Physique Statistique

Chapitre 8
Photons et Phonons

1 – Introduction

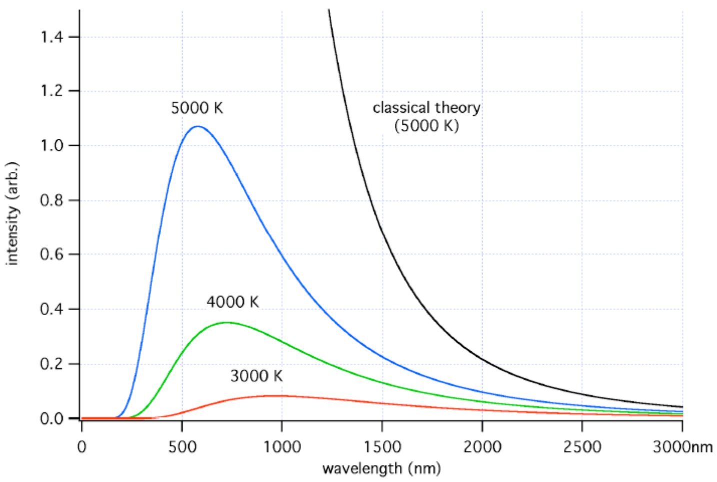
Le photon est la particule élémentaire qui est le médiateur de l'interaction électromagnétique. C'est un boson. On peut mettre autant de photons que l'on veut dans un espace donné, ce qui revient à dire qu'une lumière peut être aussi intense que l'on veut.

Le phonon est une notion de mécanique quantique faisant appel au concept de dualité onde-corpuscule : selon le contexte expérimental il peut se manifester soit comme une onde, soit comme un paquet élémentaire. Les phonons sont des paquets d'onde qui se propagent dans les solides.

2 – Rayonnement en équilibre thermique :distribution de Planck

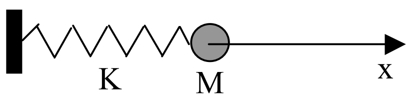
2.1 Fonction de distribution de Planck

Dans une cavité maintenue à une température donnée, le spectre d'émission est appelé spectre d'émission du corps noir. La théorie de la mécanique classique ne permet pas de retrouver la courbe expérimentale. C'est Planck qui en 1900 a trouvé une solution qui reconstitue parfaitement cette courbe. Pour cela il a quantifié les vibrations du matériau.



2.1.1 Modes propres de vibration

a) L'oscillateur harmonique classique



La loi de la dynamique s'écrit :

$$M\frac{d^2x}{dt^2} = -Kx \qquad\qquad \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{K}{M}x = 0$$

La solution de cette équation différentielles est :

$$\boxed{x = X_0 \cos(\omega t + \phi)} \quad \text{avec} \quad \omega^2 = \frac{K}{M}$$

Ce sont les vibrations autour de l'état d'équilibre.
$\omega = 2\pi f$ est la pulsation propre et f est la fréquence propre.
ω est appelé mode propre de vibration de cet oscillateur.

Quelle est l'énergie associée à ω

$$E = E_p + E_c = \frac{1}{2}Kx^2 + \frac{1}{2}M\dot{x}^2 \quad \text{avec} \quad \dot{x} = \frac{dx}{dt} = -\omega X_0 \sin(\omega t + \phi)$$
$$E = \frac{1}{2}Kx^2 + \frac{1}{2}M\omega^2 X_0^2 \sin^2(\omega t + \phi)$$
$$E = \frac{1}{2}Kx^2 + \frac{1}{2}M\omega^2 X_0^2 (1 - \cos^2(\omega t + \phi))$$
$$E = \frac{1}{2}Kx^2 + \frac{1}{2}M\omega^2 X_0^2 - \frac{1}{2}M\omega^2 X_0^2 \cos^2(\omega t + \phi))$$
$$\frac{1}{2}M\omega^2 X_0^2 \cos^2(\omega t + \phi)) = \frac{1}{2}Kx^2$$
$$E = \frac{1}{2}Kx^2 + \frac{1}{2}M\omega^2 X_0^2 - \frac{1}{2}M\omega^2 X_0^2 \cos^2(\omega t + \phi))$$

Donc : $E = \frac{1}{2}M\omega^2 X_0^2 = Cte$ pour ω donné.

