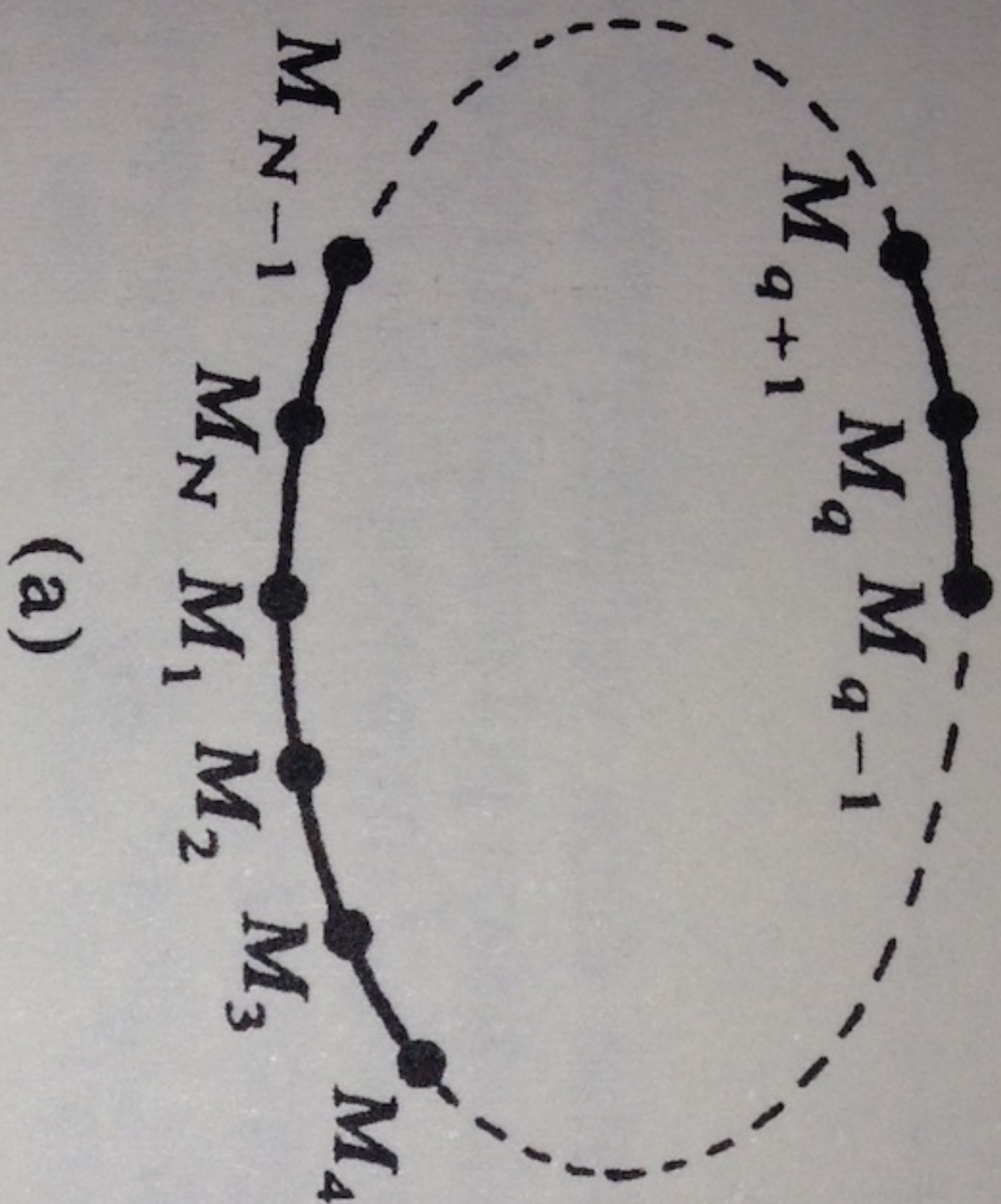
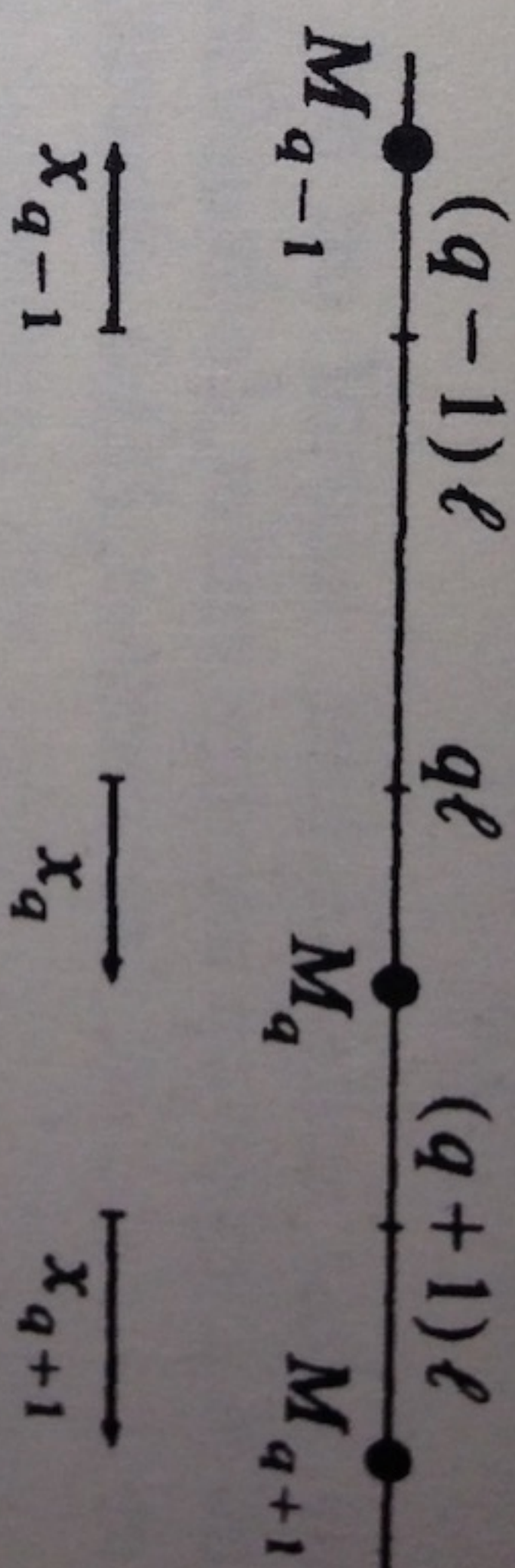


