



Physique des solides

Une introduction

Jean-michel.gillet@centralesupelec.fr



Dynamique du réseau 2

(Phonons et chaleur spécifique)

1. Energie interne et phonons

2. Chaleur spécifique

1. A haute température

2. A basse température

3. Modèles d'interpolation

1. Modèle d'Einstein

2. Modèle de Debye



1. Phonons et énergie interne

Une approche quantique des couplages harmoniques

$$\hat{H} = \sum_q \left(\hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega(q)$$

On appelle « phonon » un quantum d'énergie (une excitation élémentaire) d'un mode de vibration du réseau.



1. Phonons et énergie interne

Une approche quantique des couplages harmoniques

$$\varepsilon_s = \sum_q \left(n_{q,s} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega(q)$$

$$|\phi_s\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$$

Bosons en nombres indéterminés



1. Phonons et énergie interne

Une approche quantique des couplages harmoniques

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad \overset{\text{EXO}}{\downarrow} \quad C_V = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$$

$$|\phi_s\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$$

Bosons en nombres indéterminés



1. Phonons et énergie interne

Une approche quantique des couplages harmoniques

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$Z = \sum_s e^{-\beta \sum_q (n_{q,s} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_q}$$



1. Phonons et énergie interne

Une approche quantique des couplages harmoniques

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$Z = e^{-\frac{\beta}{2} \sum_q \hbar \omega_q} \sum_{\substack{s \\ \downarrow}} e^{-\beta \sum_q n_{q,s} \hbar \omega_q}$$

$$|\phi_s\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$$



1. Phonons et énergie interne

Une approche quantique des couplages harmoniques

$$Z = e^{-\frac{\beta}{2} \sum_q \hbar \omega_q} \sum e^{-\beta \sum_q n_{q,s} \hbar \omega_q}$$

$$Z = e^{-\frac{\beta}{2} \sum_q \hbar \omega_q} \prod_q^s \sum_n e^{-\beta n \hbar \omega_q}$$

$$|\phi_s\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$$



1. Phonons et énergie interne

Une approche quantique des couplages harmoniques

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{1}{2} \sum_q \hbar \omega_q + \sum_q \frac{\hbar \omega_q e^{-\beta \hbar \omega_q}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_q}}$$

$$Z = e^{-\frac{\beta}{2} \sum_q \hbar \omega_q} \prod_q \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_q}}$$



1. Phonons et énergie interne

Une approche quantique des couplages harmoniques

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \sum_q \left(\frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_q} - 1} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_q$$

$$Z = e^{-\frac{\beta}{2} \sum_q \hbar \omega_q} \prod_q \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_q}}$$



1. Phonons et énergie interne

Une approche quantique des couplages harmoniques

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \sum_q \left(\bar{n}_q + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_q$$

**Modes de vibration
mécanique**

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_q} - 1}$$



Dynamique du réseau 2

(Phonons et chaleur spécifique)

1. Energie interne et phonons

2. Chaleur spécifique

1. A haute température

2. A basse température

3. Modèles d'interpolation

1. Modèle d'Einstein

2. Modèle de Debye



2. Chaleur spécifique du réseau

Énergie interne

$$U = \sum_q \left(\bar{n}_q + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_q$$



**Modes de vibration
mécanique**

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_q} - 1}$$



2. Chaleur spécifique du réseau

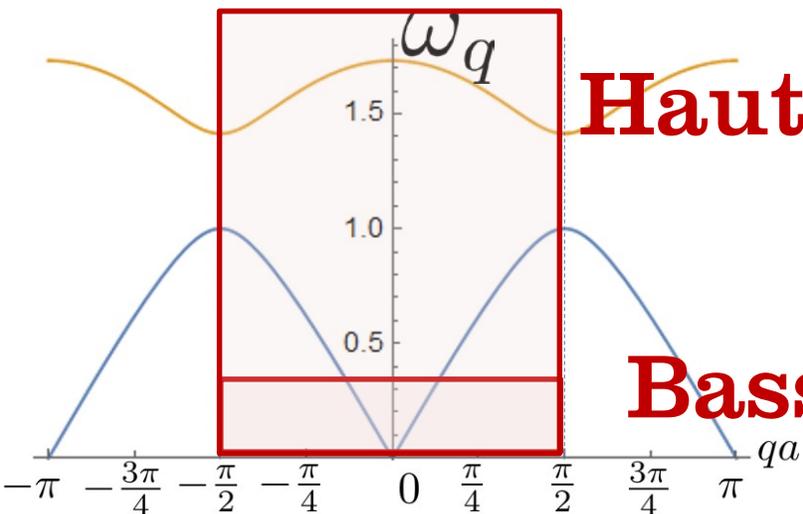
Chaleur spécifique

$$c_V = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} U = \frac{1}{V} \sum_q \hbar \omega_q \frac{\partial}{\partial T} \bar{n}_q$$

Haute température

$$\bar{n}_q = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_q} - 1}$$

Basse température





Dynamique du réseau 2

(Phonons et chaleur spécifique)

