

# Détermination de la conductivité thermique de la silice vitreuse par dynamique moléculaire classique / Use of classical molecular dynamics to calculate the thermal conductivity of silica glass

**Ph. JUND, M. RARIVOMANANTSOA et R. JULLIEN**

*Laboratoire des Verres, Université Montpellier, 2, Place E. Bataillon, Case 069, 34095 Montpellier France*

Les propriétés thermiques des verres, notamment à basses températures, ont été mises en évidence expérimentalement au cours des trente dernières années. Les explications théoriques restent multiples et plusieurs modèles sont toujours proposés actuellement. Dans ce travail de simulation nous avons voulu retrouver les caractéristiques de la conductivité thermique de la silice vitreuse en nous affranchissant de tout modèle préétabli, simplement en utilisant des simulations de Dynamique Moléculaire classique. En fait, mis à part les paramètres du potentiel d'interaction (qui décrivent la forme de l'interaction entre les différents types d'atomes), nous avons utilisé les équations standards du transport de

We use extensive classical molecular dynamics simulations to calculate the thermal conductivity of a model silica glass. Apart from the potential parameters, this is done with no other adjustable quantity and the standard equations of heat transport are used directly in the simulation box. The calculations have been done between 10 and 1000 Kelvin and the results are in good agreement with the experimental data at temperatures above 20 K. The plateau observed around 10 K can be accounted for by correcting our results taking into account finite size effects in a phenomenological way.

chaleur directement dans notre boîte de simulation. Les calculs ont été faits entre 10 et 1000 Kelvin et les résultats sont en bon accord avec les données expérimentales au-dessus de 20 K. D'autre part nous retrouvons le « plateau » de la conductivité thermique aux alentours de 10 K, en prenant en compte les effets de taille finie de notre échantillon, de manière phénoménologique.

## 1. Introduction

Les propriétés thermiques des verres, importantes d'un point de vue industriel à la fois pour les processus de fabrication et pour le comportement mécanique, présentent certaines caractéristiques spécifiques et inhabituelles qui sont bien connues depuis un certain nombre d'années [1]. Ces caractéristiques sont apparentes à la fois dans la chaleur spécifique et dans la conductivité thermique mais nous aimerions nous focaliser ici sur la conductivité thermique  $\kappa$ . La dépendance en température de  $\kappa(T)$  peut être séparée en 3 domaines de température distincts, comme illustré sur la Figure 1, où nous avons reproduit les résultats expérimentaux entre 1 et 100 K [2] et jusqu'à 1000 K [3].

- A très basse température ( $T \leq 1$  K) la conductivité thermique augmente comme  $T^2$  (au lieu de  $T^3$  dans les cristaux). Cette augmentation peut être expliquée dans le cadre d'un modèle basé sur l'effet tunnel [4] qui a été proposé il y a environ trente ans.
- Pour des températures intermédiaires ( $2 \leq T \leq 20$  K) la conductivité thermique présente un « plateau » pour lequel diverses explications ont été proposées [5]. Une extension du modèle précédent, le modèle des « potentiels mous », donne une description cohérente du plateau grâce à l'introduction du concept de « modes mous » [6,7].
- A haute température ( $T \geq 30$  K),  $\kappa(T)$  augmente faiblement et semble converger vers une valeur limite  $\kappa_\infty$ , contrairement à ce qui se passe dans un cristal où  $\kappa(T)$  décroît comme  $1/T$

à température élevée. Récemment cette augmentation de  $\kappa(T)$  à haute température a elle aussi été expliquée dans le cadre du modèle des potentiels mous [8]. Ainsi ce modèle apparaît comme capable de tenir compte des anomalies thermiques dans les verres dans toute la gamme de température.