réseau; nous ne considérons que des mouvements longitudinaux et notons  $x_q$  l'écart (algébrique) de  $M_q$  par rapport à sa position d'équilibre.



(a)



(b)

FIGURE 2  
Chaîne linéaire fermée de  $N$  atomes  $M_q$ , constituant un cristal à une dimension sans effets de bords. La figure 2.a indique les positions d'équilibre des atomes, la figure 2.b leurs écarts  $x_q$  par rapport à ces positions, à un instant donné.

Nous supposons que chaque atome  $M_q$  de la chaîne est soumis, de la part de chacun de ses deux voisins  $M_{q-1}$  et  $M_{q+1}$ , à une force de rappel de type harmonique, c'est-à-dire proportionnelle à l'écart relatif  $(x_q - x_{q\pm 1})$ :

(E.19)

$$F_q = -K(x_q - x_{q+1}) - K(x_q - x_{q-1}),$$

où  $F_q$  est la mesure algébrique de la force le long de la chaîne orientée et  $K$  une



la courbe ainsi obtenue. Sa forme, relativement compliquée, présente le plus souvent deux maximums : le plus étroit, qui se produit pour  $\omega$  proche de la borne supérieure  $\omega_M$  du spectre, correspond aux modes longitudinaux; l'autre, plus large et situé vers  $\omega \sim \omega_M/2$  ou  $\omega_M/3$ , provient principalement des modes transversaux. Pour les petites valeurs de  $\omega$ , la courbe démarre comme  $\omega^2$  (voir formule (E.59) page suivante).