On peut exciter le mode ω en lui fournissant de l'énergie. L'énergie augmente comme le carré de l'amplitude X_0.

Conclusion :

Un oscillateur harmonique classique vibre avec un mode propre $\omega = \sqrt{\frac{K}{M}}$ qu'on peut exciter de manière continue. L'énergie étant proportionnelle au carré de l'amplitude : X_0^2

b) L'oscillateur harmonique en Mécanique Quantique

L'équation de Schroëdinger s'écrit :

$$\left(\frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}Kx^2\right)\Psi(\dot{x},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

La solution de cette équation donne pour l'énergie la solution suivante :

$$\varepsilon_s = \left(s + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad \text{avec } s \text{ entier} \geq 0$$

L'état fondamental s'obtient pour s=0 donc : $\varepsilon_s = \frac{\hbar\omega}{2}$ à $T = 0K$

Conclusion :

Le spectre est discret, quantifié. On ne peut exciter que les énergies de type : $\varepsilon_s = \left(s + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$. En négligeant l'état fondamental qui est négligeable dès que la température est élevée, alors : $\varepsilon_s = s\hbar\omega$

c) Une onde électromagnétique enfermée dans une boîte (cavité)
Rappel du cours « onde et vibration » :
Il y a réflexion sur les parois :
- L'onde est une combinaison de l'onde incidente et de l'onde réfléchie.
- Il y a établissement d'ondes stationnaires dans la cavité avec des modes propres ω_i d'énergie ε_i continue.

La quantification de Planck

On ne peut exciter l'un des modes ω de l'onde que par des énergies discrètes $\varepsilon_s = s\hbar\omega$ (identiques à l'oscillateur harmonique)

$\hbar\omega$ est l'énergie d'un photon, et s le nombre de photons se trouvant dans le mode ω.

d) Rappels : Relation de dispersion pour l'onde électromagnétique
Pour une onde électromagnétique, on a :

$\omega = 2\pi f$, $f = \frac{1}{T}$ donc : $\omega = \frac{2\pi}{T}$:

ω est la pulsation, f la fréquence et T la période

Or, $T = \frac{\lambda}{c}$ $\lambda = cT$

λ est la longueur d'onde, et c la vitesse de la lumière
On en déduit :

$\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ On pose $\frac{2\pi}{\lambda} = k$ le nombre d'onde

$\vec{k}$ est le vecteur d'onde, tel que $\left|\vec{k}\right| = k$

D'où $\boxed{\omega = ck}$ c'est la relation de dispersion.

Sur une courbe ω en fonction de k, c'est une droite qui passe par l'origine, avec comme pente c.

2.1.2 Calcul du nombre de photons dans le mode ω d'une onde électromagnétique

Soit une cavité à la température T, en équilibre thermique. La fonction de partition sera :

$$Z = \sum_{s=0}^{\infty} \exp\left(\frac{-s\hbar\omega}{kT}\right)$$

C'est une suite infinie : $Z = 1 + q + q^2 + q^3 + ... + q^s + ... = \frac{1}{1-q}$

avec $q = \exp\left(\frac{-\hbar\omega}{T}\right) << 1$

Donc : $\boxed{Z = \dfrac{1}{1 - \exp\left(\dfrac{-\hbar\omega}{kT}\right)}}$

La probabilité pour que le systèmes soit excité dans l'état d'énergie $\varepsilon_s = s\hbar\omega$ est donné par Boltzmann.

$$P(\varepsilon_s) = \frac{\exp\left(\dfrac{-s\hbar\omega}{kT}\right)}{Z}$$

Le nombre moyen de photons dans l'état ε_s est donné par :

$$< s >= \sum_s sP(\varepsilon_s) = Z^{-1}\sum_s s.\exp\left(\frac{-s\hbar\omega}{kT}\right)$$