Notre but ici n'est pas de proposer un nouveau modèle capable d'expliquer les anomalies mentionnées ci-dessus. L'objectif est d'effectuer des simulations de Dynamique Moléculaire (DM) sur un verre modèle de silice en utilisant un potentiel d'interaction classique très répandu (appelé potentiel « BKS »[9]) en ne préjugant pas de tel ou tel modèle capable d'expliquer les anomalies thermiques de la silice. Ceci signifie que nous n'ajoutons pas de quantités *a priori* dans notre potentiel pour reproduire un modèle donné: nous utilisons les équations classiques du transport de chaleur directement dans notre boîte de simulation. En fait nous introduisons artificiellement dans le système une plaque « chaude » et une plaque « froide » compatibles avec les conditions aux limites périodiques, ce qui induit un flux de chaleur. Ce flux crée un gradient de température et une fois le régime permanent atteint nous pouvons déterminer la conductivité thermique directement au cours de la simulation sans paramètres additionnels. Cette technique a été inspirée par des études antérieures [10] dans lesquelles les plaques étaient considérées comme des parois infranchissables par les particules et a principalement été appliquée au calcul de la conductivité thermique dans des systèmes uni ou bi-dimensionnels [11, 12]. D'autres méthodes basées sur le formalisme de Greenwood-Kubo [13] ou les fonctions de corrélation de densité [14] ont par ailleurs été développées pour déterminer la conductivité thermique dans les solides.

Nos résultats pour la conductivité thermique obtenus avec le potentiel BKS sont en bon accord avec les données expérimentales. Tout d'abord l'ordre de grandeur est correct au-dessus de 20 K et entre 20 K et 400 K nous obtenons un bon accord quantitatif. De plus en tenant compte

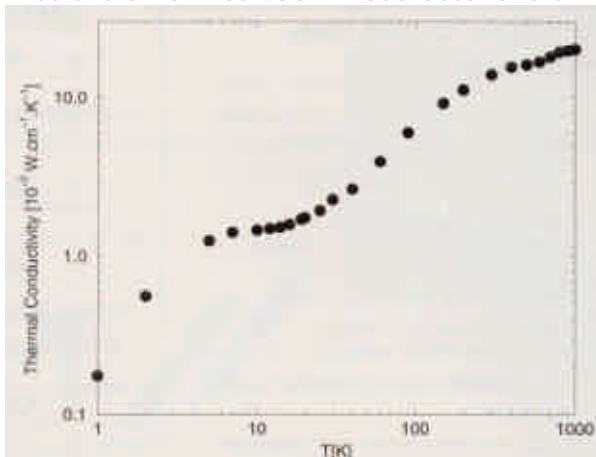


Figure 1 : Représentation log-log de la conductivité thermique expérimentale en fonction de la température dans la silice vitreuse.

des effets de taille finie d'une manière phénoménologique relativement simple, nous retrouvons le plateau autour de 10K visible sur la Figure 1. Finalement le comportement en  $T^2$  à très basse température dont on connaît l'origine quantique est en dehors de notre champ d'investigation puisque nous utilisons un potentiel classique.

Le plan de cet article est le suivant. Dans la section II nous décrivons le mode opératoire utilisé pour obtenir la conductivité thermique. Dans la section III nous présentons les résultats issus directement de la simulation de DM. Ensuite nous montrons les effets de taille finie sur ces résultats et discutons nos données. Finalement dans la section IV nous présentons nos conclusions.

## 2. Mode Opératoire

Mise à part la détermination de  $k(T)$ , nos simulations sont des calculs standards de DM classique sur un ensemble microcanonique (NVE constant) de 648 particules (216 molécules SiO<sub>2</sub>) qui interagissent via le potentiel BKS [15]. Ce potentiel est un potentiel de paires qui contient l'interaction de Coulomb entre des particules chargées et la répulsion à courte portée. Cette interaction crée des forces entre particules et qui dit forces dit accélérations donc mouvements. La DM consiste à intégrer les équations du mouvement (équations de Newton) sur des intervalles de temps  $\Delta t$  discrets (pour nous  $\Delta t = 0.7fs$ ) et donc d'obtenir les trajectoires des particules de manière itérative. Ces particules sont confinées dans une boîte cubique de côté  $L = 21.48 \text{ \AA}$  (la densité vaut à peu près  $2.18 \text{ g/cm}^3$ ) sur laquelle on applique les conditions aux limites périodiques pour simuler un échantillon macroscopique. Ceci signifie que l'effet d'une particule qui sort du système par une face du cube est identique à celui de la même particule entrant dans le système par la face opposée. Les échantillons vitreux sont

