



***Filière : SMP -- Semestre : VI***

***Module : Physique des Matériaux II***

***Chapitre3 : Vibration des Phonons***

***Pr Khechoubi El Mostafa***

***khechoubi@umi.ac.ma***

***Année universitaire 2023/2024***



## ***INTRODUCTION***

***Chapitre1 : Rappel Théorie des bandes – Propriétés des Semi-conducteur***

***Chapitre2 : Application – Physique des Semi-conducteurs***

***Chapitre3 : Vibration des Phonons***

***Chapitre4 : Défauts dans les cristaux***

***Chapitre5 : Propriétés optiques des matériaux***

***Chapitre6 : Propriétés électriques, magnétiques, supraconductivité***

Les 2 grands types de phénomènes étudiés en physique des Matériaux sont :

Etude des propriétés des électrons

Du modèle classique (Drude) jusqu'à la théorie des bandes



Compréhension de tous les phénomènes électriques (Conducteurs  
Semi-conducteur intrinsèque ou dopé ...)

Etude des vibrations du réseau (Phonons)

Ondes de vibration



Compréhension des phénomènes de transport de chaleur

## Vibrations du réseau

Jusqu'à maintenant, nous avons considéré que les atomes étaient fixes dans le cristal

Dans ce qui suit, nous devons inclure le déplacement des atomes, autour de leurs positions d'équilibre, dans le cristal



Notion de vibration du réseau

Les vibrations des atomes sont liées aux propriétés thermiques des cristaux



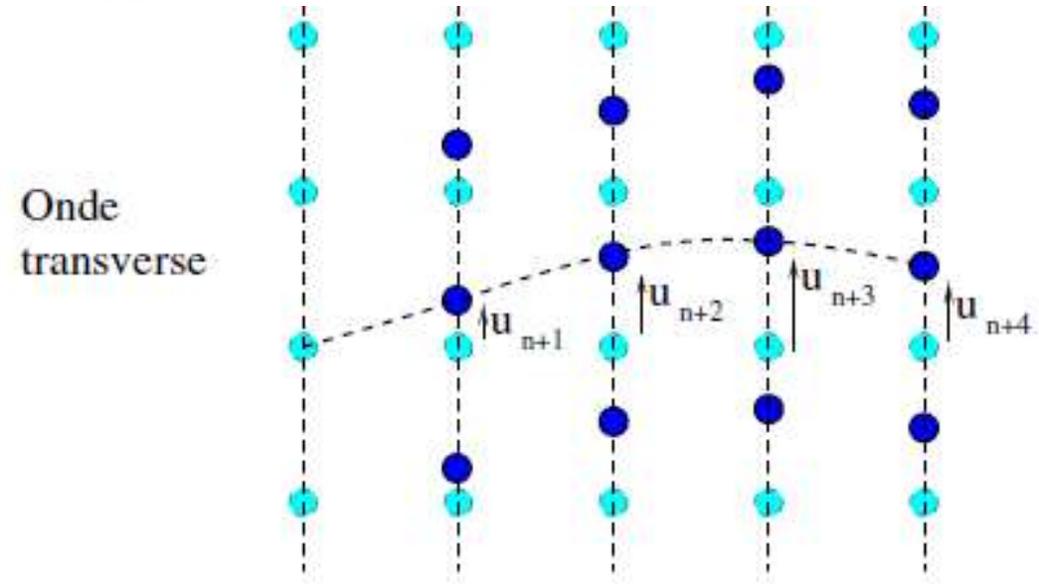
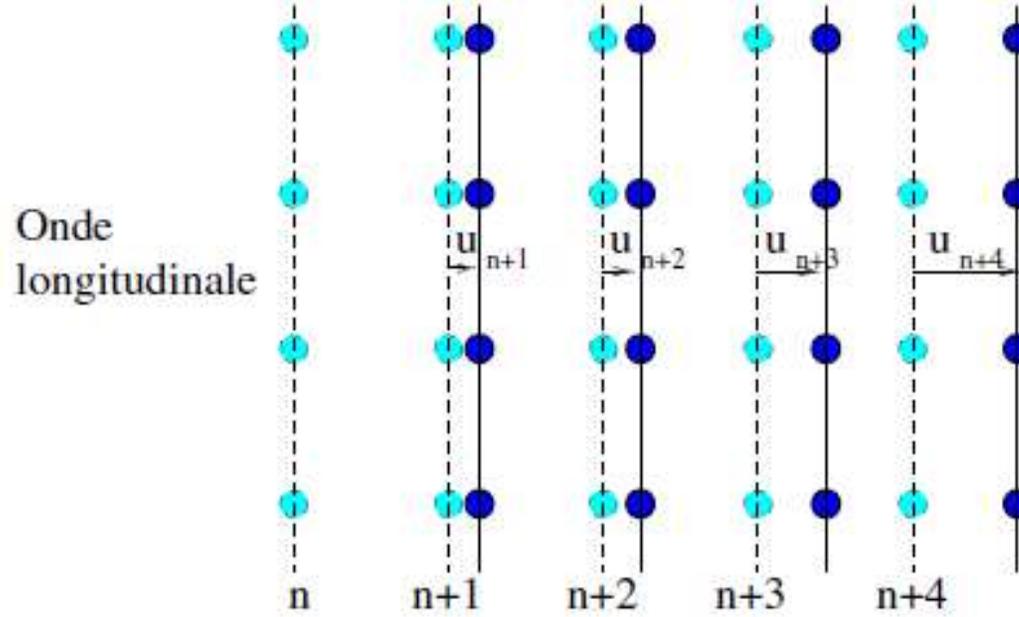
Une onde est une perturbation locale des propriétés du milieu qui se propage et qui transporte de l'énergie mais sans transport de matière