1. Energie interne et phonons

2. Chaleur spécifique

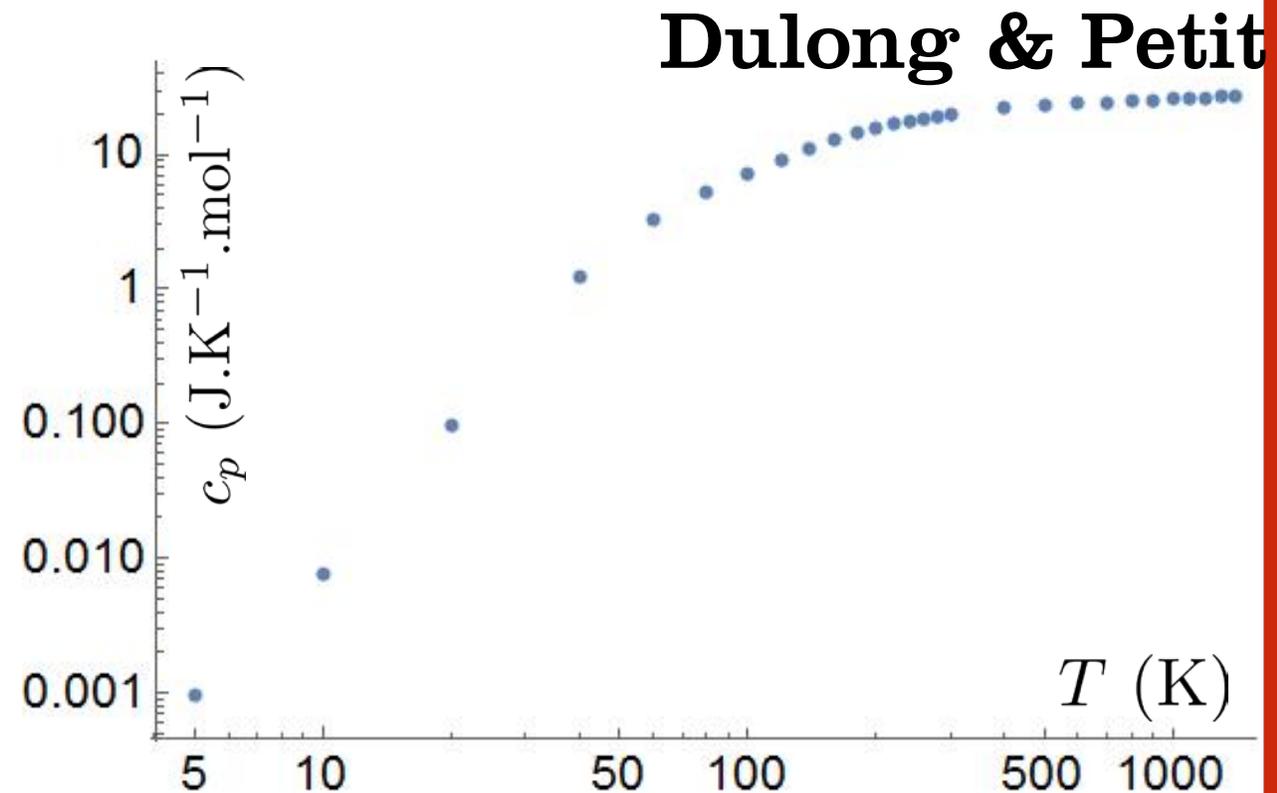
1. A haute température

2. A basse température

3. Modèles d'interpolation

1. Modèle d'Einstein

2. Modèle de Debye





2.1 Chaleur spécifique du réseau à haute température

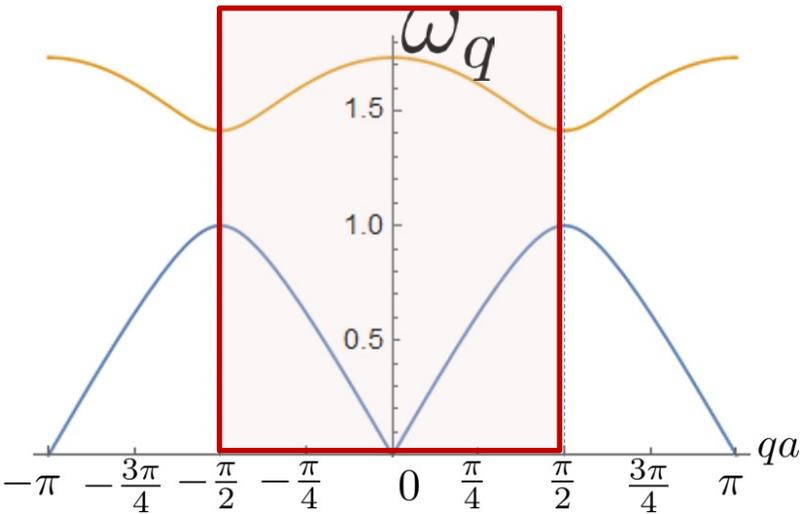
$$k_B T \gg \hbar \omega_q$$

$$\beta \hbar \omega_q \ll 1$$

$$c_V = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} U = \frac{1}{V} \sum_q \hbar \omega_q \frac{\partial}{\partial T} \bar{n}_q$$



$$\bar{n}_q \approx \frac{1}{\beta \hbar \omega_q}$$





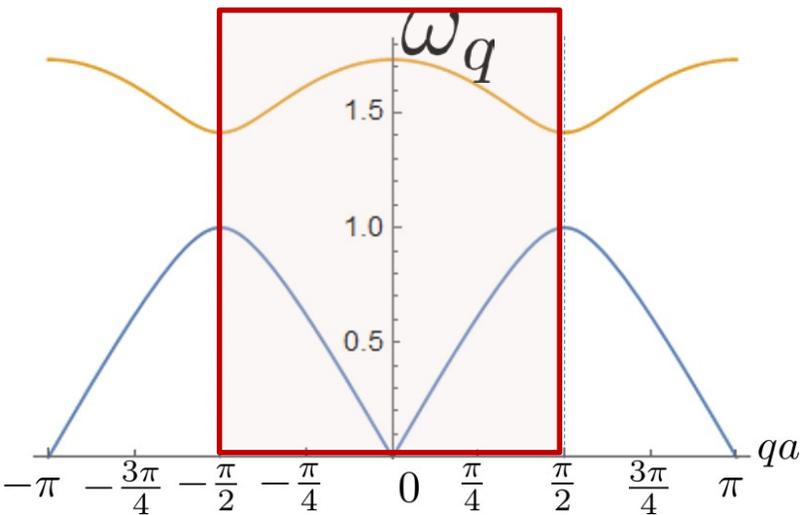
2.1 Chaleur spécifique du réseau à haute température

$$k_B T \gg \hbar \omega_q$$

$$\beta \hbar \omega_q \ll 1$$

$$c_V \approx \frac{k_B}{V} 3N_{\text{cell}} \times N_{\text{at}}$$

Dulong & Petit



Les modes = les degrés de liberté

$$\bar{n}_q \approx \frac{1}{\beta \hbar \omega_q}$$



Dynamique du réseau 2

(Phonons et chaleur spécifique)