On pose $y = \dfrac{\hbar\omega}{kT}$, d'où : $\sum_s s.e^{-sy} = -\dfrac{d}{dy}\sum_s e^{-sy}$

Comme précédemment :

$$\sum_s \exp(-sy) = \frac{1}{1 - e^{-y}}$$

D'où : $\sum_s s.e^{-sy} = -\dfrac{d}{dy}\left(\dfrac{1}{1 - e^{-y}}\right) = \dfrac{e^{-y}}{(1 - e^{-y})^2}$

$< s(\omega) >= Z^{-1}\dfrac{e^{-y}}{(1 - e^{-y})^2}$ or $Z^{-1} = (1 - e^{-y})$

D'où $< s(\omega) >= \dfrac{e^{-y}}{(1 - e^{-y})} = \dfrac{1}{e^{y} - 1}$

$$\boxed{< s(\omega) >= \frac{1}{\exp\dfrac{\hbar\omega}{kT} - 1} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}}$$

Cette relation est un cas particulier de la distribution de Bose-Einstein :

$$\boxed{f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\beta\varepsilon - \mu)} - 1}}$$

Dans ce cas, le potentiel chimique $\mu = 0$, car ici le nombre de photons dans un état donné est illimité, contrairement aux bosons habituels qui ont un potentiel chimique non nul.

2.2 Loi de Planck et Stefan-Boltzmann

Cette loi décrit l'énergie d'une onde électromagnétique enfermée dans une cavité (rayonnement du corps noir)

2.2.1 Onde électromagnétique de mode ω

On a vu qu'à l'équilibre, la distribution est donnée par :

$$< s > = \frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega}{kT} - 1}$$

C'est la loi de Planck ou distribution de Planck-Boltzmann.
Quelle est l'énergie moyenne du mode ω ?

$$< \varepsilon_s > = \varepsilon_\omega = < s > \hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{\exp\frac{\hbar\omega}{kT} - 1}$$

Si $kT >> \hbar\omega$ alors $\exp\frac{\hbar\omega}{kT} = 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}$

$\frac{\hbar\omega}{kT} << 1$

Donc : $\boxed{\varepsilon_\omega = kT}$

L'énergie de vibration est de l'ordre de kT

2.2.2 Ondes électromagnétiques dans une cavité

a) Une onde électromagnétique est une onde transverse c'est à dire la direction de l'onde (polarisation) est perpendiculaire au vecteur de propagation $\vec{k}$.
Si la cavité cubique de côté L est parfaite, on obtient des ondes stationnaires :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp i(\omega t - \vec{k}\vec{r})$$

avec : $\vec{r} = (x, y, z)$ $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ avec $k_x = \frac{n_x\pi}{L}$, $k_y = \frac{n_y\pi}{L}$, $k_z = \frac{n_z\pi}{L}$, $\vec{k} = \frac{\vec{n}\pi}{L}$

$\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$

$$E_x = E_{x_0} \sin(\omega t)\cos\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

$$E_y = E_{y_0} \sin(\omega t).\sin\frac{n_x\pi x}{L}\cos\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

$$E_z = E_{z_0} \sin(\omega t)\sin\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\cos\frac{n_z\pi z}{L}$$

D'après les équations de Maxwell :

$div\vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} = 0$, car $\rho = 0$, il n'y a pas de charge électrique dans la cavité.

$$div\vec{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} = \frac{n_x\pi}{L} E_{x_0} \sin(\omega t)\sin\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