Les atomes ne se propagent pas, seule la vibration se propage.

En mécanique quantique les corpuscules (matériels ou non) sont décrits par une onde (la fonction d'onde).

Cette fonction d'onde sert à décrire les propriétés de la particule.

**Les phonons correspondent à une vibration des atomes du cristal par rapport à leurs positions d'équilibre.**



On considère les vibrations des atomes d'un cristal monoatomique selon une direction privilégiée ([100], [110]...)

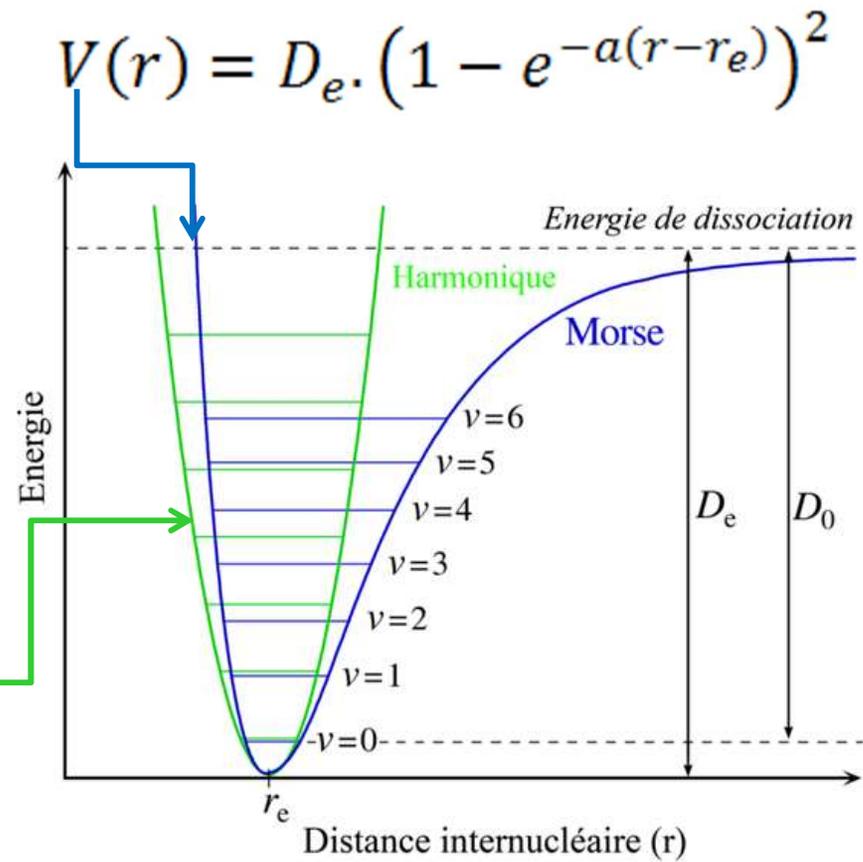
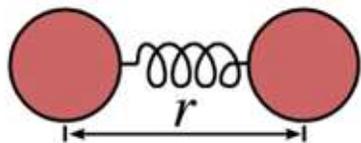