1. Energie interne et phonons

2. Chaleur spécifique

1. A haute température

2. A basse température

3. Modèles d'interpolation

1. Modèle d'Einstein

2. Modèle de Debye

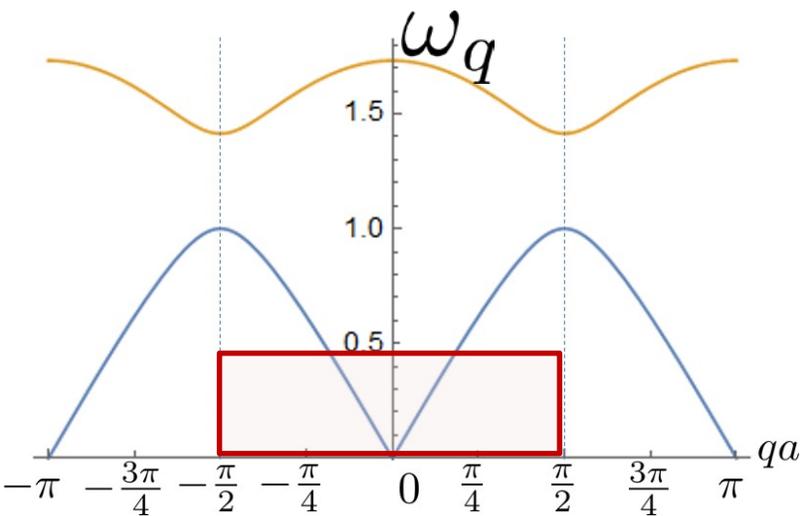


2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$

$$\beta \hbar \omega_q \gg 1$$

$$c_V = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} U = \frac{1}{V} \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q}) \frac{\partial}{\partial T} \bar{n}_{\mathbf{q}}$$



acoustiques

$$\bar{n}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})} - 1}$$



2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

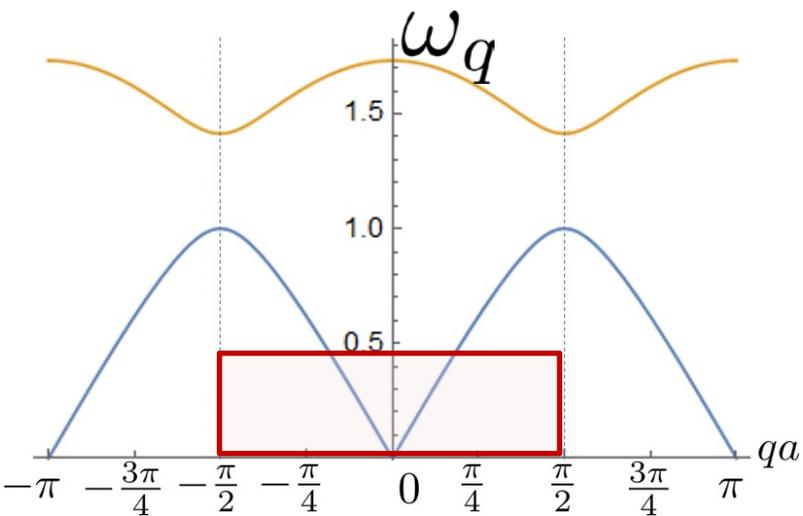
$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$
$$\beta \hbar \omega_q \gg 1$$

$$c_V = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} U = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q}) \bar{n}_{\mathbf{q}}$$

Très dense si cristal macroscopique

acoustiques

$$\bar{n}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})} - 1}$$





2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$

$$\beta \hbar \omega_q \gg 1$$

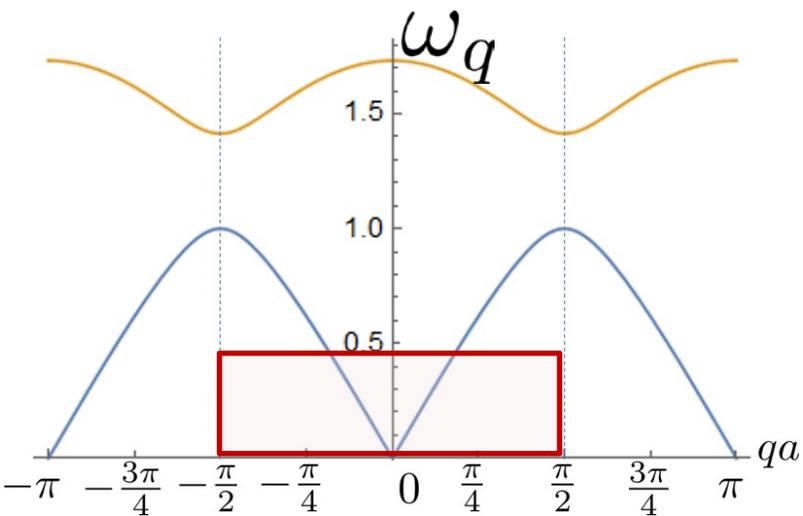
$$c_V = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} U = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\alpha, \mathbf{q}} \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q}) \bar{n}_{\mathbf{q}}$$

