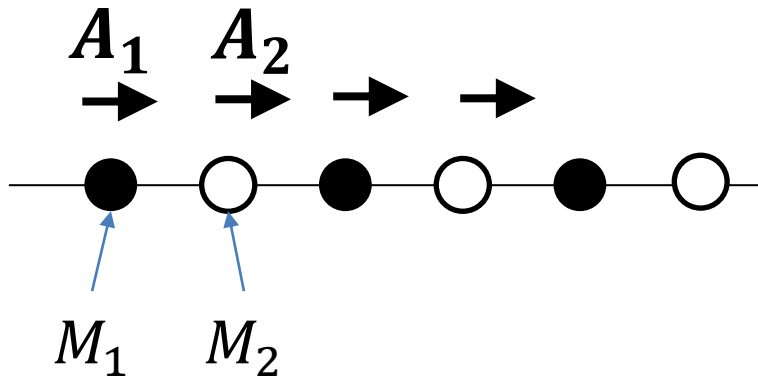
devient :

$$\dots \Rightarrow M_1 A_1 + M_2 A_2 = 0 \Rightarrow \begin{matrix} \text{Si } M_1 = M_2 \\ A_1 = -A_2 \end{matrix}$$



→ Déplacement en sens opposé

## Branche acoustique

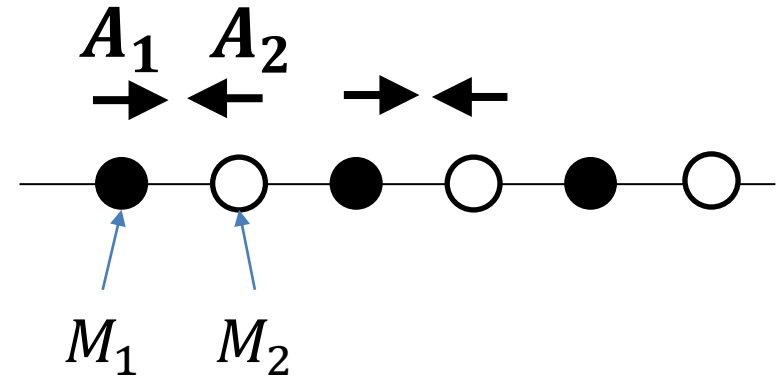


→ Déplacement dans le même sens

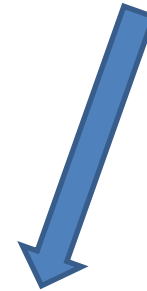


Transport des ondes sonores

## Branche optique



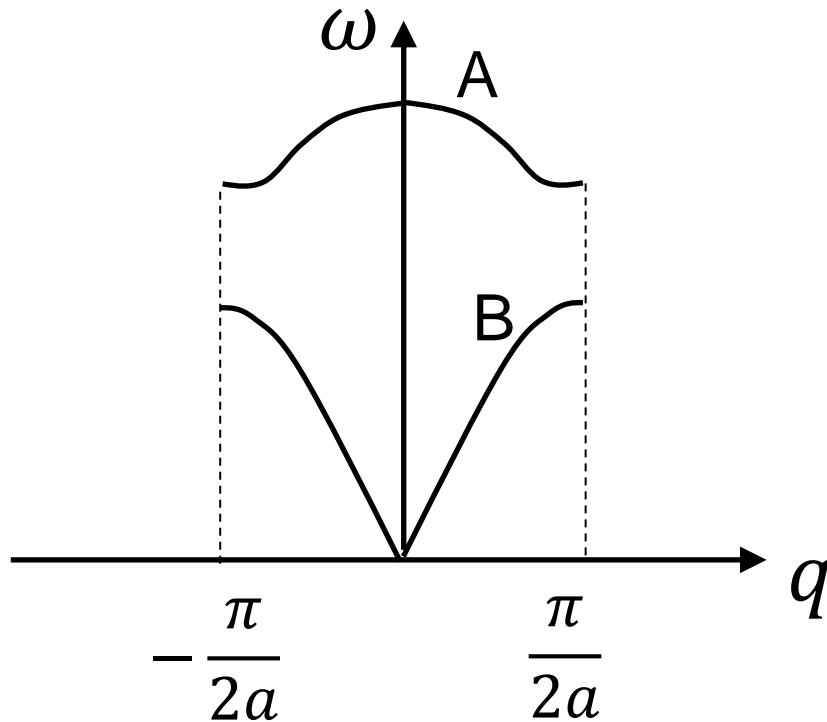
→ en sens opposé



→ Les modes optiques peuvent être excités par une onde électromagnétique/optique

f. Compléter.