On décrit les vibrations classiquement par la résolution de l'équation de la dynamique

Le potentiel de Morse est un modèle d'interaction pour une molécule constituée de deux atomes :

$$V(r) = D_e \cdot (1 - e^{-a(r-r_e)})^2$$

Autour de la position d'équilibre



Les interactions atomiques peuvent être approximées par un potentiel harmonique :

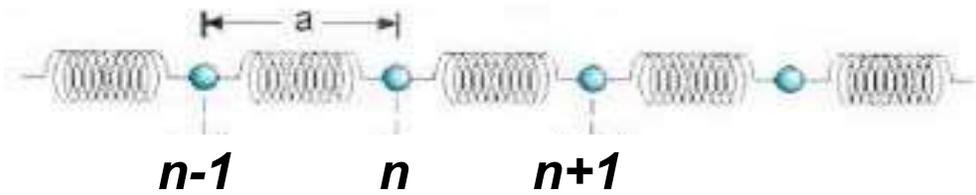
$$V(r) = \frac{\gamma}{2}(r - r_e)^2$$

$\gamma$  : est la constante de force de rappel

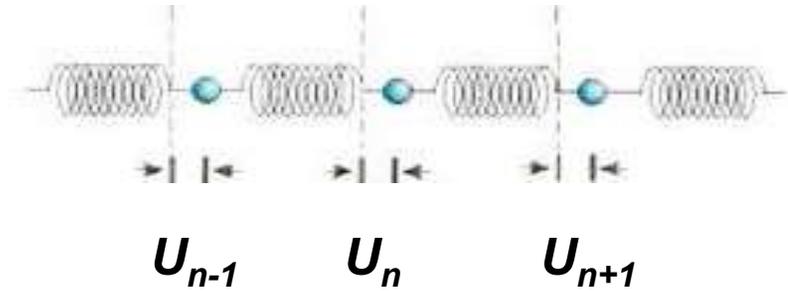
$r_e$  : distance à l'équilibre

## Chaîne monoatomique

Positions d'équilibres



Déplacements des atomes par rapport aux positions d'équilibres



Autour de la position d'équilibre, on peut considérer le potentiel harmonique

$$V(r) = \frac{\gamma}{2} (r - r_e)^2$$

L'atome (n) est repéré par :

$$x_n = n \cdot a + u_n$$

L'énergie potentielle sur le plan « n » est alors donnée par la relation :