Très dense si cristal macroscopique

acoustiques

$$q = n \frac{2\pi}{L} \quad n \in \mathbb{Z}$$

$$g(\mathbf{q}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$$

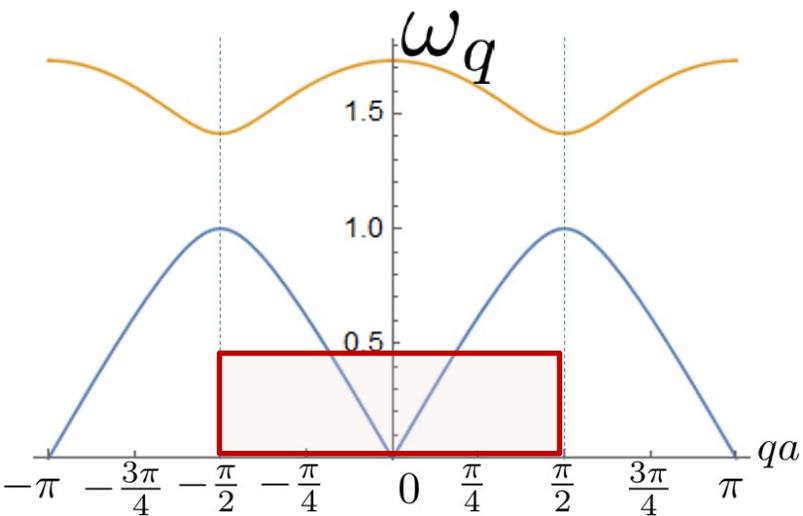




2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$

$$c_V \approx \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\alpha} \int \frac{\hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})}{e^{\beta \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})} - 1} \frac{V}{(2\pi)^3} d\Omega_q q^2 dq$$



acoustiques

$$q = n \frac{2\pi}{L} \quad n \in \mathbb{Z}$$

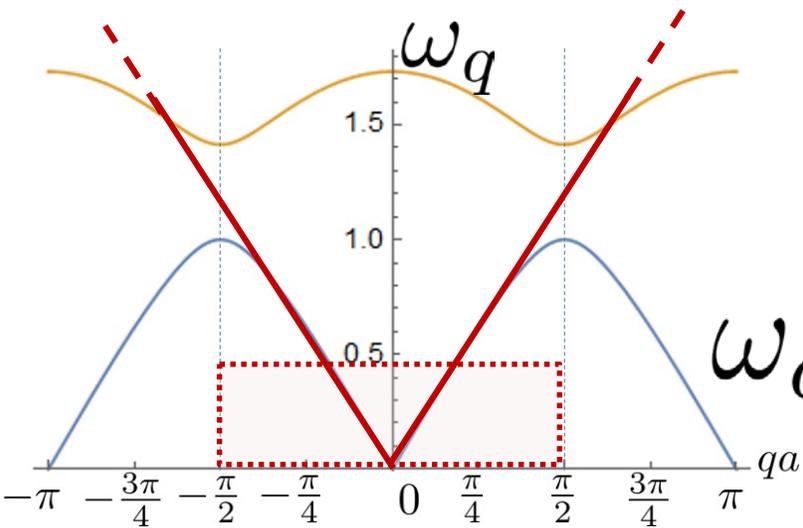
$$g(\mathbf{q}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$$



2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$

$$c_V \approx \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\alpha} \int \frac{\hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})}{e^{\beta \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})} - 1} d\Omega_q q^2 dq$$



acoustiques

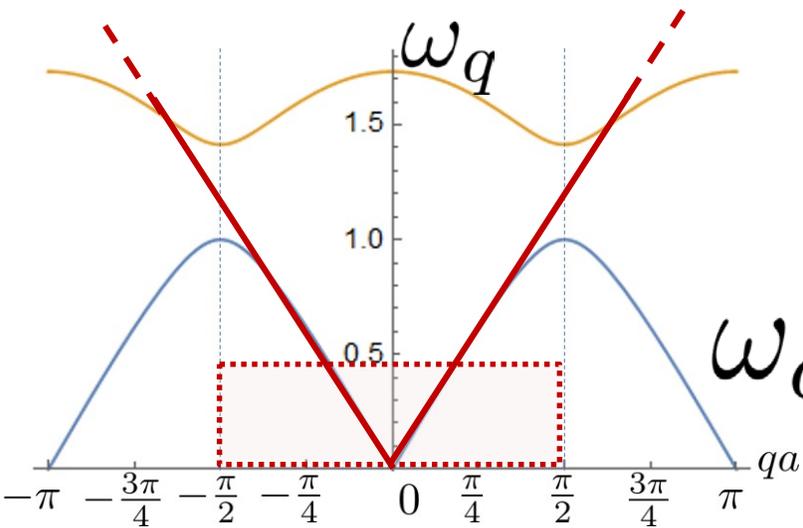
$$\omega_{\alpha}(\mathbf{q}) \approx c_{\alpha}(\hat{\mathbf{q}}) q$$



2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$

$$c_V \approx \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\alpha} \int \frac{\hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})}{e^{\beta \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})} - 1} d\Omega_q q^2 dq$$



acoustiques

$$y = \beta \hbar c_{\alpha}(\hat{\mathbf{q}}) q$$

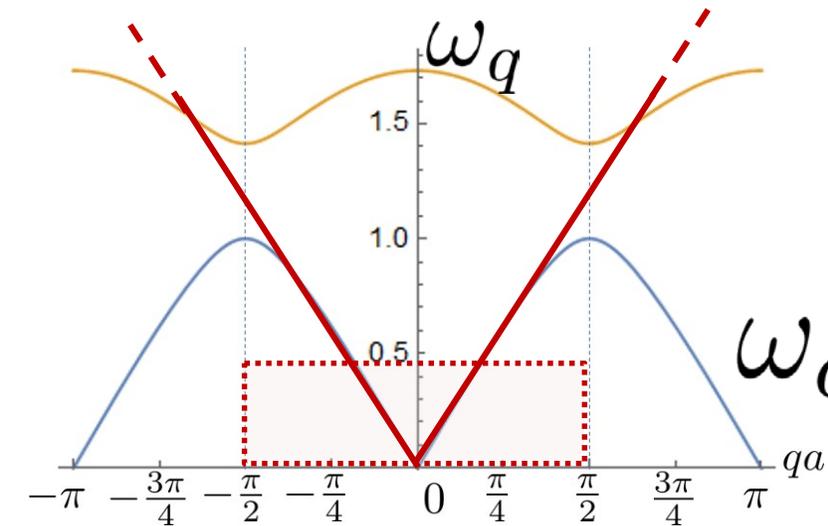
$$\omega_{\alpha}(\mathbf{q}) \approx c_{\alpha}(\hat{\mathbf{q}}) q$$



