PHY6505: Physique de la matière condensée

Cours 14
Phonons

François Schiettekatte
Université de Montréal
Automne 2009

Modes normaux

- Valeur propres de l'Hamiltonien considérant un potentiel harmonique: contribution d'un mode de fréquence $\omega_s(\vec{k})$ à l'énergie par

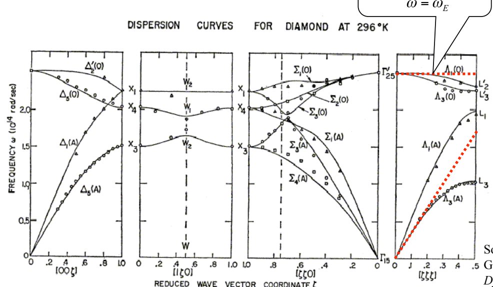
$$(n_{\vec{k},s}+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_s(\vec{k}), \quad s = \text{polarisation}$$

  - Analogie avec les photons: champ excité par $n_{\vec{k},s}$ quanta

relation de dispersion

approximation d'Einstein: $\omega = \omega_E$

approximation de Debye: on considère la partie linéaire $\frac{\omega}{k} = \text{v}$



$\zeta \sim |\vec{k}|/k_{max}$ dans une direction

FIG. 1. The dispersion relation for the normal modes of vibration of diamond in the principal symmetry directions at 296°K. The full curves represent a shell-model fit to the data points. Branches and end points are labeled by the irreducible representations according to which the associated polarization vectors transform.

Source: J. L. Warren and J. L. Yarnell, G. Dolling and R. A. Cowley, *Lattice Dynamics of Diamond*, Phys. Rev. **158** (1967) 805

Capacité calorifique

- Nombre moyen de phonons à $\omega_s(\vec{k})$: $\bar{n} = \dfrac{1}{e^{\beta\hbar\omega_s(\vec{k})}-1}$
- Énergie $U = \underbrace{U_{eq}}_{\text{cohésion}} + \underbrace{\sum_{k,s}\tfrac{1}{2}\hbar\omega_s(\vec{k})}_{\text{Énergie point-zéro}} + \underbrace{\sum_{k,s}\dfrac{\hbar\omega_s(\vec{k})}{e^{\beta\hbar\omega_s(\vec{k})}-1}}_{\text{phonons}}$
- Capacité calorifique $\dfrac{C_V}{V} = \dfrac{\partial}{\partial T}\sum_{k,s}\dfrac{\hbar\omega_s(\vec{k})}{e^{\beta\hbar\omega_s(\vec{k})}-1} \approx \dfrac{\partial}{\partial T}\sum_s\int\dfrac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\dfrac{\hbar\omega_s(\vec{k})}{e^{\beta\hbar\omega_s(\vec{k})}-1}$

- modèle de Debye
  - on suppose $\omega_s(\vec{k}) = c_s\vec{k}$
  - on cherche k_D la limite en terme de nombre d'onde telle que

$$3N = V\sum_{s=1,2,3}\int_0^{k_D}\frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}$$

tableau…

capacité calorifique dans un métal

- capacité calorifique dans un métal
  - C_V totale à basse T
    = électrons + vibration des atomes

$$C_V = \frac{\pi^2}{2}\frac{Nk_B^2}{\varepsilon_F}T + \frac{12\pi^4}{5}Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \quad \left(= Nk_B\left[\frac{\pi^2}{2}\frac{T}{\varepsilon_F / k_B} + \frac{12\pi^4}{5}\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3\right]\right)$$

$$C_V \sim T^3 \neq e^{\Theta_E/T}$$

  - ou $\frac{C_V}{T} = a + bT^2, \quad a = \frac{\pi^2}{2}\frac{Nk_B^2}{\varepsilon_F}, \quad b = \frac{12\pi^4}{5}Nk_B\left(\frac{1}{\Theta_D}\right)^3$

capacité calorifique dans un métal

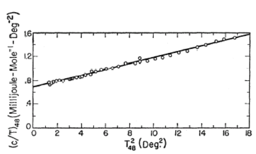


FIG. 5. Atomic heat of copper.

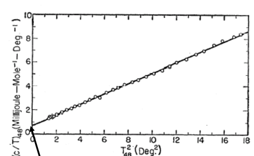


FIG. 7. Atomic heat of gold.

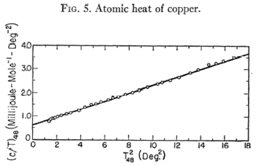


FIG. 6. Atomic heat of silver.

$$\frac{C_V}{T} = a + bT^2$$

$$a = \frac{\pi^2}{2}\frac{Nk_B^2}{\varepsilon_F}$$

$$b = \frac{12\pi^4}{5}Nk_B\left(\frac{1}{\Theta_D}\right)^3$$

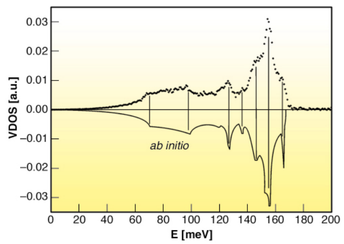
W. S. Corak, M. P. Garfunkel, C. B. Satterthwaite, and A. Wexler
Phys. Rev. 98, 1699–1707 (1955)

Densité d'états vibrationnels

- Pour les quantités qui se calculent sous la forme $\frac{1}{V}\sum_{k,s} Q(\omega_s(\vec{k})) \approx \sum_s \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} Q(\omega_s(\vec{k}))$
  - e.g. C_P
- il est utile de définir $g(\omega)$ tel qu'on puisse calculer $\int d\omega g(\omega) Q(\omega)$
- On aura $g(\omega) = \sum_s \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}\delta(\omega - \omega_s(\vec{k})) = \sum_s \int \frac{dS}{(2\pi)^3}\frac{1}{\left|\nabla\omega_s(\vec{k})\right|}$
- Approx. Debye: $g(\omega) = \sum_{s=1,2,3}\int \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3}\delta(\omega - ck) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi}\frac{\omega^2}{c^3}, \omega < ck_D \\ 0, \omega > ck_D \end{cases}$

Densité d'états (VDOS)

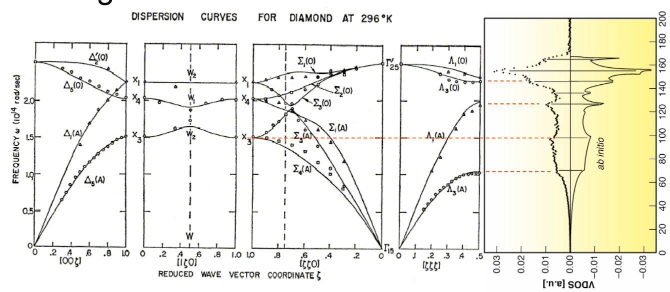
- Diamant
  - Obtenue par diffusion inélastique des rayons X



http://www.esrf.eu/UsersAndScience/Publications/Highlights/2005/HRRS/HRRS8

Densité d'états (VDOS)

- Singularités de van Hove



Méthodes de mesures impliquant des phonons

- Garbiel Éthier-Majcher: neutrons
- Lila Nafa: photons