$$V_n = \frac{1}{2} \sum_p \gamma_p (u_n - u_p)^2$$

On ne s'intéressera qu'aux interactions entre premiers voisins

$$V_n = \frac{1}{2} \gamma [(u_n - u_{n-1})^2 + (u_n - u_{n+1})^2]$$

On appelle  $F_n$  la force s'exerçant sur l'atome (n) par ses voisins

La force dérivant du potentiel :  $F_n = -\frac{dV_n}{du_n}$

$$F_n = -\gamma(u_n - u_{n-1}) - \gamma(u_n - u_{n+1})$$

$$F_n = \gamma(u_{n-1} + u_{n+1}) - 2\gamma u_n$$

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

Nous cherchons des solutions harmoniques de la forme

$$u_n(t) = U_n e^{i\omega t}$$

Nous appliquons à la fonction  $U_n$  le théorème de Bloch

$$U_n = U_{n-1} e^{ika} = U_0 e^{in ka}$$

$$U_{n-1} = U_0 e^{i(n-1)ka}$$

$$U_{n+1} = U_0 e^{i(n+1)ka}$$

$$-M\omega^2 U_n e^{i\omega t} = [\gamma(U_{n-1} + U_{n+1}) - 2\gamma U_n] e^{i\omega t}$$

$$-M\omega^2 U_0 e^{ink a} = \gamma[U_0 e^{i(n-1)ka} + U_0 e^{i(n+1)ka} - 2U_0 e^{inka}]$$

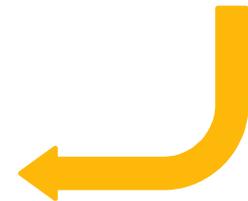
$$-M\omega^2 = \gamma[e^{-ika} + e^{ika} - 2]$$

$$M\omega^2 = 2\gamma[1 - \cos(ka)]$$

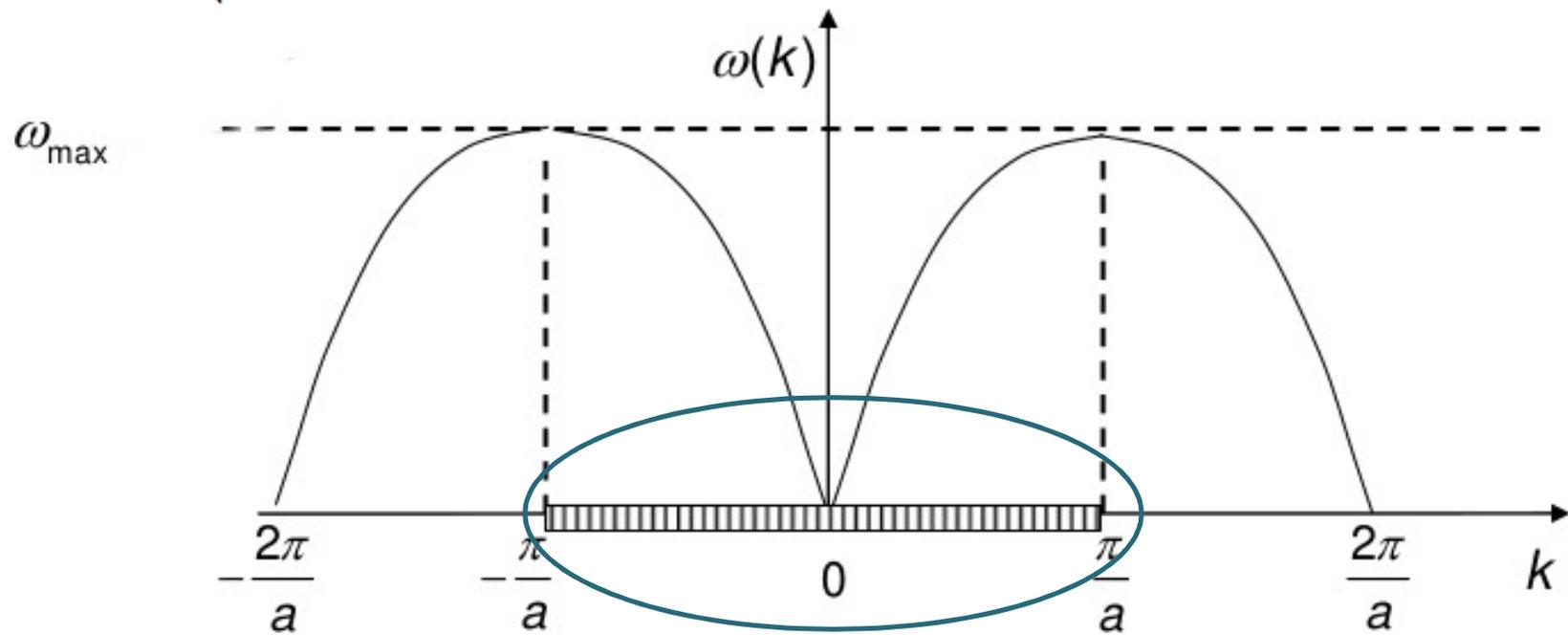
$$\omega^2 = \frac{4\gamma}{M} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