obtenus à partir du liquide ( $T \approx 7000$  K) après une trempe continue de  $2.3 \times 10^{14}$  K/s. Cette trempe est effectuée simplement en retirant à chaque itération la quantité d'énergie adéquate du système. Notre vitesse de trempe est bien sur beaucoup plus rapide que les vitesses de trempe expérimentales, mais ceci est principalement dicté par les temps de calcul nécessaires pour effectuer une telle trempe. Le principe de la détermination de la conductivité thermique est illustré sur la Figure 2.

Nous considérons deux plaques  $P_-$  et  $P_+$  perpendiculaires à l'axe  $Ox$  et situées à  $x = -L/4$  et  $x = +L/4$ . Ces plaques ont une épaisseur  $2d$  le long de  $Ox$  et une surface égale à  $L^2$ . Ces positions permettent de conserver les conditions aux limites périodiques sans introduire une asymétrie dans le système. Ceci a l'avantage, comparé à d'autres études [16] dans lesquelles l'introduction des plaques brise la symétrie, d'utiliser un nombre de particules

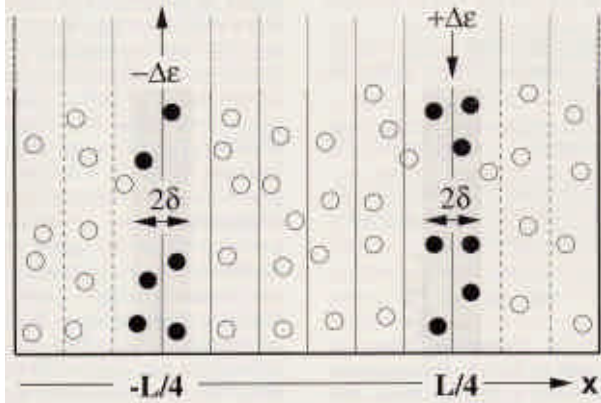


Figure 2: Représentation schématique de la méthode utilisée pour déterminer la conductivité thermique. Plus de détails sont donnés dans le texte.

relativement faible. A chaque itération les particules à l'intérieur de  $P_-$  et  $P_+$  sont déterminées et leur nombre est respectivement  $N_-$  et  $N_+$ . Une fois que ces particules ont été dénombrées, nous retirons une quantité d'énergie constante  $\Delta\epsilon$  à l'énergie des particules dans  $P_-$  et nous l'ajoutons à celle des particules dans  $P_+$ . En imposant le transfert de chaleur de cette manière nous maintenons un flux de chaleur par unité d'aire  $J_x$  [17] constant et égal à  $\Delta\epsilon/(2L^2\Delta t)$ . La modification de l'énergie des particules à l'intérieur des plaques est faite en renormalisant les vitesses. Néanmoins pour éviter une dérive artificielle de l'énergie cinétique, ceci doit être fait en conservant la quantité de mouvement des plaques. Pour une particule  $i$  à l'intérieur de  $P_-$  ou  $P_+$ , la vitesse modifiée est donnée à chaque itération par :

$$\vec{u}'_i = \vec{u}_G + \mathbf{a}(\vec{u}_i - \vec{u}_G) \quad (1)$$

où  $\vec{u}_G$  est la vitesse du centre de masse de l'ensemble des particules dans la plaque et

$$\mathbf{a} = \sqrt{1 \pm \frac{\Delta\epsilon}{E_c^R}} \quad (2)$$

selon que la particule est à l'intérieur de  $P_+$  ou  $P_-$ . L'énergie cinétique relative est donnée par :

$$E_c^R = \frac{1}{2} \sum_i m_i \vec{u}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_i m_i \vec{u}_G^2 \quad (3)$$