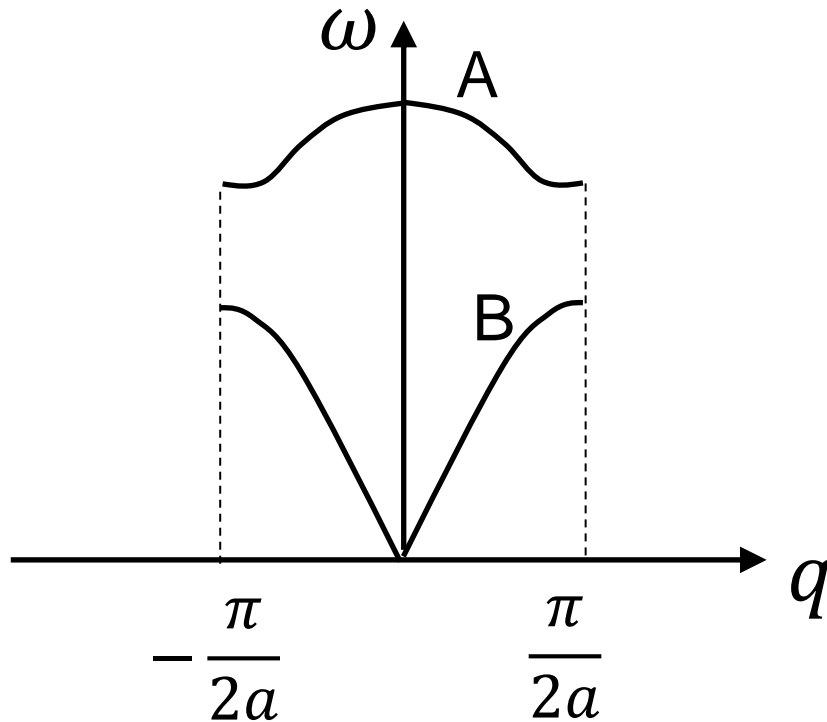
La branche A s'appelle la branche ....., la branche B est la branche...



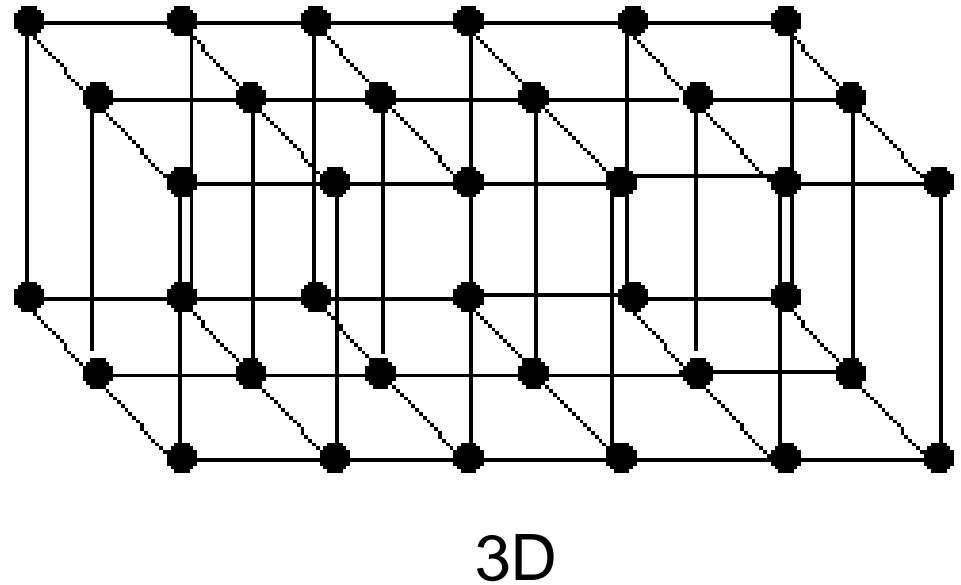
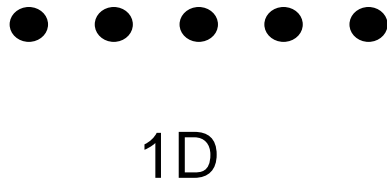


f. Compléter.

La branche A s'appelle la branche ....optique, la branche B est la  
branche... acoustique



# Structure de bande des phonons à 3 dimensions



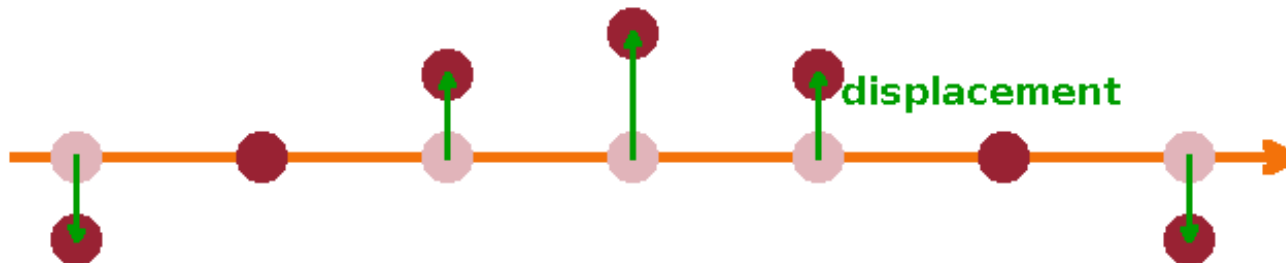
Pour une direction de propagation donnée :

- 1 mode longitudinal
- 2 modes transverses

### Longitudinal



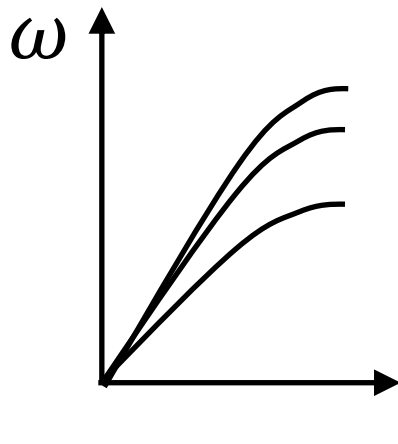
### Transversal



## Cas tridimensionnel

### Généralisation des résultats précédents

- **Déplacement**  $\vec{u}_n = \vec{A} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r}_n - \omega t)}$
- **Onde de vecteur**  $\vec{q}$  = direction de propagation  $\vec{A} \parallel \vec{q}$  longitudinal  
 $\vec{A} \perp \vec{q}$  transverse
- **Relation de dispersion** : cas monoatomique