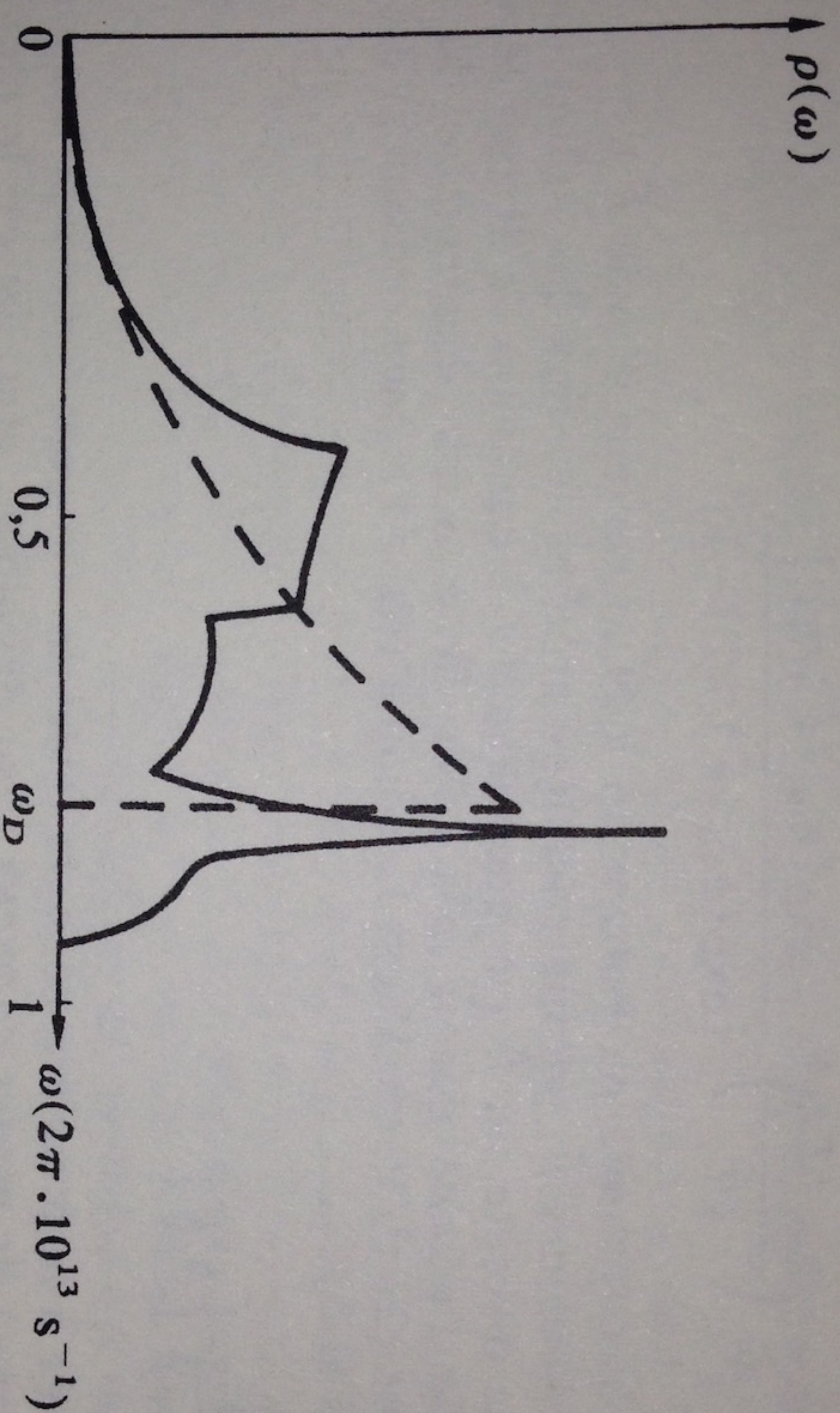


FIGURE 4

Densité de modes normaux dans un cristal tel que l'aluminium. La courbe en trait plein schématise la densité déterminée expérimentalement, la courbe pointillée correspond à l'approximation de Debye (§ 2).