En utilisant la définition classique des coefficients de transport [17] la conductivité thermique est donnée par :

$$\mathbf{k} = - \frac{J_x}{\partial T / \partial x} \quad (4)$$

où  $\partial T / \partial x$  est le gradient de température le long de  $Ox$ . Cette formule, appelée Loi de Fourier du flux de chaleur, n'est valable que si le gradient de température dans le système est stable et linéaire. Pour calculer ce gradient nous divisons la boîte de simulation en  $N_s$  « tranches » le long de  $Ox$  dans lesquelles nous calculons la température à chaque itération. Grâce aux conditions aux limites périodiques nous pouvons nous limiter aux  $N_s/2$  tranches entre  $x = -L/4$

et  $x = L/4$  et obtenir ainsi une meilleure détermination de la température dans ces tranches puisque en utilisant des arguments de symétrie ces tranches sont équivalentes aux  $N_s/2$  tranches situées en dehors de  $[-L/4, L/4]$ . Nous pouvons donc déterminer la température  $T_i$  ( $i = 1, \dots, N_s/2$ ) de chaque tranche à chaque itération. En moyennant  $T_i$  sur un grand nombre d'itérations pour éliminer les fluctuations de température dues au faible nombre de particules dans les tranches, nous pouvons déterminer après quel temps de simulation  $t$  l'allure moyennée de  $T(x)$  peut raisonnablement être assimilée à une droite. Après ce temps nous utilisons un ajustement aux moindres carrés du 1er ordre sur les  $T_i$  moyennés dont la pente va nous donner le gradient de température. A ce stade nous avons déterminé toutes les quantités nécessaires pour le calcul de  $k$ .

En ce qui concerne les « détails pratiques » de la simulation nous avons vérifié que les résultats sont indépendants du choix de  $\Delta\epsilon$  et pour les autres quantités nous avons utilisé un compromis entre précision des résultats et temps de calcul. Voici les valeurs que nous avons utilisées dans nos simulations : l'épaisseur des plaques a été prise égale à  $2\delta = 1 \text{ \AA}$ , ce qui signifie qu'à chaque itération environ 30-40 atomes se trouvent à l'intérieur des plaques. Le gradient de température a été calculé sur  $N_s/2 = 6$  tranches, chaque tranche contenant à peu près 100 particules.  $k$  a été calculé sur des échantillons sauvés tout au long de la trempe qui donc ont des températures  $T$  différentes. Pour traiter de manière équivalente chaque échantillon nous avons fixé  $\Delta\epsilon$  à 1 % de  $k_B T$ , ce qui apparaît comme un bon choix. Les gradients de température obtenus de cette manière sont assez faibles pour pouvoir utiliser l'équation 4. Le choix le plus problématique est le temps de simulation  $t$ . En effet pour

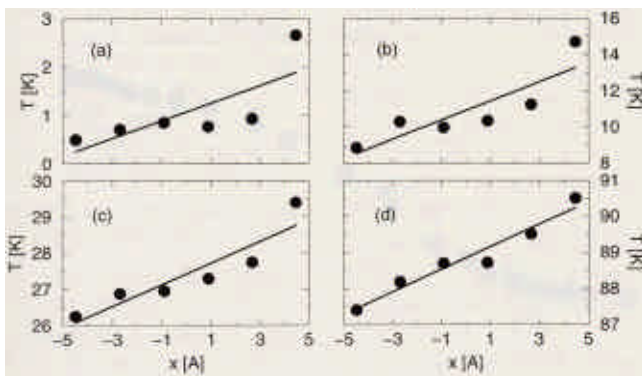


Figure 3 : Valeurs de la température en fonction de  $x$  dans les tranches situées entre  $x = -L/4$  et  $x = L/4$  pour 4 échantillons différents et l'ajustement aux moindres carrés du 1<sup>er</sup> ordre correspondant. (a)  $T \approx 1 \text{ K}$  ; (b)  $T \approx 11 \text{ K}$  ; (c)  $T \approx 27 \text{ K}$  et (d)  $T \approx 89 \text{ K}$ .

atteindre le régime permanent il faut des simulations de DM très longues. Pour nous une simulation typique est faite de 50000 pas de DM (35 ps) directement après la trempe pendant lesquels la température moyenne est fixée et le transfert de chaleur enclenché. Ensuite nous effectuons 450 000 pas supplémentaires (315 ps) sans contrôle de température, durant lesquels les données sont collectées et moyennées. Après ce temps le gradient de température devrait avoir convergé et la valeur de  $k$  devrait être constante. Comme on peut le voir sur la Figure 3, ceci peut être considéré comme qualitativement correct pour les échantillons au-dessus de 10K mais certainement pas pour les échantillons à basse température.