3 branches acoustiques

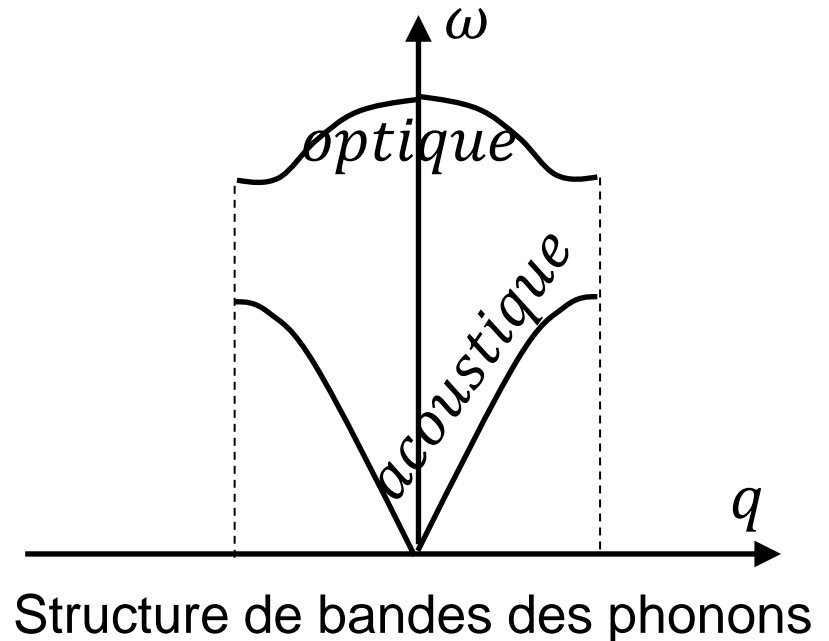
Cas général (résultat admis)

Dans un cristal avec **N atomes / maille élémentaire** on a :

**3 branches acoustiques**

**3N-3 branches optiques**

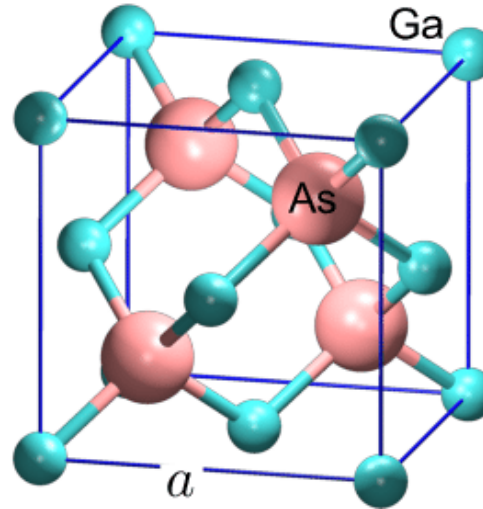
3N branches au total



## Exemple GaAs



Structure diamant  
2 atomes par maille



**3 branches acoustiques  $\rightarrow 3$**

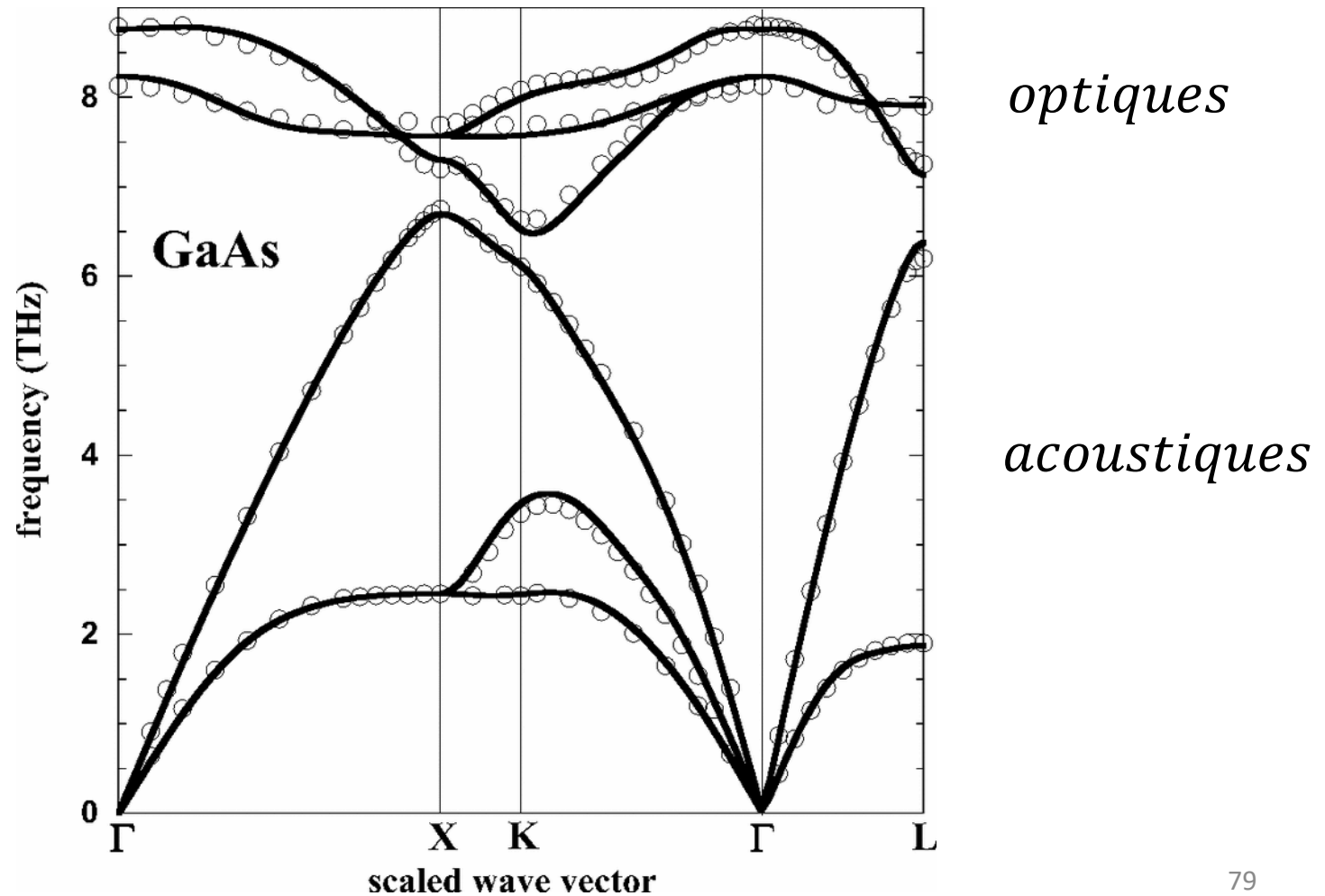
**$3N-3$  branches optiques  $\rightarrow 3 \times 2 - 3 = 3$**