Relation de dispersion



$$\omega_{max} = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}}$$



On peut se limiter à la 1<sup>ère</sup> zone de Brillouin

## Vitesse du son dans le cristal

On définit la vitesse du son ( $V_s$ ) par la relation :  $\omega = k \cdot V_s$

On travaille dans les conditions telles que :  $ka \ll 1$

$$\sin\left(\frac{ka}{2}\right) \approx \frac{ka}{2} \qquad \omega \approx \frac{ka}{2} \sqrt{\frac{4\gamma}{M}} = ka \sqrt{\frac{\gamma}{M}}$$

La vitesse du son est alors donnée par la relation :  $v_s = a \sqrt{\frac{\gamma}{M}}$

## Vitesse de groupe

La vitesse de groupe représente la vitesse du centre du paquet d'ondes

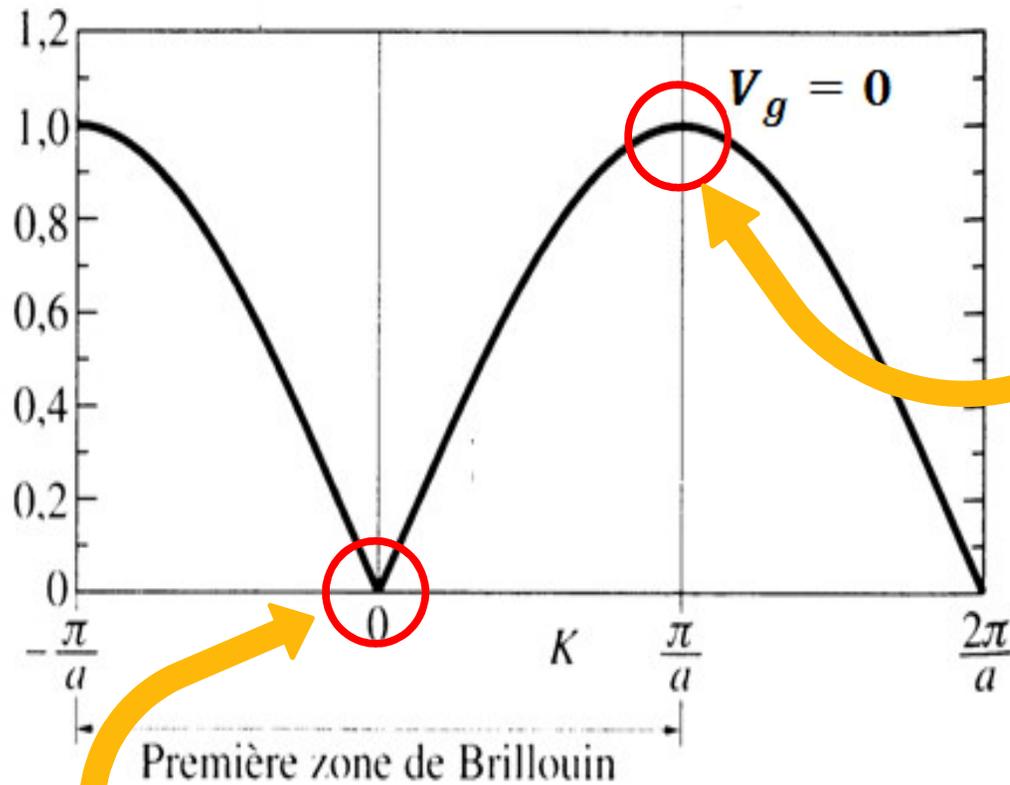
Elle est définie par la relation  $V_g = \frac{d\omega}{dk}$

