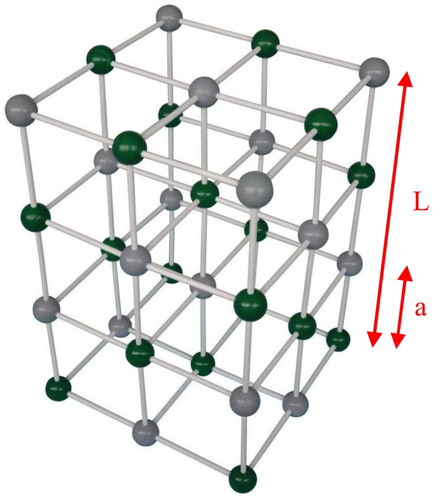
Exercice 6.7: Phonons

Vibrations cristallines:

phonons

Exercice 6.7: Réseau cristallin



Volume: L^3

Nombre d'atomes: $N = \left(\frac{L}{a}\right)^3$

Vecteur K maximal: $K_{\max} = \pm\frac{2\pi}{\lambda} = \pm\frac{\pi}{a}$

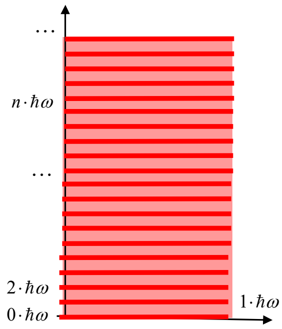
Vitesse acoustique: v_a

Energie du phonon $E_a = v_a \cdot \hbar K$

PAB

Energie moyenne par degré de liberté

Répartition régulière
Quasi-continuum



$$E = \hbar\omega = v_a \cdot \hbar K \ll kT$$

Bosons
sans masse

Energie moyenne: $$\langle \mathrm{E} \rangle = \frac{\int_0^\infty E \cdot e^{-\frac{E}{kT}} dE}{\int_0^\infty e^{-\frac{E}{kT}} dE} = kT$$

Nombre de phonons moyens par degré de liberté:

$$\langle n_{ph} \rangle = \frac{\langle E \rangle}{\hbar\omega} = \frac{kT}{\hbar\omega}$$

Variance de l'énergie moyenne:

$$\langle \Delta \mathrm{E}^2 \rangle \equiv \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\int_0^\infty E^2 \cdot e^{-\frac{E}{kT}} dE}{\int_0^\infty e^{-\frac{E}{kT}} dE} - (kT)^2 = (kT)^2$$

Pierre-André Besse p.36 2025

Quasi-continuum:

$$v_a \cdot \hbar K_{\max} = v_a \cdot \frac{h}{2a} \ll kT_{\min}$$

Autres relations à utiliser:

$$\int_0^\infty e^{-\frac{E}{kT}} dE = kT$$

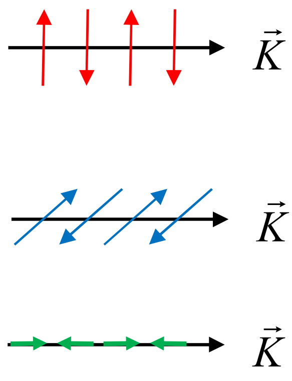
$$\int_0^\infty E \cdot e^{-\frac{E}{kT}} dE = (kT)^2$$

$$\int_0^\infty E^2 \cdot e^{-\frac{E}{kT}} dE = 2 \cdot (kT)^3$$

PAB

Phonons

<u>Trois polarisations possibles</u>



$\Rightarrow$ 3N degrés de liberté

Energie moyenne totale:

$$\langle Q_{th} \rangle = 3N \cdot \langle E \rangle = 3N \cdot kT$$

Capacité thermique par volume:

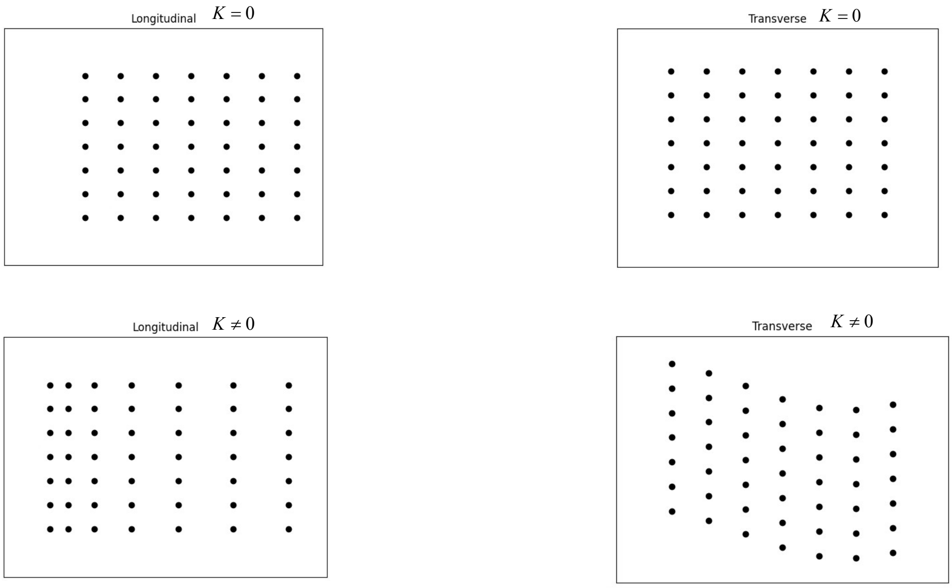
$$c_{th} \equiv \frac{1}{Vol} \cdot \frac{\partial \langle Q_{th} \rangle}{\partial T} = 3 \frac{N}{L^3} k = \frac{3}{a^3} \cdot k$$

$$C_{th} \equiv \frac{d\langle Q_{th} \rangle}{dT} = 3N \cdot \left[\frac{\frac{d}{dT} \sum_i E_i \cdot e^{-E_i/kT}}{\sum_i e^{-E_i/kT}} - \frac{\sum_i E_i \cdot e^{-E_i/kT}}{\left(\sum_i e^{-E_i/kT} \right)^2} \frac{d}{dT} \sum_i e^{-E_i/kT} \right]$$

$$= 3N \cdot \left| \frac{1}{kT^2} \frac{\sum_i E_i^2 \cdot e^{-E_i/kT}}{\sum_i e^{-E_i/kT}} - \frac{1}{kT^2} \left(\frac{\sum_i E_i \cdot e^{-E_i/kT}}{\sum_i e^{-E_i/kT}} \right)^2 \right|$$

$$= \frac{3N}{kT^2} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) = \frac{1}{kT^2} 3N \cdot \langle \Delta E^2 \rangle = 3N \cdot k$$

Phonons: ondes longitudinales et transversales



Lien capacité thermique ←→ conductivité thermique

1D

Conductivité thermique g_{th}: $$\frac{1}{S}\cdot\frac{\partial\langle Q_{th}\rangle}{\partial t}\equiv g_{th}\cdot\frac{\partial T}{\partial x}$$

$$\Rightarrow \quad g_{th}=\frac{1}{S}\cdot\frac{\partial\langle Q_{th}\rangle}{\partial t}\cdot\frac{\partial x}{\partial T}=\left(\frac{1}{Vol}\frac{\partial\langle Q_{th}\rangle}{\partial T}\right)\cdot\frac{L}{\tau}\cdot\tau\cdot\frac{\partial x}{\partial t}=c_{th}\cdot v\cdot\tau\cdot v=\langle v^2\rangle\cdot\tau\cdot c_{th}$$

3D

$$\boxed{g_{th}=\frac{1}{3}\langle v^2\rangle\cdot\tau\cdot c_{th}}$$

τ = temps entre collisions

Phonons dans le cristal:

$$\boxed{g_{th}=\frac{1}{a^3}\cdot v_a^2\cdot\tau\cdot k}$$