**$3N$  branches au total  $\rightarrow 3 \times 2 = 6$**

# Exemple GaAs

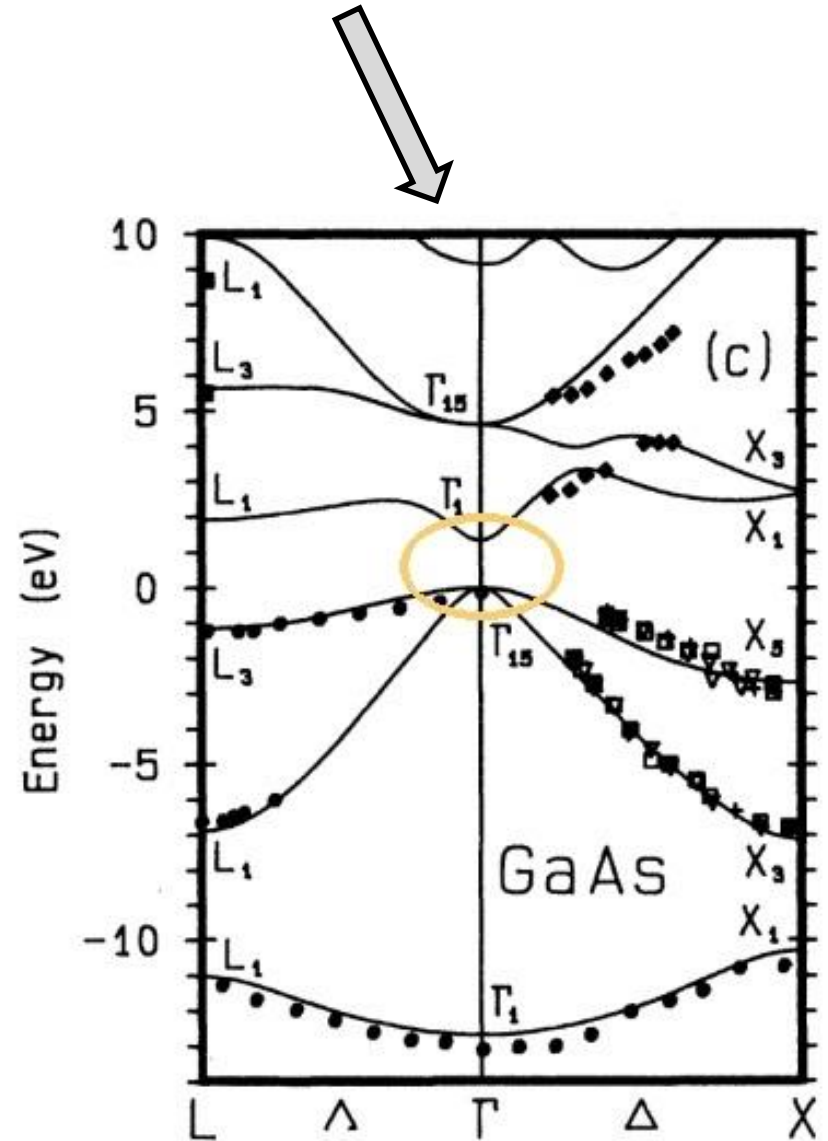
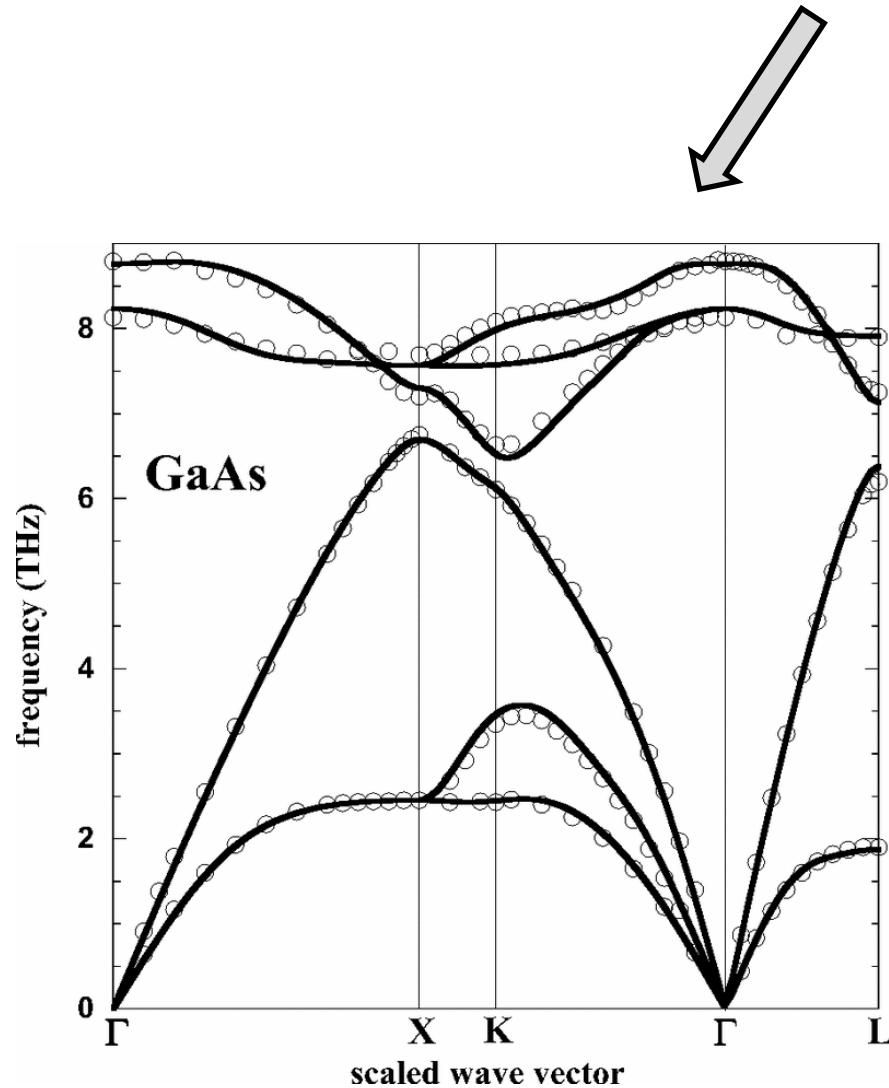
3 branches acoustiques