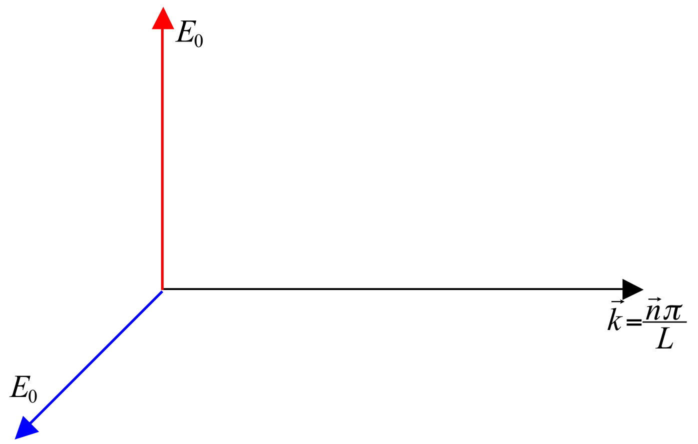
$$\frac{\partial E_y}{\partial y} = \frac{n_y\pi}{L} E_{y_0} \sin(\omega t)\sin\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial z} = \frac{-n_z \pi}{L} E_{z_0} \sin(\omega t) \sin\frac{n_x \pi x}{L} \sin\frac{n_y \pi y}{L} \sin\frac{n_z \pi z}{L}$$

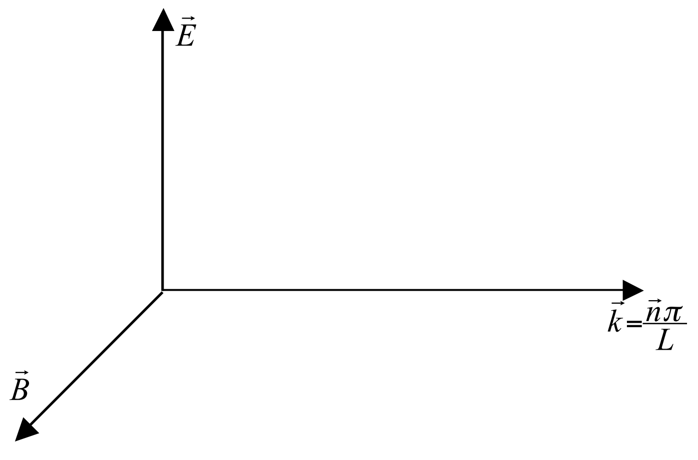
$div\vec{E} = 0$ donc $n_x E_{x_0} + n_y E_{y_0} + n_z E_{z_0} = 0$ ou encore : $\vec{E}_0 . \vec{n} = 0$

On en déduit que : $\vec{E}$ est perpendiculaire à $\vec{n}$, donc à $\vec{k}$, car $\vec{k} = \frac{\vec{n}\pi}{L}$

Il y a deux polarisations possibles, comme représenté sur la figure suivante, avec E_0 perpendiculaire à $\vec{k}$



En électromagnétisme classique, on sait que le vecteur $\vec{B}$ est perpendiculaire à $\vec{E}$



b) Il y a une infinité de modes propres lorsque l'onde est confinée

L'équation d'onde est :

$$\Delta\vec{E} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\vec{E} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}$$

Calcul de : $\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial x^2}$

$$E_x = E_{x_0}\sin(\omega t)\cos\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} = \frac{n_x\pi}{L}E_{x_0}\sin(\omega t)\sin\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

Donc $\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2} = \frac{-n_x^2\pi^2}{L^2}E_{x_0}\sin(\omega t)\cos\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$ (1)

$$\frac{\partial E_x}{\partial y} = \frac{n_y\pi}{L}E_{x_0}\sin(\omega t).\cos\frac{n_x\pi x}{L}\cos\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$$

Donc : $\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} = \frac{-n_y^2\pi^2}{L^2}E_{x_0}\sin(\omega t).\cos\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$ (2)

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} = \frac{n_z\pi}{L}E_{x_0}\sin(\omega t)\cos\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\cos\frac{n_z\pi z}{L}$$

Donc : $\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = \frac{-n_z^2\pi^2}{L^2}E_{x_0}\sin(\omega t)\cos\frac{n_x\pi x}{L}\sin\frac{n_y\pi y}{L}\sin\frac{n_z\pi z}{L}$ (3)