2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$

$$c_V \approx \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\alpha} \int \frac{y/\beta}{e^y - 1} \frac{d\Omega_q q^2 dq}{(\beta \hbar c_{\alpha}(\hat{\mathbf{q}}))^3}$$



acoustiques

$$\omega_{\alpha}(\mathbf{q}) \approx c_{\alpha}(\hat{\mathbf{q}})q$$

$$y = \beta \hbar c_{\alpha}(\hat{\mathbf{q}})q$$



2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

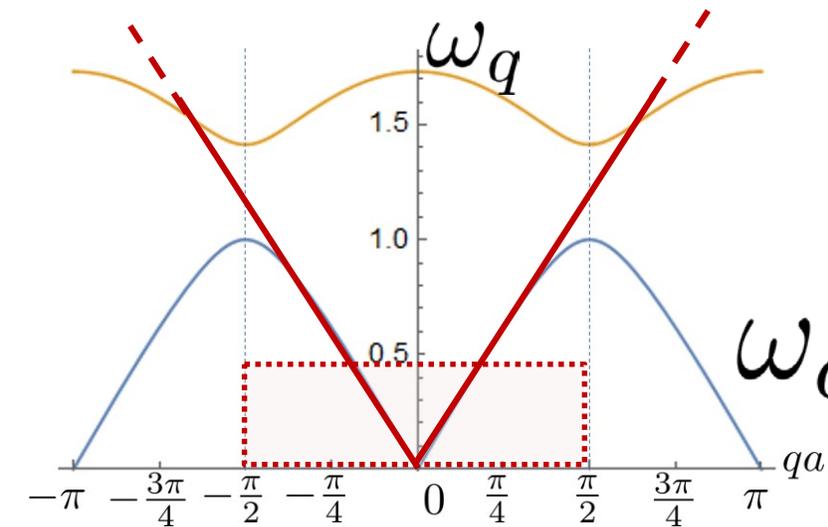
$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$

$$c_V \approx \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\partial}{\partial T} \frac{(k_B T)^4}{\hbar^3} \sum_{\alpha} \int \frac{d\Omega_q}{c_{\alpha}^3(\hat{q})} \underbrace{\int \frac{y^3}{e^y - 1} dy}_{\frac{\pi^4}{15}}$$



acoustiques

$$\omega_{\alpha}(\mathbf{q}) \approx c_{\alpha}(\hat{\mathbf{q}})q$$

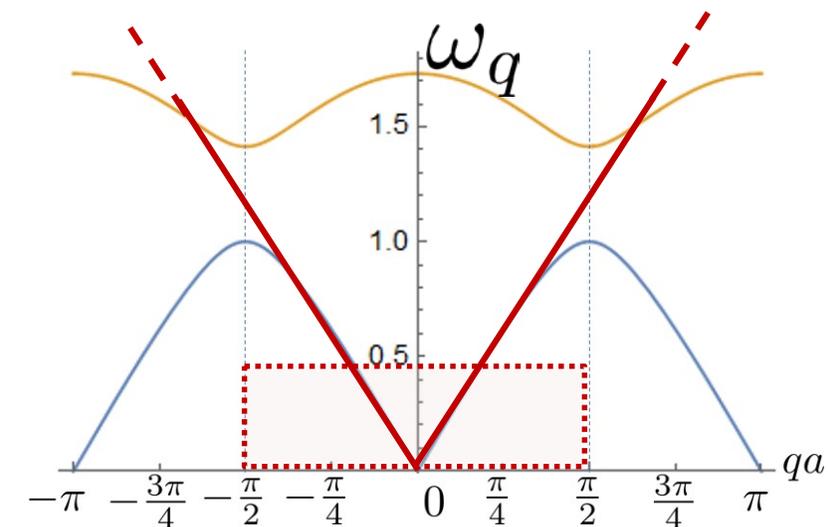




2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$

$$c_V \approx \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\pi^4}{15} \frac{\partial}{\partial T} \frac{(k_B T)^4}{\hbar^3} \sum_{\alpha} \int \frac{d\Omega_q}{c_{\alpha}^3(\hat{\mathbf{q}})}$$



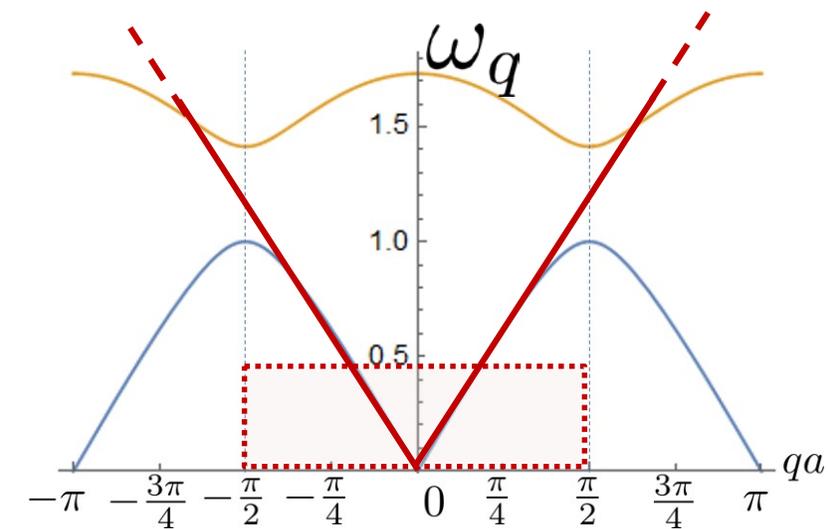
$$\frac{1}{\bar{c}^3} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} \int \frac{d\Omega_q}{4\pi} \frac{1}{c_{\alpha}^3(\hat{\mathbf{q}})}$$