3 branches optiques



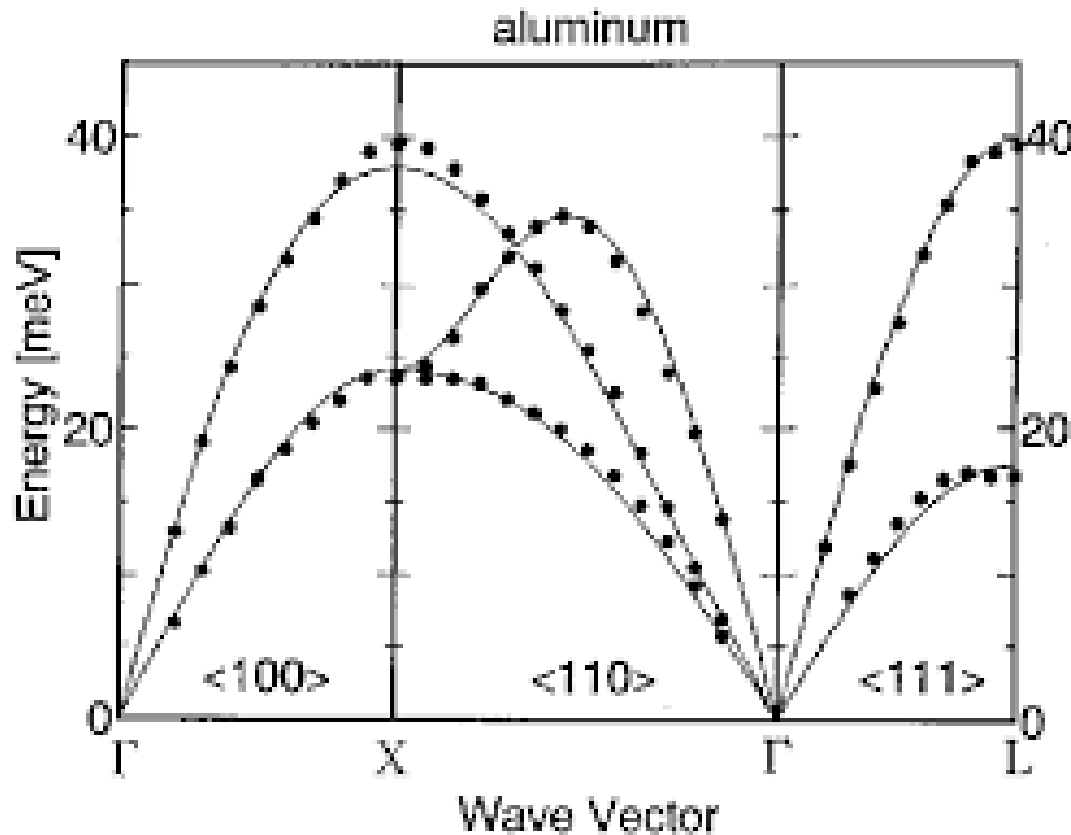
# Remarque

## Structure de bande des **phonons** et des **électrons** dans GaAs

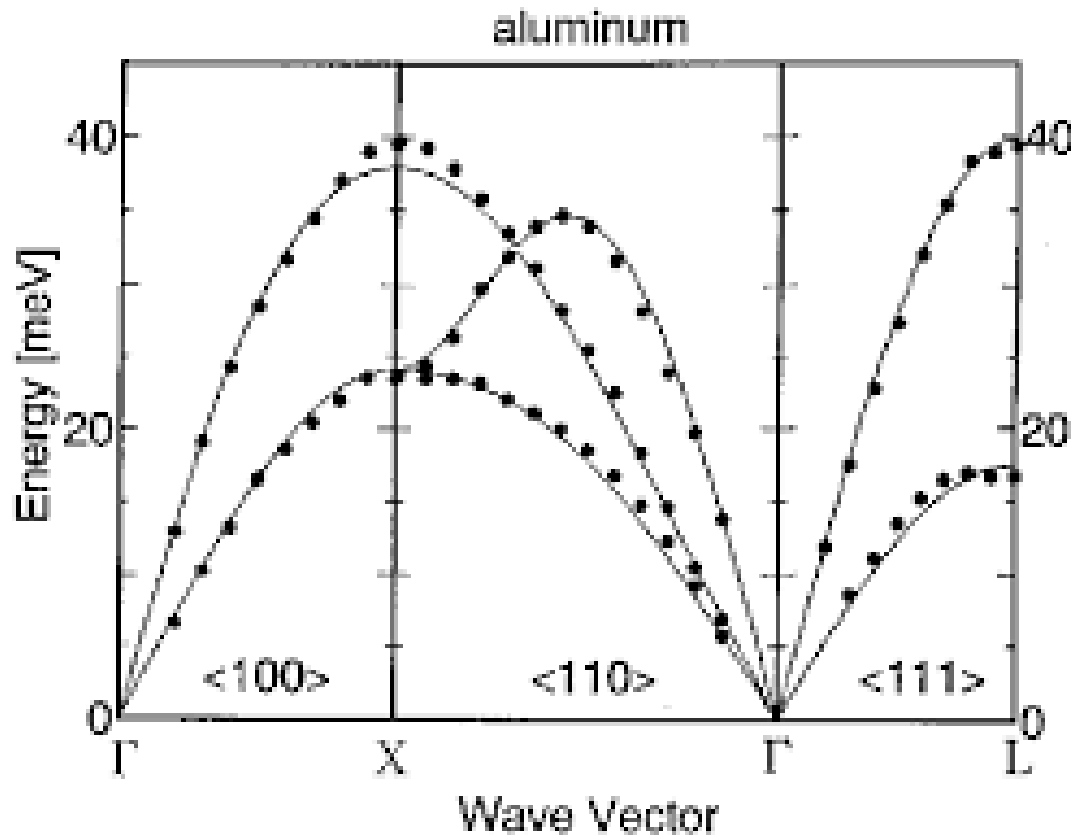




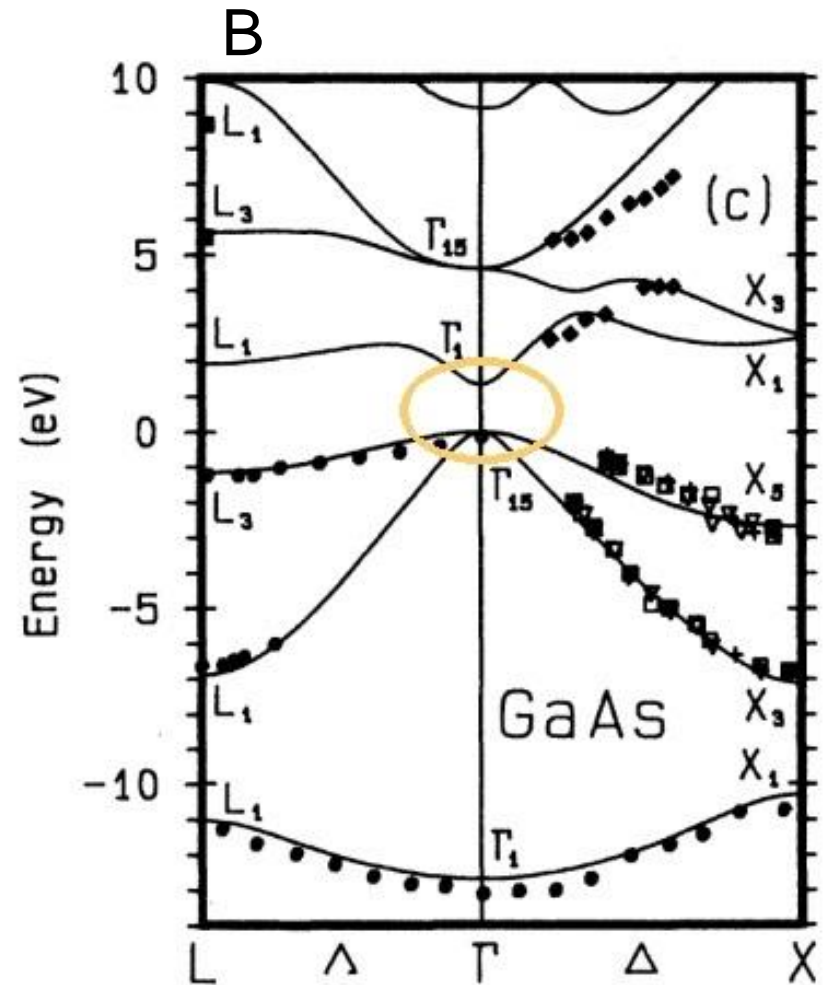