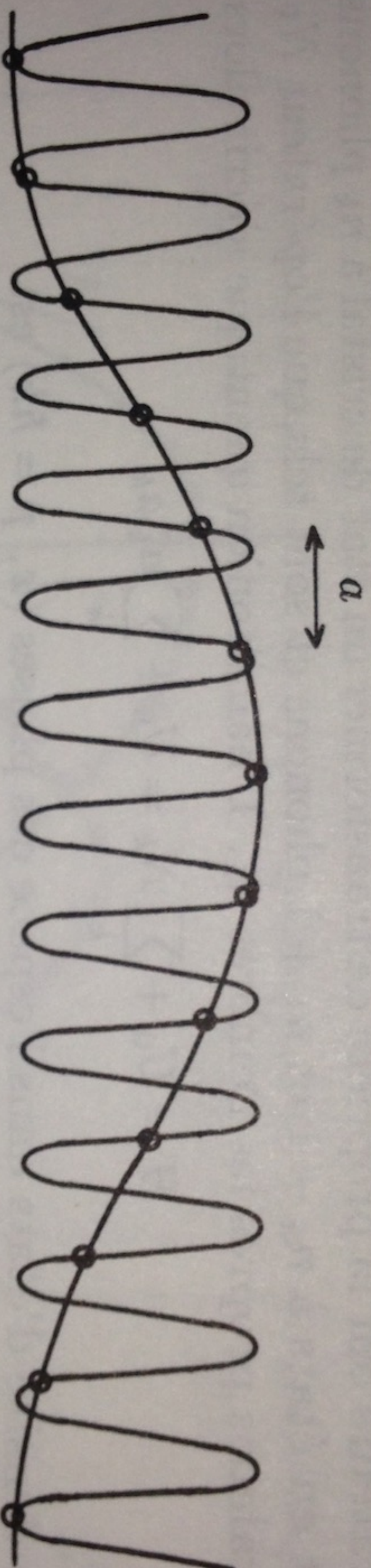


Figure 8.10 Représentation des déplacements des atomes par deux ondes sinusoïdales :  $k = \pi/6a$  ( $\lambda = 12a$ ) et  $k = \pi/6a + 2\pi/a$  ( $\lambda = 12a/13$ ). L'onde choisie vérifie  $|k| < \pi/a$ .

## Phonons

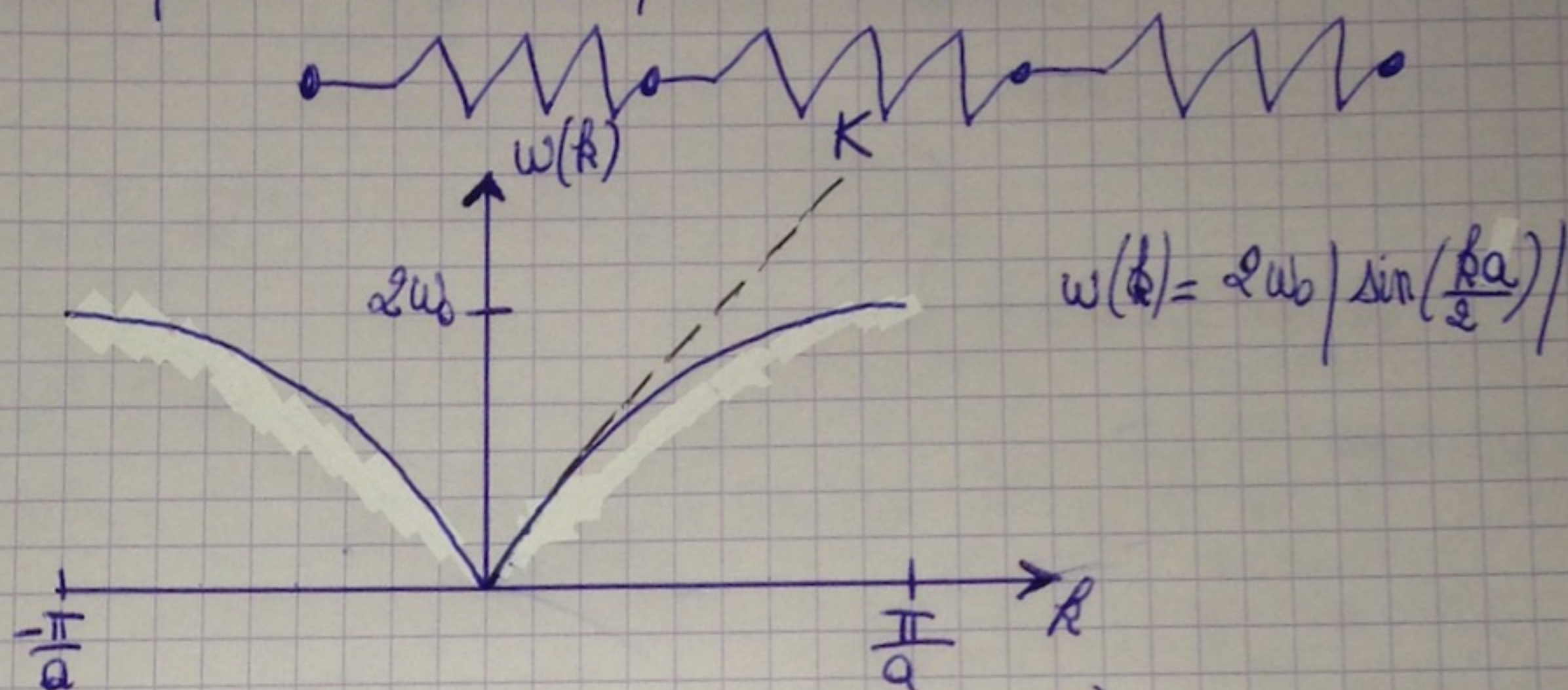
A l'échelle atomique, les systèmes doivent être traités en mécanique quantique ce qui a pour effet de quantifier l'énergie. Pour un oscillateur harmonique de pulsation propre  $\omega$ , l'énergie s'écrit