***La vitesse de groupe est la vitesse de transmission de l'énergie dans le milieu***

$$\omega = \sqrt{\frac{4\gamma}{M}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

$$v_g = \sqrt{\frac{\gamma a^2}{M}} \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \sqrt{\frac{\gamma}{M}} a \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$$



Un autre exemple de la réflexion de Bragg !!!

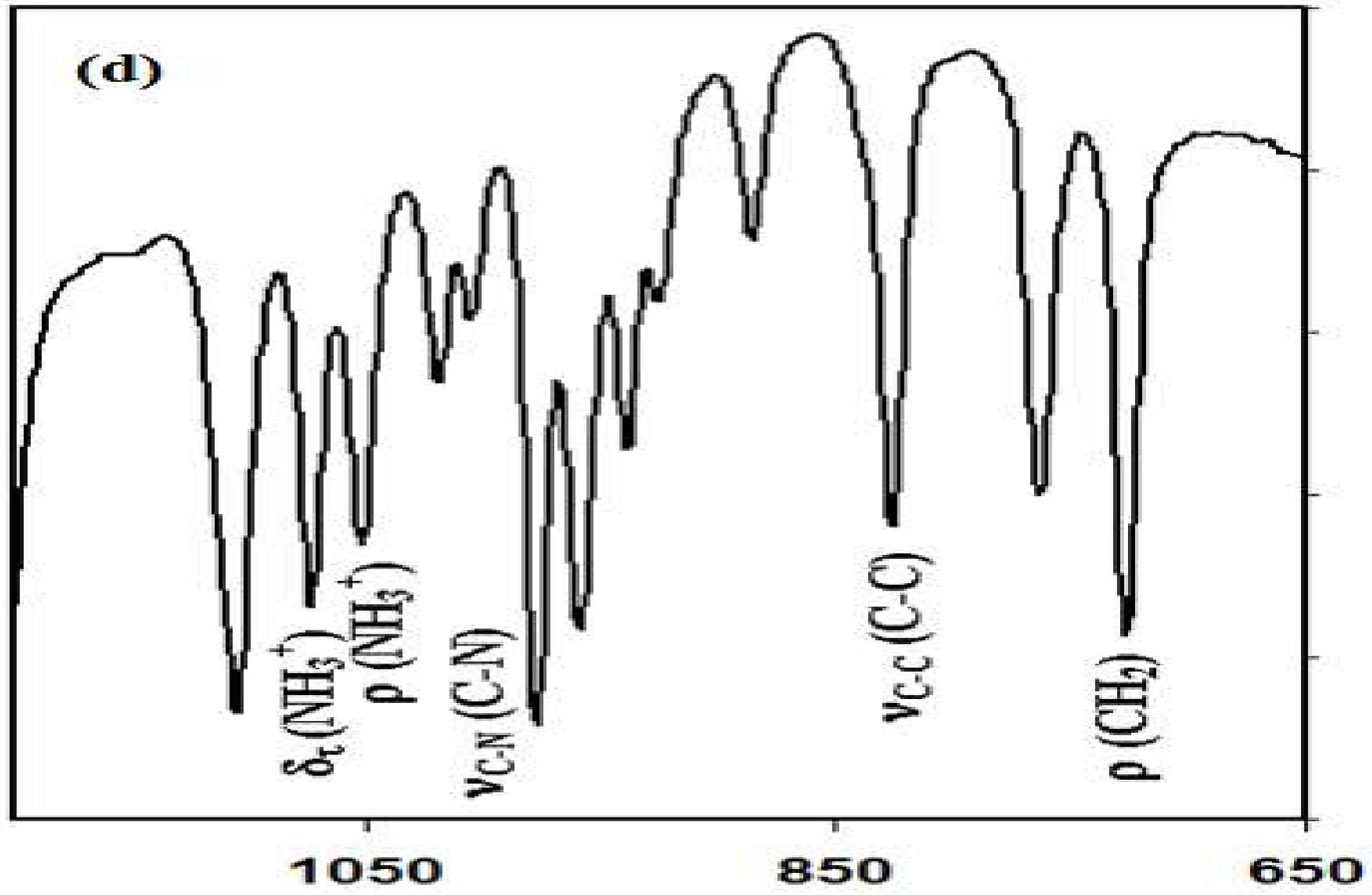
Toute onde (vibration ou autres) est diffractée à la FZB