En faisant (1)+(2)+(3), on obtient :

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = \frac{-(n_x^2+n_y^2+n_z^2)\pi^2}{L^2}E_x$$

On aura de même :

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} = \frac{-(n_x^2+n_y^2+n_z^2)\pi^2}{L^2}E_y$$

et :

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial z^2} = \frac{-(n_x^2+n_y^2+n_z^2)\pi^2}{L^2}E_z$$

Donc on peut écrire : $\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\vec{E} = \frac{-(n_x^2+n_y^2+n_z^2)\pi^2}{L^2}\vec{E}$ (4)

Par ailleurs, puisque :

$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp i(\omega t - \vec{k}\vec{r})$

Donc : $\frac{\partial^2 \vec{\vec{E}}}{\partial t^2} = -\omega^2\vec{E}$ et $\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{\vec{E}}}{\partial t^2} = \frac{-\omega^2}{c^2}\vec{E}$ (5)

En égalant (4) et (5), on obtient :

$$\frac{(n_x^2+n_y^2+n_z^2)\pi^2}{L^2} = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (6)$$

Si on pose $n_x^2+n_y^2+n_z^2 = n^2$, on peut ré-écrire (6) :

$$\boxed{\omega_n = \frac{n\pi c}{L} = ck_n}$$

avec $k_n = \dfrac{n\pi}{L}$ et $n > 0$

2.2.3 Energie totale de toutes les ondes ω_n

a) Dénombrement des modes propres

Chaque mode ω_n a une énergie, on calcule l'énergie moyenne

$$<\varepsilon_n> = \frac{\hbar\omega_n}{\exp\frac{\hbar\omega_n}{kT} - 1}$$

avec $\omega_n = \dfrac{n\pi c}{L}$ et $n = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$

L'énergie totale de tous les modes sera :

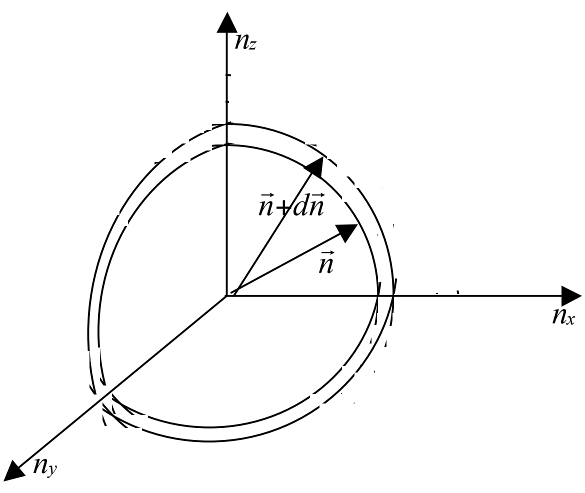
$$U = \sum_{\varepsilon_n} <\varepsilon_n> = \sum_{\varepsilon_n} \frac{\hbar\omega_n}{\exp\frac{\hbar\omega_n}{kT} - 1}$$

On remplace la somme discrète par une intégrale :

$$U = \frac{1}{8}\int_0^\infty 4\pi n^2 \frac{\hbar\omega_n}{\exp\frac{\hbar\omega_n}{kT} - 1} dn$$

Or $\omega_n = \dfrac{n\pi c}{L}$

Donc : $U = \dfrac{1}{8}\displaystyle\int_0^\infty 4\pi n^2 \frac{\hbar n\pi c / L}{\exp\frac{n\hbar\pi c}{LkT} - 1} dn$



On intègre de 0 à l'infini sur n, donc que sur le volume entier. Comme les n_x, n_y, n_z sont positifs, il ne faut en réalité intégrer que sur $\frac{1}{8}$ du volume

Les ondes électromagnétiques ayant deux polarités, il y a en fait deux fois plus de modes que ce que nous venons de calculer.