2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$

$$c_V \approx \frac{12\pi}{(2\pi)^3} \frac{\pi^4}{15} \frac{\partial}{\partial T} \frac{(k_B T)^4}{\hbar^3} \frac{1}{\bar{c}^3}$$

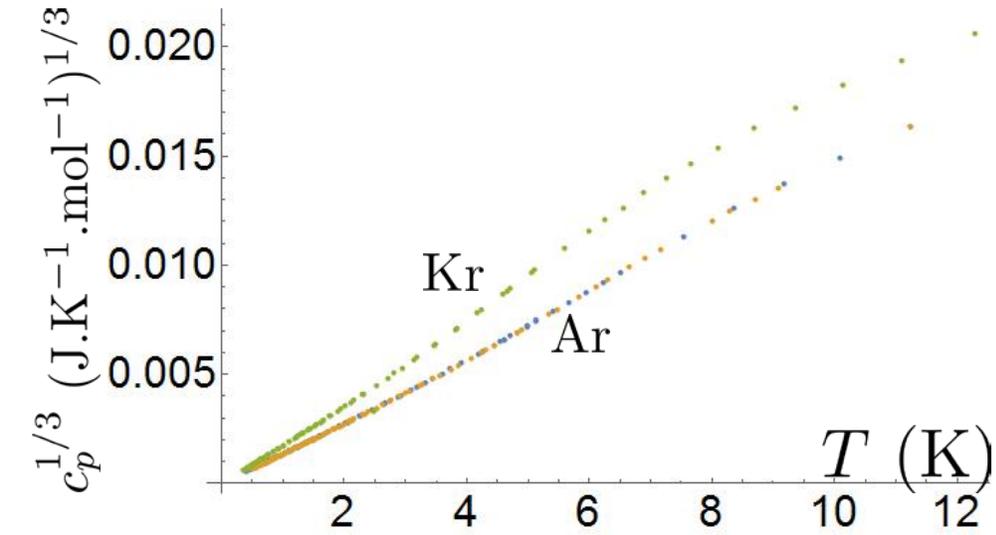


$$\frac{1}{\bar{c}^3} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} \int \frac{d\Omega_q}{4\pi} \frac{1}{c_{\alpha}^3(\hat{\mathbf{q}})}$$

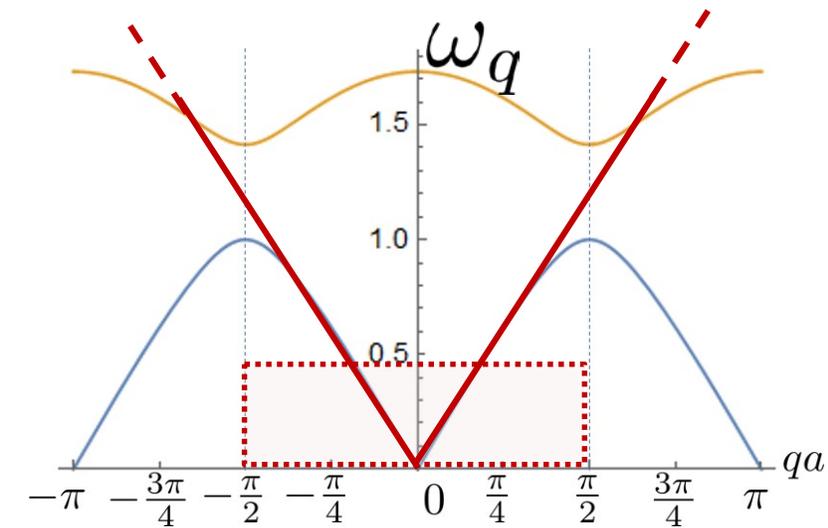


2.1 Chaleur spécifique du réseau à basse température

$$k_B T \ll \hbar \omega_q$$



$$c_V \approx \frac{2\pi^2}{5} k_B \left(\frac{k_B T}{\hbar \bar{c}} \right)^3$$



$$\frac{1}{\bar{c}^3} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha} \int \frac{d\Omega_q}{4\pi} \frac{1}{c_{\alpha}^3(\hat{\mathbf{q}})}$$



Dynamique du réseau 2

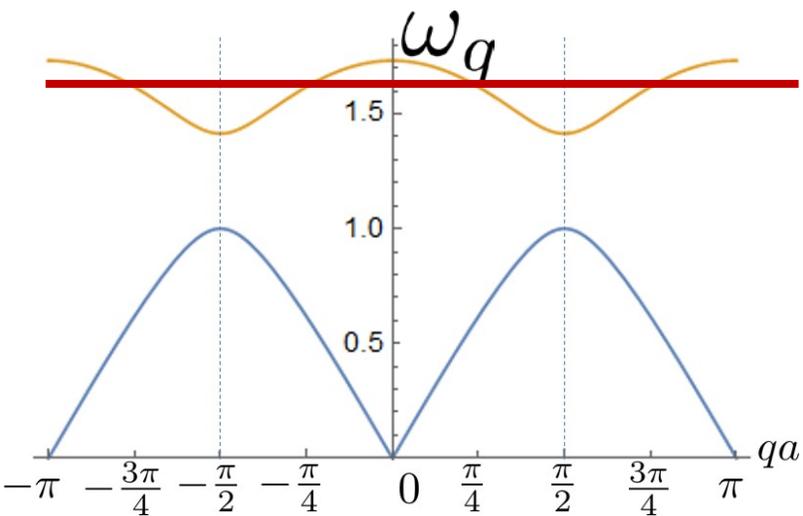
(Phonons et chaleur spécifique)