$$\epsilon = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$



# • Modèle de Debye

- Prise en compte des interactions entre proches voisins



- A basse température (ie pour des faibles niveaux d'énergie):

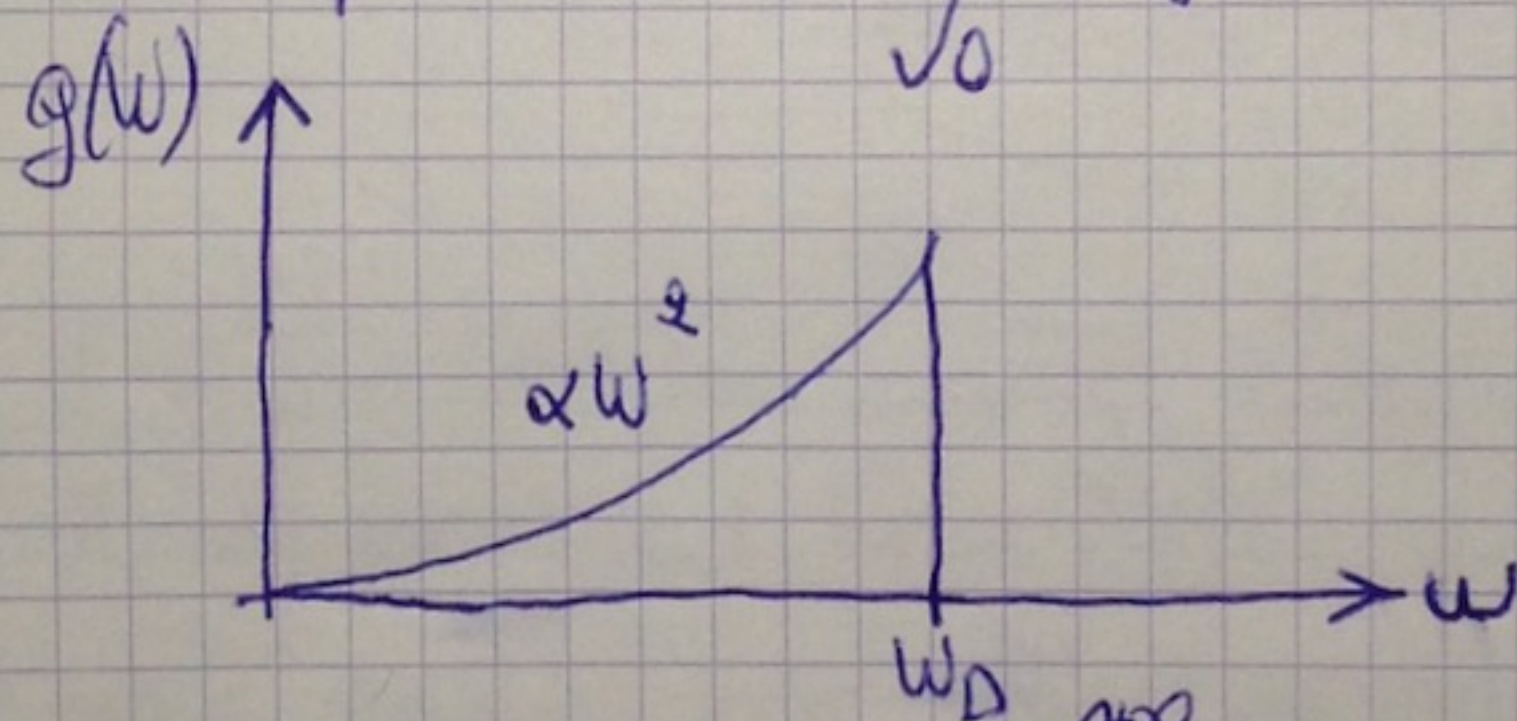
$$\omega(k) = k \times c \quad c = ka$$

- Les  $3N$  premiers niveaux d'énergie suivent cette relation de dispersion.