En fait à très basse température des simulations plus longues sont nécessaires (1 million de pas (700 ps)) et encore, la convergence n'est pas parfaite. Notre méthode est donc une méthode qui converge lentement, mais tout de même plus rapidement que les méthodes n'utilisant pas de gradient de température. Il est intéressant aussi de noter que la forme sigmoïdale du profil de température à 1 K est cohérente avec ce que l'on attend dans le régime transitoire, où seul le transport de chaleur près des plaques est efficace. Par la suite nous ne présenterons que les résultats obtenus pour les échantillons au-dessus de 8 K.

### 3. Résultats

Les résultats obtenus pour la conductivité thermique en fonction de la température sont reproduits sur la Figure 4 sur laquelle on a rajouté les résultats expérimentaux de la Figure 1 pour faciliter la comparaison. On peut tout de suite noter que nos simulations avec le potentiel BKS donnent le bon ordre de grandeur dans toute la gamme de température (mis à part les très basses températures) sans paramètres ajustables exceptés les « paramètres techniques » décrits plus haut et les paramètres intrinsèques du potentiel. A très haute température, disons au-dessus de 500 K, la saturation de  $k(T)$  est plus marquée que dans l'expérience.

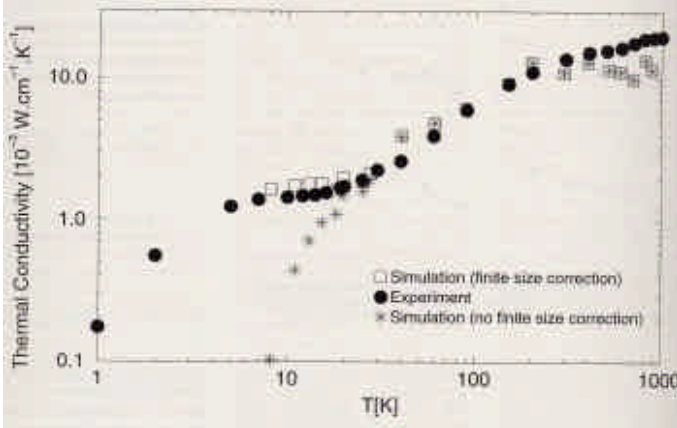


Figure 4 : Représentation log-log de la conductivité thermique en fonction de la température dans la silice vitreuse :  $\bullet$  : expérience ;  $*$  : simulations ;  $\square$  : simulations en tenant compte des effets de taille finie.

Ceci pourrait être dû au fait que d'autres contributions que celles prises en compte dans le calcul peuvent se rajouter pour des températures tellement élevées. Il est connu par exemple que les contributions radiatives (transport de chaleur par les photons) augmentent très rapidement dans cette gamme de température et peuvent devenir aussi importantes que les contributions dues aux phonons [3]. Dans une large gamme intermédiaire, entre 20 et 400 K, l'accord entre les valeurs calculées et les valeurs expérimentales est très bon. En particulier on retrouve bien dans la simulation l'augmentation de  $k(T)$  contrairement à ce qui se passe dans des échantillons cristallisés. L'écart le plus important entre la simulation et

l'expérience est visible entre 8 et 20 K puisque nous ne retrouvons pas le fameux plateau si typique. Dans ce qui suit nous argumentons que cet écart est principalement dû à des effets de taille finie.