1. Energie interne et phonons
- 2. Chaleur spécifique**
 1. A haute température
 2. A basse température
- 3. Modèles d'interpolation**
 1. Modèle d'Einstein
 2. Modèle de Debye



3. Modèles d'interpolation

$$c_V \approx \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\alpha} \int \frac{\hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})}{e^{\beta \hbar \omega_{\alpha}(\mathbf{q})} - 1} \frac{V}{(2\pi)^3} d\Omega_{\mathbf{q}} q^2 dq$$

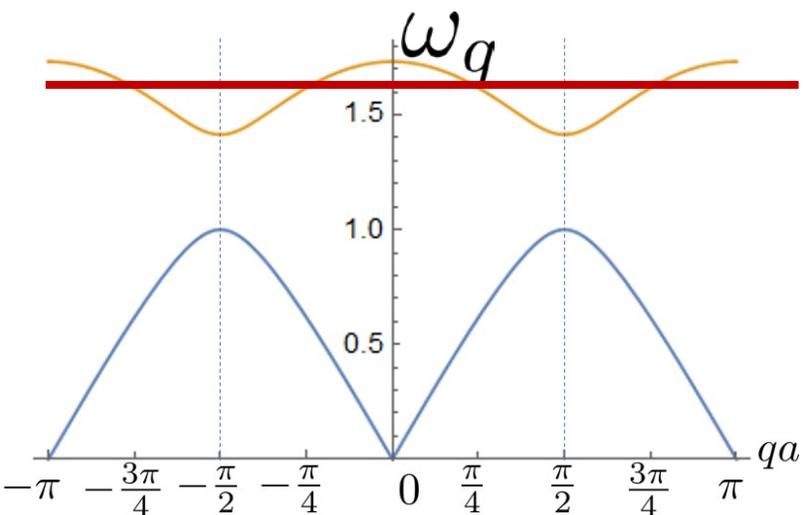


Einstein $\omega(q) \approx \omega_E$ $g(\omega) = \omega_E \delta(\omega - \omega_E)$
Pour chaque branche



3. Modèles d'interpolation

$$c_V \approx \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\alpha} \frac{\hbar \omega_E}{e^{\beta \hbar \omega_E} - 1} \int_{Z.B} \frac{V}{(2\pi)^3} d\Omega_q q^2 dq$$



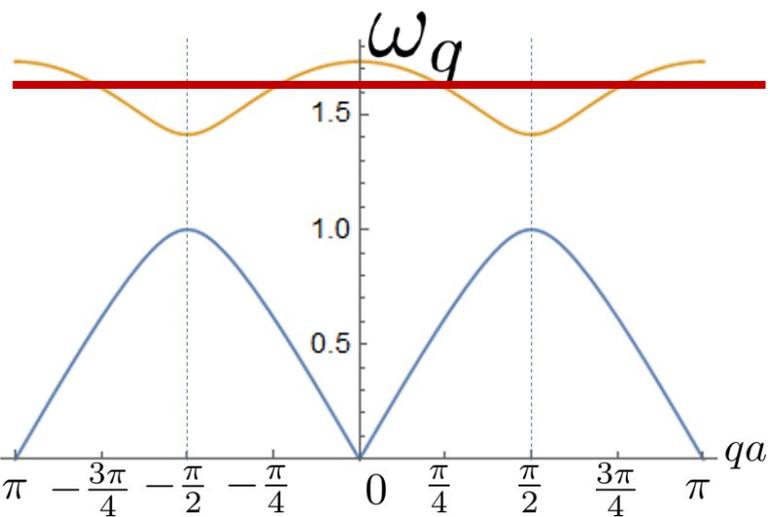
Einstein $\omega(q) \approx \omega_E$ $g(\omega) = \omega_E \delta(\omega - \omega_E)$
Pour chaque branche



3. Modèles d'interpolation

$$C_V \approx \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial T} \sum_{\alpha} \frac{\hbar \omega_E}{e^{\beta \hbar \omega_E} - 1} \quad k_B \Theta_E = \hbar \omega_E$$

$$C_V \approx \frac{k_B}{v} \sum_{\alpha} \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\Theta_E/T}}{(e^{\Theta_E/T} - 1)^2}$$



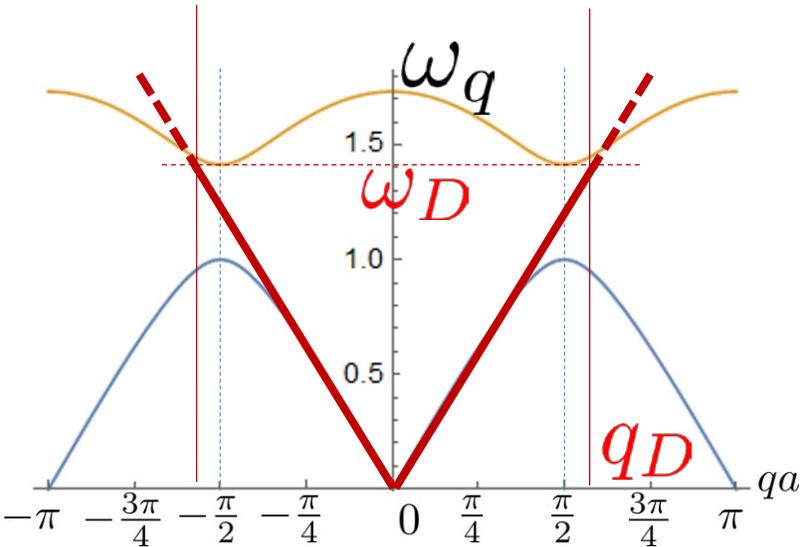
Einstein $\omega(q) \approx \omega_E$ $g(\omega) = \omega_E \delta(\omega - \omega_E)$

