PHY6505:
Physique de la matière condensée

Cours 13 & 14
Phonons

François Schiettekatte
Université de Montréal
Automne 2010

1

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

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

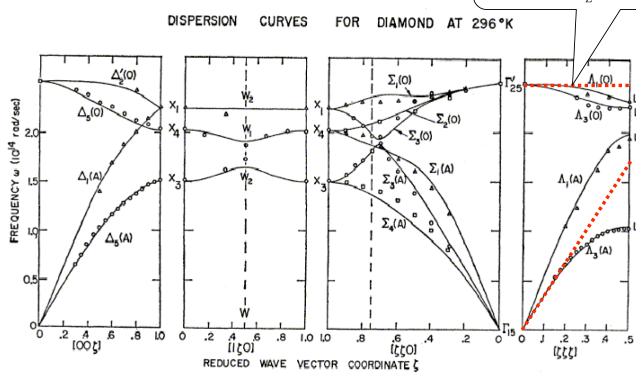
  - Analogie avec les photons:
    champ excité par $n_{\vec{k},s}$ quanta

2

relation de dispersion

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

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



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

3

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

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

4

tableau…

capacité calorifique dans un métal

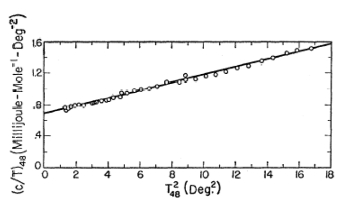


FIG. 5. Atomic heat of copper.

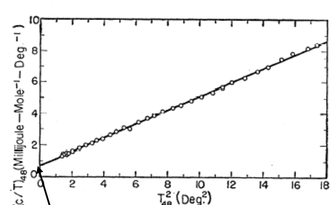


FIG. 7. Atomic heat of gold.

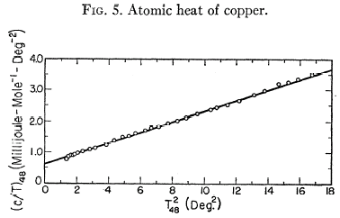


FIG. 6. Atomic heat of silver.

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

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

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

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

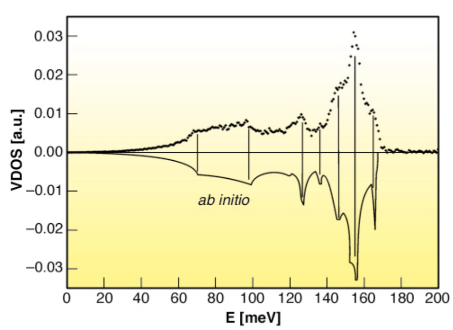
Densité d'états vibrationnels

- 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: $g(\omega) = \sum_{s=1,2,3} \int \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} \delta(\omega - ck) = \begin{cases} \frac{3}{2\pi}\frac{\omega^2}{c^3}, \omega < ck_D \\ 0, \omega > ck_D \end{cases}$

12

Densité d'états (VDOS)

- Diamant
  - Obtenue par diffusion inélastique des rayons X

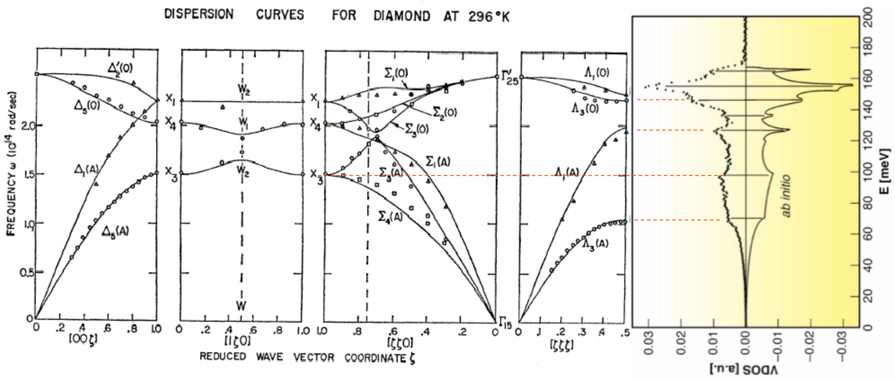


http://www.esrf.eu/UsersAndScience/Publications/Highlights/2005/HRRS/HRRS8

13

Densité d'états (VDOS)

- Singularités de van Hove

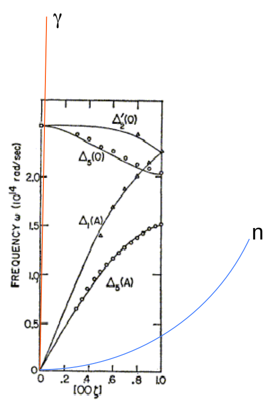


Mesure de la relation de dispersion des phonons:

Diffusion de neutrons

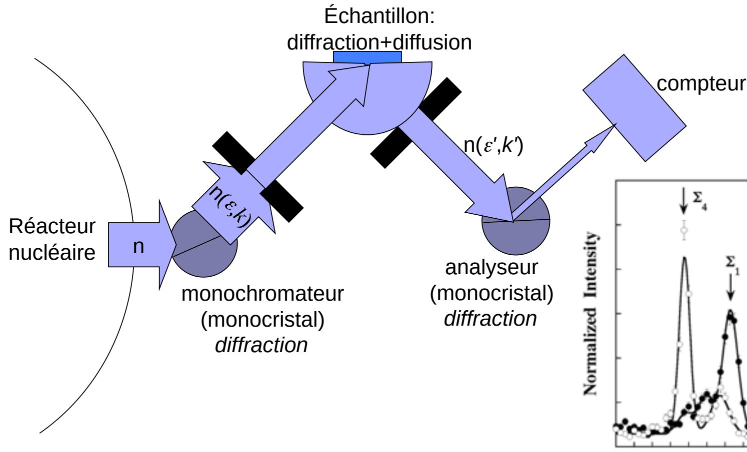
- Neutrons vs photons
- Conservation de
  - L'énergie $\varepsilon_n^{'} = \varepsilon_n \pm \hbar\omega(\vec{k})$
  - quantité de mouvement cristalline