Dans notre boîte de simulation cubique et finie sur laquelle nous appliquons les conditions aux limites périodiques, les composantes du vecteur d'onde  $\vec{k}$  prennent des valeurs discrètes de la forme  $k_x = n_x 2\pi/L$ , où  $n_x$  est un entier relatif (et de manière similaire dans les autres directions spatiales). Ainsi, par principe, il n'existe pas de phonons propagatifs avec une fréquence inférieure à la fréquence de coupure  $w_c$  qui vaut  $2\pi u_T/L$ , où  $u_T$  est la vitesse du son transverse. En prenant la valeur expérimentale  $u_T = 3.75 \times 10^5$  cm/s pour la silice on obtient  $w_c/2\pi \cong 1.5$  THz. En pratique en diagonalisant la matrice dynamique nous trouvons une première fréquence non nulle légèrement plus faible,  $w_0/2\pi \cong 1.2$  THz, en accord avec l'existence d'un excès de modes (peut-être non propagatifs) appelé « pic Boson » [19] qui se trouve dans cette gamme de fréquences [20]. De ce fait si on utilise la correspondance  $\hbar w = 3k_B T$  qui donne la fréquence moyenne des phonons excités à une température  $T$ , il n'existe pas assez de phonons excités à des températures inférieures à  $T_0 = 19$  K dans notre boîte pour espérer reproduire la courbe expérimentale correctement. Dans la Figure 4 l'écart entre la courbe théorique et la courbe expérimentale commence justement à se creuser aux alentours de 20 K, ce qui est en bon accord avec cette analyse. Pour tenter d'avoir des arguments plus quantitatifs, faisons l'hypothèse que la conductivité thermique est donnée par la formule habituelle [22],

$$\mathbf{k} = \frac{1}{3} C \mathbf{u} \ell \quad (5)$$

où  $C$  est la chaleur spécifique par unité de volume,  $\mathbf{u}$  et  $\ell$  la vitesse et le libre parcours moyen des phonons, respectivement. En appliquant cette formule à des verres il faut être prudent à cause des effets de localisation de modes. Très clairement,  $\mathbf{u}$  et  $\ell$  sont les caractéristiques des phonons propagatifs, c'est-à-dire ceux qui réellement contribuent aux phénomènes de transport. De ce fait la chaleur spécifique  $C$  à considérer ne devrait être due qu'à ces mêmes phonons qui ont, à basse température, le comportement de Debye habituel (le même que dans les cristaux) [4, 6]. Si nous supposons aussi que le manque de phonons dans notre boîte, c'est-à-dire une mauvaise valeur de  $C$ , est la cause principale de la valeur sous-estimée de  $\mathbf{k}$  dans nos calculs, un moyen simple d'y remédier est de multiplier nos valeurs de  $\mathbf{k}$  par un facteur correctif  $C_\infty / C_b$ . On peut estimer ce facteur en prenant pour  $C_\infty$  et  $C_b$  les chaleurs spécifiques calculées dans l'approximation de Debye pour un système infini et pour une boîte cubique de côté  $L$ , respectivement. Pour calculer ce facteur dépendant de la température nous avons utilisé les formules classiques [22]

$$C_\infty = \frac{k_B}{2p^2} \left( \frac{1}{u_L^3} + \frac{2}{u_T^3} \right) \int_0^{w_D} \left( \frac{\hbar w / 2k_B T}{\sinh(\hbar w / 2k_B T)} \right)^2 w^2 dw \quad (6)$$

$$C_b = \frac{k_B}{L^3} \sum_p \sum_{\vec{k}} \left( \frac{\hbar \mathbf{u}_p \cdot \vec{k} / 2k_B T}{\sinh(\hbar \mathbf{u}_p \cdot \vec{k} / 2k_B T)} \right)^2 \quad (7)$$