Pour chaque branche



3. Modèles d'interpolation

$$g(\mathbf{q}) \frac{4}{3} \pi q_D^3 = N \quad \rightarrow \quad q_D = \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$



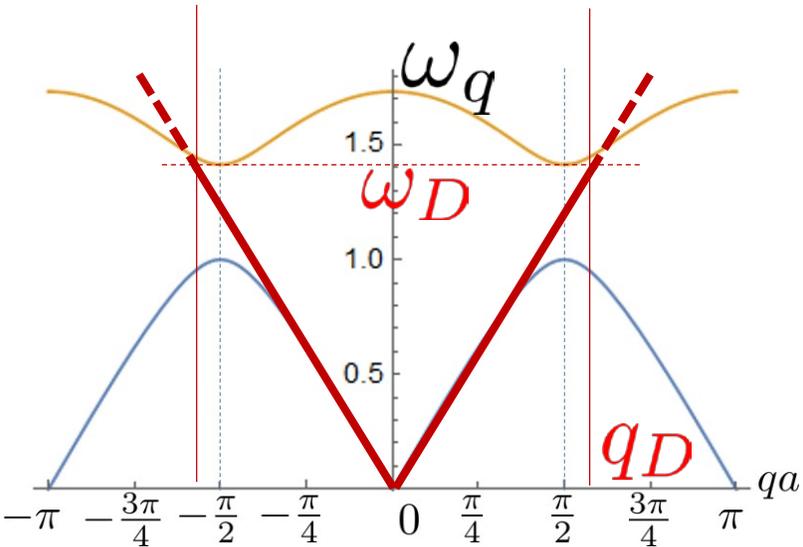
Debye

$$\omega(q) \approx c_D q$$

$$g(\mathbf{q}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$$



3. Modèles d'interpolation



Debye

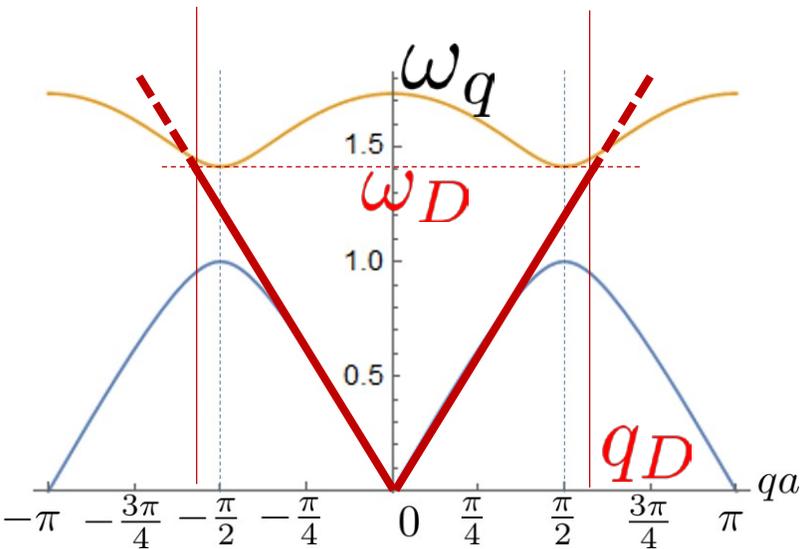
$$\omega(q) \approx c_D q$$

$$q_D = \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$



3. Modèles d'interpolation

$$c_V \approx \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{\partial}{\partial T} 3 \int_0^{q_D} \frac{\hbar c_D q}{e^{\beta \hbar c_D q} - 1} q^2 dq$$



Debye

$$\omega(q) \approx c_D q$$

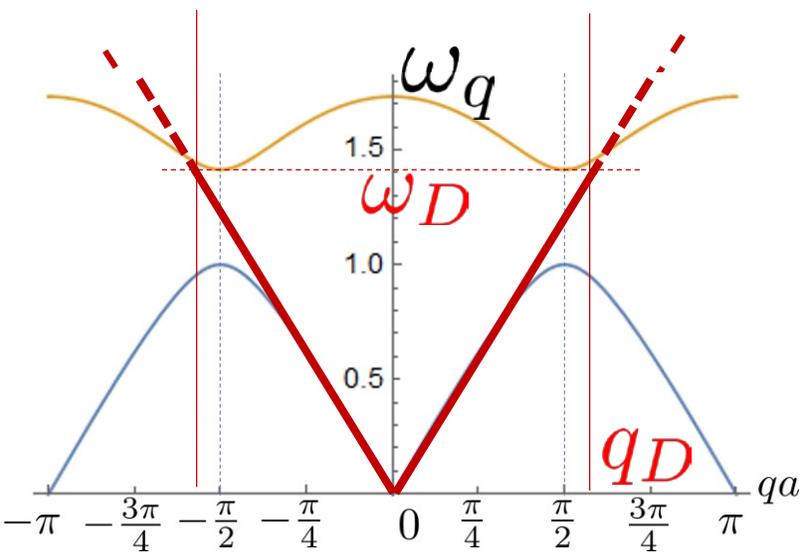
$$q_D = \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$



3. Modèles d'interpolation

$$k_B \Theta_D \approx \hbar c_D q_D$$

$$c_V \approx \frac{3}{2\pi^2} T^3 k_B \left(\frac{k_B}{\hbar c} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{y^4 e^y}{(e^y - 1)^2} dy$$



Debye

$$\omega(q) \approx c_D q$$

$$q_D = \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3}$$