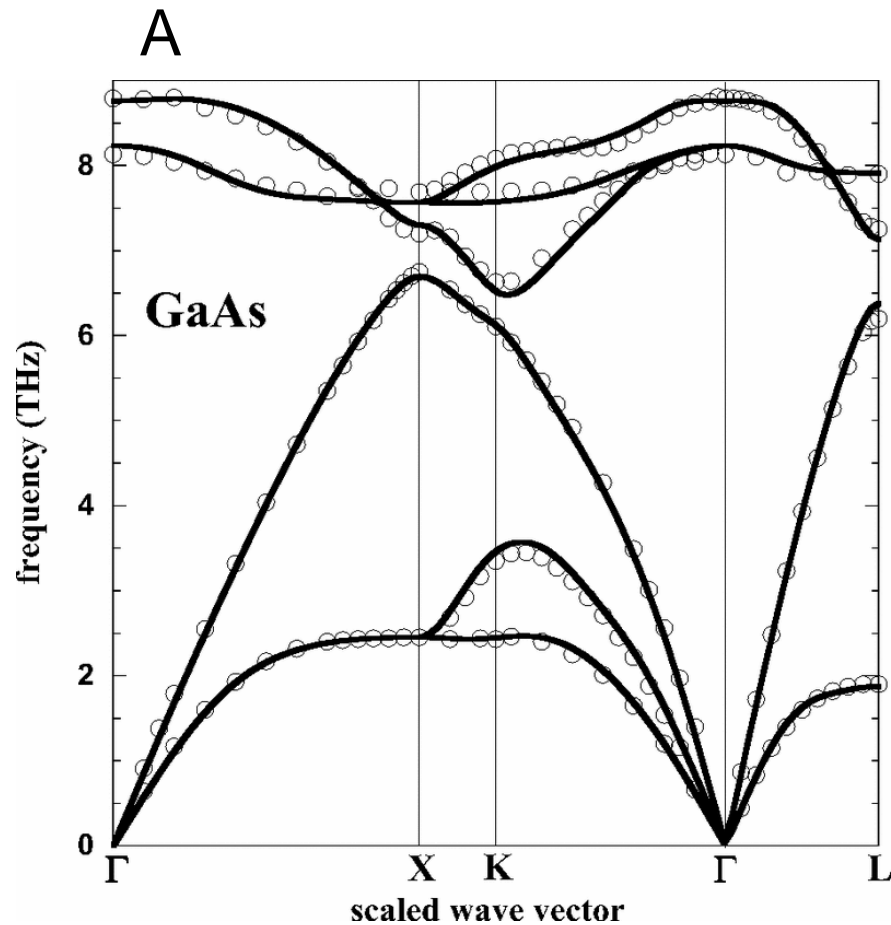
g1. Voici la structure de bande des phonons dans l'aluminium. Elle comporte 0/1/2/3 branche(s) acoustique(s) et 0/1/2/3 branche(s) optique(s), ce qui correspond bien à sa structure cristalline avec 1 atome par maille.