avec  $\mathbf{w}_D^3 = (N/L^3) 18p^2 (1/\mathbf{u}_L^3 + 2/\mathbf{u}_T^3)^{-1}$ . Dans l'expression de  $C_b$  la double somme se fait sur les trois polarisations  $p = L, T_1, T_2$  et sur les  $N$  premiers vecteurs  $\vec{k}$  (quantifiés comme indiqué plus haut) de norme  $k = |\vec{k}|$ . Pour  $N$  et  $L$  nous avons pris les valeurs de la simulation  $N = 648$  et  $L = 21.48 \text{ \AA}$  et pour les vitesses du son les valeurs expérimentales,  $\mathbf{u}_L = 5.9 \times 10^5 \text{ cm/s}$  et  $\mathbf{u}_{T_1} = \mathbf{u}_{T_2} = 3.75 \times 10^5 \text{ cm/s}$  [18]. Quand on corrige nos valeurs numériques de cette manière, nous obtenons les carrés représentés sur le Figure 4 et il apparaît que ces nouveaux points sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux dans la région du plateau. Bien évidemment notre correction est assez grossière puisqu'elle suppose que les effets de taille finie n'affectent que la contribution de la chaleur spécifique dans l'expression de  $\kappa$  (Eq.5) et que l'approximation harmonique est valable pour les phonons propagatifs dans toute la gamme de température. Néanmoins nous pensons que l'accord avec les données expérimentales ainsi obtenu ne peut être fortuit. Il est regrettable que nous n'ayons pas pu obtenir de résultats pour des températures inférieures à 8 K (puisque nous n'avons pas pu atteindre le régime permanent). De toute manière, après correction, les valeurs de  $\kappa$  auraient certainement été plus élevées que les valeurs expérimentales puisqu'à très basse température les phonons propagatifs commencent à diffuser sur les systèmes à deux niveaux quantiques [4] et ont de ce fait un libre parcours moyen plus petit que celui obtenu dans nos simulations classiques.

## 4. Conclusion

Nous avons présenté dans ce travail les résultats d'une simulation de Dynamique Moléculaire classique destinée à déterminer la conductivité thermique d'un verre de silice modèle. Ceci a été fait *in situ*, directement dans le processus de DM, en utilisant les équations qui régissent les coefficients de transport macroscopique sans préjuger d'un modèle particulier. A haute température ( $T > 20 \text{ K}$ ), les valeurs calculées de la conductivité thermique sont en bon accord avec les valeurs expérimentales et en incluant très simplement des corrections de taille finie on retrouve le plateau typique aux alentours de 10 K dont plusieurs interprétations ont été données dans la littérature [5]. Cet accord est d'autant plus surprenant si l'on considère la vitesse de trempe ultra-rapide avec laquelle ont été obtenus nos échantillons. Ceci montre que des calculs utilisant des potentiels d'interaction relativement simples comme le potentiel BKS sont capables de reproduire les anomalies thermiques de la silice vitreuse sans paramètres additionnels. Ceci démontre aussi que l'origine de ces anomalies n'est pas à chercher dans des théories complexes. Il est clair que par certains aspects les simulations numériques sont encore loin de pouvoir reproduire des expériences réelles, notamment parce que la vitesse des processeurs n'est pas infinie. Mais est-ce vraiment le but ? Nos simulations montrent qu'il faut arriver à extraire la substantifique moelle d'un problème, à la traduire en équations et en chiffres pour pouvoir décrire la physique d'un phénomène, même si dans les détails la simulation est loin des conditions expérimentales. De ce fait la modélisation est un outil complémentaire à l'expérimentation et indispensable à une compréhension globale des phénomènes physiques.

## Remerciements

*La majorité de nos calculs ont été effectués sur l'ordinateur parallèle IBM/SP2 du CNUSC (Centre National Universitaire Sud de Calcul) à Montpellier.*

## Références

- [1] BRUCKNER R., *J. Non-Cryst. Solids*, 5 (1970), p. 123 ; ZELLER R.C., POHL R.O., *Phys. Rev. B*, 4 (1971), p. 2029 ; CAHILL D.G., POHL R.O., *Phys. Rev. B*, 35 (1987) p. 4067.
- [2] STEPHENS R.B., *Phys. Rev. B*, 8 (1973), p. 2896.