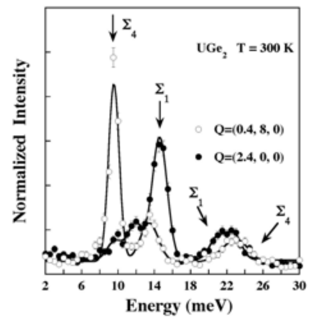
$$\vec{p}_n^{'} = \vec{p}_n \pm \hbar\vec{k} + \hbar\vec{K}$$



Mesure de la relation de dispersion des phonons:

Diffusion de neutrons

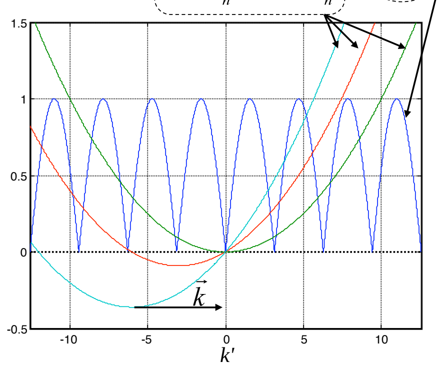


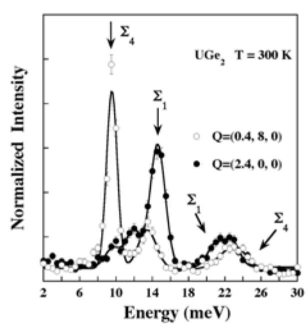


Mesure de la relation de dispersion des phonons:

Diffusion de neutrons

$$\varepsilon'_n - \varepsilon_n = \boxed{\frac{\hbar(\vec{k}'+\vec{k})^2}{2M_n} - \frac{\hbar\vec{k}^2}{2M_n}} = \hbar\omega(\vec{k}')$$



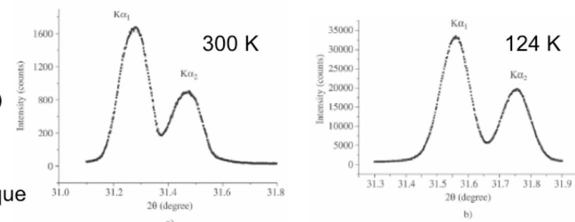


plot(k,abs(sin(k)),k,k.^2/100,k,(k+3).^2/100-3.^2/100,k,(k+6).^2/100-6.^2/100)

Mesure de la relation de dispersion des phonons:

Diffusion de rayons X

- Très petite modification de l'énergie
- Facteur de Debye-Waller
  - Atténuation des pics de *diffraction* (X, n)
  - Causée par les vibrations atomiques
  - $2W = \left\langle (\vec{q}\cdot\vec{u})^2 \right\rangle = \frac{3}{2}\frac{q^2\hbar^2}{M\hbar c k_D} = \frac{\varepsilon_{ion\ libre}}{\varepsilon_{phonon}}$ à T=0 considérant le modèle de Debye $\omega = ck$



C. M. Rocha et al. Mat. Res. 6 (2003)
Pics de diffraction (400) du KDP
(Potassium Dihydrogen Phosphate)

… aussi expansion thermique

Mesure de la relation de dispersion des phonons:

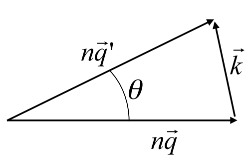
Diffusion de photons visibles

- Effet Raman

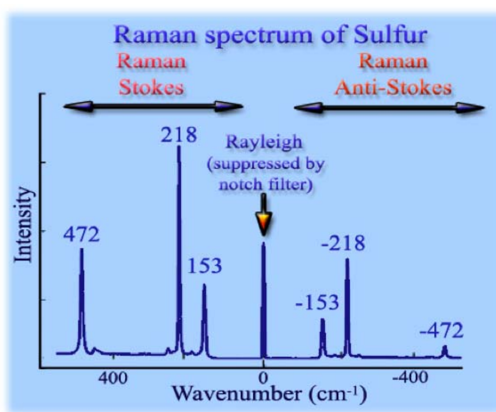
$$\hbar\omega' = \underbrace{\hbar\omega}_{eV} \pm \underbrace{\hbar\omega_{ph}(\vec{k})}_{meV}$$

$$\hbar n\vec{q}' = \hbar n\vec{q}' \pm \hbar\vec{k} + \hbar\vec{K},$$

n :indice de réfraction



$$k = 2nq\sin\frac{\theta}{2} = 2\frac{\omega n}{c}\sin\frac{\theta}{2}$$



www.fis.unipr.it/phevix/raman_tutorial.html

Mesure de la relation de dispersion des phonons:

Diffusion de photons visibles

- La diffraction d'ordre m implique l'émission de m phonons!
  - élastique dans le repère des ondes mais décalage Doppler dans le repère du lab

$$\vec{q}' = \vec{q}' + m\vec{k} \qquad \varepsilon' = \varepsilon + m\hbar\omega$$

20