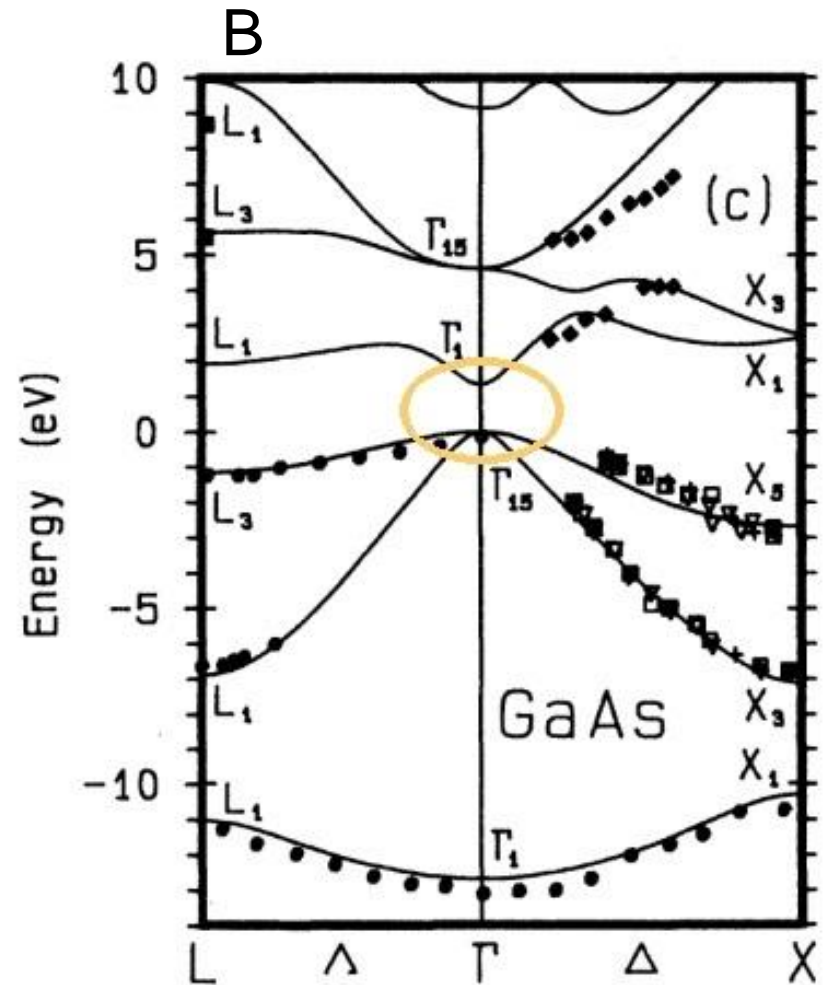
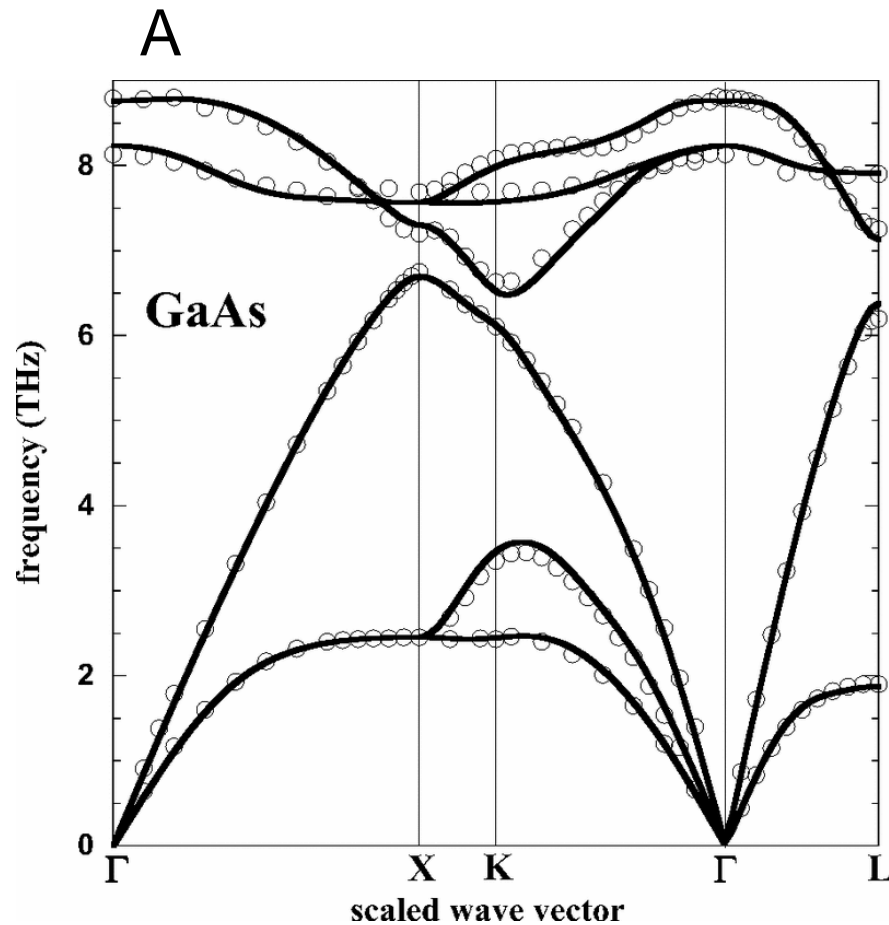
g1. Voici la structure de bande des phonons dans l'aluminium. Elle comporte 3 branche(s) acoustique(s) et 0/1/2/3 branche(s) optique(s), ce qui correspond bien à sa structure cristalline avec 1 atome par maille.



g2. Le graphe (A / B) correspond à la structure de bandes des (électrons/phonons) car on voit des branches qui s'annulent et un comportement linéaire proche de gamma.



g2. Le graphe (**A** / **B**) correspond à la structure de bandes des (électrons/**phonons**) car on voit des branches qui s'annulent et un comportement linéaire proche de gamma.



## PHONONS - RESUME

Description et concepts développés.

Les vibrations du réseau cristallin peuvent être décrits comme des particules, les phonons, qui emmagasinent l'énergie thermique et se propagent dans les solides. Les phonons jouent un rôle important en Physique des Solides ; ils interviendront par exemple dans les propriétés optiques étudiées dans le dernier cours. Ces particules ont une énergie quantifiées. On peut les décrire avec une approche semi-classique, en décrivant le solide comme un ensemble de masses liés par des ressort. On en déduit une relation de dispersion sous forme de bandes, c'est la structure de bandes des phonons. La structure de bandes des phonons s'exprime généralement en termes de fréquence en fonction du vecteur d'onde  $q$ . Elle a la particularité d'avoir des branches « acoustiques » qui sont linéaires à petit vecteur  $q$ , et des branches « optiques ».

Vocabulaire défini dans ce cours.

Phonon, capacité thermique, module d'Young, structure de bandes de phonon, branches acoustiques, branches optiques

Savoir faire.

- Appréhender le lien entre énergie thermique et vibrations du réseau cristallin.
- Déterminer une structure de bandes de phonon d'une chaîne d'atomes unidimensionnelle.
- Distinguer une structure de bandes de phonons par rapport à une structure de bandes électroniques et distinguer les branches acoustiques et optiques.

Voici un magnifique site sur lequel on peut visualiser le type de vibrations correspondant à chaque mode d'une structure de bandes de phonons. On choisit un matériau dans la liste, on clique quelquepart sur la structure de bande, on voit les atomes osciller suivant le mode d'oscillation correspondant.

<http://henriquemiranda.github.io/phononwebsite/phonon.html?yaml=http://henriquemiranda.github.io/phononwebsite/tests/phonopy/band.yaml>