- [3] ZARZYCKI J., dans *Les verres et l'état vitreux*, Masson, Paris (1982).
- [4] ANDERSON P.W., HALPERIN B.I., VARNA C.M., *Phil. Mag.*, 25 (1972), p. 1 ; PHILLIPS W.A., *J. Low Temp. Phys.*, 7 (1972), p. 351.
- [5] GRAEBNER J.E., GOLDING B., ALLEN L.C., *Phys. Rev. B*, 34 (1986), p. 5696 ; YU C.C., FREEMAN J.J., *Phys. Rev. B* 36 (1987), p. 7620 ; AKKERMANS E., MAYNARD R., *Phys. Rev. B*, 32 (1985), p. 7850 ; ALEXANDER S., ENTIN-WOHLMAN O., ORBACH R., *Phys. Rev. B* 34 (1986), p. 2726.
- [6] KARPOV V.G., KLINGER M.I., IGNAT'EV F.N., *Sov. Phys. JETP*, 57 (1983), p. 439.
- [7] ILL'IN M.A., KARPOV V.G., PARSHIN D.A., *Sov. Phys. JETP*, 65 (1987), p. 165.
- [8] GIL L., RAMOS M.A., BRINGER A., BUCHENAU U., *Phys. Rev. Lett.*, 70 (1993), p. 182.
- [9] VAN BEEST B.W.H., KRAMER G.J., VAN SANTEN R.A., *Phys. Rev. Lett.*, 64 (1990), p. 1955.
- [10] TENENBAUM A., CICOTTI G., GALLICO R., *Phys. Rev. A*, 25 (1982), p. 2778 ; MOUNTAIN R.D., MAC DONALD R.A., *Phys. Rev. B*, 28 (1983), p. 3022.
- [11] MAEDA A., MUNAKATA T., *Phys. Rev. E*, 52 (1995), p. 234.
- [12] MICHALSKI J., *Phys. Rev. B*, 45 (1992), p. 7054.
- [13] ALLEN P.B., FELDMAN J.L., *Phys. Rev. B* 48 (1993), p. 12581 ; FELDMAN J.L., KLUGE M.D., ALLEN P.B., WOOTEN F., *Phys. Rev. B*, 48 (1993), p. 12589.
- [14] LADD A.J.C., MORAN B., HOOVER W.G., *Phys. Rev. B*, 34 (1986), p. 5058.
- [15] JUND P., JULLIEN R., *Phil. Mag. A*, 79 (1999), p. 223.
- [16] KABURATI H., MACHIDA M., *Phys. Lett. A*, 181 (1993), p. 85.
- [17] REIF F. dans *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw-Hill (1965).
- [18] TERKI F., LEVELUT C., BOISSIER M., PELOUS J., *Phys. Rev. B* 53 (1996), p.2411.
- [19] WINTERLING G., *Phys. Rev. B*, 12 (1975), p. 2432 ; GALEENER F.L., LEADBETTER A.J., STRINGFELLOW M.W., *Phys. Rev. B*, 27 (1983), p. 1052 ; BUCHENAU U., ZHOU H.M., NUKER N., GILROY K.S., PHILLIPS W.A., *Phys. Rev. Lett.*, 60 (1988), p. 1318.
- [20] Nous trouvons (comme d'autres auteurs travaillant sur le même système [21] un excès de modes à basses fréquences comparé à la distribution de Debye quand nous diagonalisons la matrice dynamique. Néanmoins l'excès maximum se situe aux alentours de 2THz, c'est-à-dire pratiquement le double de la valeur expérimentale. Nous pensons que cet écart est dû à des effets de taille finie : en diminuant la fréquence la plus basse  $\omega_0$ , ce maximum se décalerait vers des fréquences plus faibles.
- [21] TARASKIN S.N., ELLIOTT S.R., *Phys. Rev. B*, 55 (1997), p. 1.
- [22] KITTEL C. dans *Introduction à la Physique de l'état solide*, Paris, Dunod, (1970).

Source : **Revue VERRE** – Vol 6, n°4. Septembre 2000  
 © Institut du Verre – <http://www.institutduverre.fr>