$$g(\omega) d\omega = 3 \int_V \frac{d^3 \vec{k}}{R^3} \frac{d^3 \vec{p}}{R^3} = \frac{3V k^2 dk}{2\pi^2} = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2 d\omega}{c^3}$$

$\uparrow$   $\vec{p} = \hbar \vec{k}$                        $\uparrow$   $\omega = kc$

- Pulsation de coupure  $\omega_D$ :  $\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N \Rightarrow \omega_D = C \left( \frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$



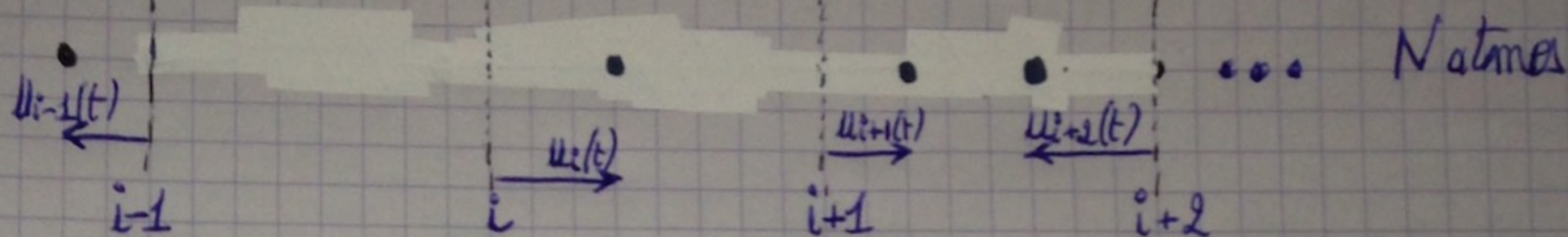
$$F = -k_B T \ln Z = E_0 + k_B T \int_0^{\infty} g(\omega) \ln(1 - e^{-\beta \hbar \omega}) d\omega$$

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \Rightarrow C_V = k_B \int_0^{\infty} \frac{e^{-\beta \hbar \omega}}{(e^{-\beta \hbar \omega} - 1)^2} (\beta \hbar \omega)^2 g(\omega) d\omega$$

- Aux basses températures ( $T \ll \Theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}$ ):

$$C_V = \frac{12}{5} \pi^4 N k_B \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$





$$E_c = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^N \dot{u}_i^2$$

• Energie potentielle (approximation harmonique)

$$V(\{u_i\}_i) = V_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\alpha,\beta} \frac{\partial^2 V}{\partial x_{i\alpha} \partial x_{j\beta}} u_{i\alpha} u_{j\beta}$$

$$H = V_0 + \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^N \dot{u}_i^2$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{i,j,\alpha,\beta} A_{ij\alpha\beta} u_{i\alpha} u_{j\beta}$$

matrice  $3N \times 3N$

symétrique réelle

→ diagonalisable

$$u_{i\alpha} = \sum_{n=1}^{3N} P_{n,i\alpha} q_n$$

→ coordonnée normale

$$H = V_0 + \frac{1}{2} m \sum_{n=1}^{3N} \dot{q}_n^2 + \omega_n^2 q_n^2$$

$$E_p = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{3N} m_n \hbar \omega_n$$

gaz de pseudo particules (phonons)

d'énergie  $\hbar \omega_n$  en nombre  $m_n \in \mathbb{N}$  → bosons

$$N_{ph} = \sum_{n=1}^{3N} m_n$$

• Fonction de partition:  $Z = e^{-\beta E_0} \prod_{n=1}^{3N} \frac{1}{1 - \exp(-\beta \hbar \omega_n)}$  → Bose-Einstein

• Modèle d'Einstein (1907): Tous les atomes vibrent à la même pulsation  $\omega_E$ .

A haute température:  $C_v = 3NkT$

$$T \gg \theta_E = \frac{\hbar \omega_E}{k_B}$$

A basse température:  $C_v \approx 3Nk \left( \frac{T_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{T_E}{T}}$

Rappel:  $C_v = 3Nk \beta^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta^2}$