Il en résulte une onde stationnaire avec une vitesse de groupe nulle

$$v_g = \sqrt{\frac{\gamma a^2}{M}}$$

$$v_s = a \sqrt{\frac{\gamma}{M}}$$

$$v_g = v_s$$



## Chaleur spécifiques des solides

Le traitement quantique du réseau d'oscillateurs harmoniques couplés que constitue le réseau cristallin permet de calculer l'énergie associée aux modes de vibration

Lorsqu'un mode de vibration du cristal de fréquence  $\nu$  gagne ou cède de l'énergie, il ne peut le faire que par paquets d'énergie :  $h\nu$

Ce paquet est considéré comme une quasi-particule, c'est à-dire une particule fictive « appelée phonon ». Les phonons sont décrits comme des bosons, ils obéissent à la statistique de Bose-Einstein.

La fonction d'occupation d'un niveau d'énergie  $h\nu$  est donnée par la relation

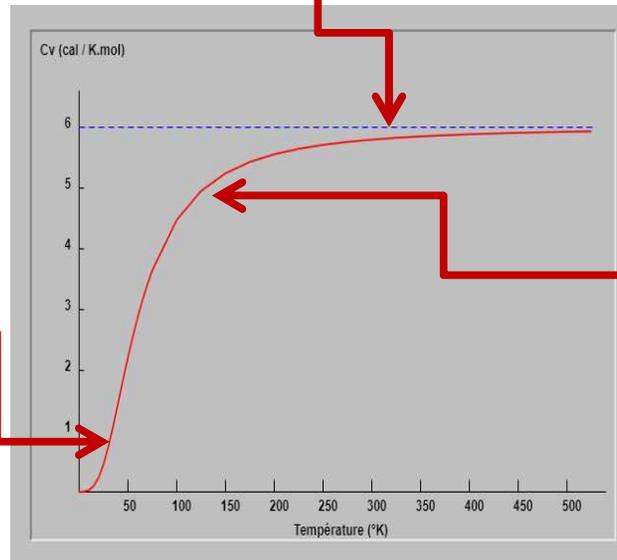
$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

## Propriétés thermiques en relation avec les phonons

Au début du **XX<sup>ème</sup>** siècle les études sur les vibrations du réseau cristallin, à basses températures, ont permis le développement de deux modèles

**À haute température cependant, les deux modèles concordent avec la loi de Dulong et Petit**

**Modèle de Debye  
1912**



**Modèle d'Einstein  
1907**

Chaque atome du réseau cristallin se comporte comme un oscillateur harmonique quantique 3d  
Les atomes vibrent tous à la même fréquence

Chaque atome du réseau cristallin se comporte comme un oscillateur harmonique quantique 3d

Les atomes vibrent tous à la même fréquence

## Modèle d'Einstein

Dans un solide, les interactions entre particules ne sont jamais négligeables. Le modèle d'Einstein suppose néanmoins que chacun des atomes ou ions du cristal vibre autour de sa position d'équilibre indépendamment des autres

Le principal intérêt du modèle d'Einstein réside dans sa très grande simplicité mais, de façon plus précise, la possibilité de ramener l'étude d'un solide à celle d'un système de particules indépendantes

Les N atomes ou ions du cristal, bien qu'identiques, sont discernables puisqu'ils occupent des sites différents ; dans ce modèle, on les considère comme indépendants ; la fonction de partition Z du système est donc de la forme :  $Z = z^N$

z est le fonction de partition d'un atome

$$\varepsilon_{n_x, n_y, n_z} = -u_0 + \left[ \left( n_x + \frac{1}{2} \right) + \left( n_y + \frac{1}{2} \right) + \left( n_z + \frac{1}{2} \right) \right] \hbar \omega_E$$
$$z = \sum_{n_x, n_y, n_z=0}^{\infty} \exp \beta [u_0 - (n_x + n_y + n_z) \hbar \omega_E] \quad z = e^{\beta u_0} \left( \frac{1}{2 \operatorname{sh}(\beta \hbar \omega_E / 2)} \right)^3$$
$$Z = z^N = e^{N \beta u_0} \left( \frac{1}{2 \operatorname{sh}(\beta \hbar \omega_E / 2)} \right)^{3N}$$

## L'énergie moyenne du système

$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln z$$

$$\bar{E} = -Nu_0 + \frac{3}{2} N \hbar \omega_E \coth(\beta \hbar \omega_E / 2)$$

## La capacité calorifique

$$C_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = 3Nk_B \left( \frac{\hbar \omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}}}{\left( e^{\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}} - 1 \right)^2} = 3Nk_B \left( \frac{\hbar \omega_E}{2k_B T} \right)^2 \frac{1}{\text{sh}^2 \left( \frac{\hbar \omega_E}{2k_B T} \right)}$$

A haute température :  $C_V = 3Nk_B$

**Conforme à la loi empirique de Dulong et Petit**

## Modèle de Debye

L'étude des  $N$  atomes constituant un cristal 3d se ramène à celle d'un système de  $3N$  oscillateurs harmoniques indépendants

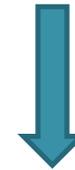
### Approximation de Debye

Les atomes ne vibrent pas tous à la même fréquence

Il n'y a pas un seul mode de vibration



On parle de modes normaux de vibration



Il y a un spectre continu de pulsations  $\omega$

On introduit une densité de modes  $\rho(\omega)$  telle que

$$\rho(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

On considère les modes acoustiques en prenant comme relation de dispersion

$$\omega = k \cdot c$$

où  $c$  est la vitesse de groupe  
(approximation des grandes longueurs d'onde)

$$\rho(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{c^3}$$

De plus on considère **une fréquence limite**  $\omega_D$  de façon à retrouver le nombre correct de modes.

$$3N = \int_0^{\omega_D} \rho(\omega) d\omega$$

$$\omega_D = \left(18\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{1/3} c$$

On définit également la température de Debye :  $T_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$

## L'énergie moyenne du système

$$\bar{E} = -E_0 + \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \cdot \rho(\omega) \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega$$

$$\bar{E} = -E_0 + \frac{V}{2\pi^2 c^3} \int_0^{\omega_D} \hbar \omega^3 \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega$$

## La capacité calorifique

$$C_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{V}{2\pi^2 c^3} \int_0^{\omega_D} \hbar \omega^3 \cdot \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \right) d\omega$$

$$x = \frac{\hbar\omega}{k_B T} \quad C_v = \frac{V}{2\pi^2 c^3} k_B \left( \frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

Aux basses températures

$$T \ll T_D$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^4 e^x}{e^x - 1} dx = \frac{4\pi^4}{15}$$

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