Finalement, l'énergie s'écrit :

$$U = \frac{\pi^2 \hbar c}{L} \int_0^\infty \frac{n^3}{\exp \frac{n\hbar \pi c}{LkT} - 1} dn$$

On pose : $x = \frac{n\hbar\pi c}{LkT}$ donc : $n = \frac{LkTx}{\hbar c\pi}$ et $dn = \frac{LkT}{\hbar c\pi} dx$

Donc : $U = \frac{\pi^2 \hbar c}{L} \left(\frac{LkT}{\pi \hbar c} \right)^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx$

Or : $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$

Finalement on peut écrire :

$$u = \frac{U}{L^3} = \frac{U}{V} = \frac{\pi^2}{15\hbar^3 c^3} k^4 T^4 = AT^4$$ A est une constante

U est l'énergie totale et u est la densité d'énergie de la cavité.

La loi de Stefan-Boltzmann s'écrit : $\boxed{u = AT^4}$

b) Densité spectrale d'énergie

On calcule l'énergie pour chaque mode propre ω. L'énergie par unité de volume et unité de fréquence est $u(\omega)$. Donc :

$$u = \int_0^\infty u(\omega) d\omega$$

Soit dV_ω le nombre de modes entre ω et $\omega + d\omega$ dans l'espace des ω.

On a $dV_\omega = dV_n$, en effet la densité spectrale du mode ω, $g(\omega)$ est la même que la densité calculée avec n.

$$g(\omega)d\omega = g(n)dn = 4\pi n^2 dn \frac{1}{8} 2 = \pi n^2 dn$$

Or $\omega = \frac{n\pi c}{L}$ donc $d\omega = \frac{\pi c}{L} dn$

D'où: $g(\omega)d\omega = \pi \frac{\omega^2 L^2}{\pi^2 c^2} \frac{L}{\pi c} d\omega$

En simplifiant: $g(\omega)d\omega = \frac{\omega^3 L^3}{\pi^2 c^3} d\omega$

$$dU = < \varepsilon_n > g(\omega) d\omega$$

$$dU = \frac{\hbar\omega}{\exp\frac{\hbar\omega}{kT} - 1} \frac{L^3\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega$$

$$U = \int_0^\infty dU = \frac{L^3\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{\exp\frac{\hbar\omega}{kT} - 1} d\omega$$

$$u = \frac{U}{L^3} = \frac{U}{V} = \int_0^\infty \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{\exp\frac{\hbar\omega}{kT} - 1} d\omega = \int_0^\infty u_\omega \, d\omega$$

Finalement :

$$\boxed{u_\omega = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{\exp\frac{\hbar\omega}{kT} - 1}}$$

C'est la densité spectrale d'énergie pour un mode propre ω. C'est aussi l'énergie par unité de volume et par unité de pulsation ω.

2.2.4 Calcul de l'entropie des photons

On sait que $\frac{1}{\tau} = \left(\frac{\partial\sigma}{\partial U}\right)_V$

Donc quand le volume est constant : $d\sigma = \frac{dU}{\tau}$

Or : $u = \frac{U}{L^3} = \frac{U}{V} = \frac{\pi^2}{15\hbar^3 c^3}\tau^4$

Donc $U = \frac{\pi^2 V}{15\hbar^3 c^3}\tau^4$

D'où $dU = \frac{4\pi^2 V\tau^3}{15\hbar^3 c^3} d\tau$

Or $d\sigma = \frac{dU}{\tau}$ D'où $d\sigma = \frac{4\pi^2 V\tau^2}{15\hbar^3 c^3} d\tau$

En intégrant, on trouve :

$$\boxed{\sigma = \frac{4\pi^2 V\tau^3}{45\hbar^3 c^3}}$$

2.2.5 Constante de Stefan-Boltzmann

Soit une onde électromagnétique enfermée dans une cavité. La densité de flux émis J_u est le taux d'émission d'énergie par unité de surface. C'est l'énergie contenue dans une colonne de section unité et de longueur la vitesse de la lumière x unité de temps.

$$J_u = \frac{cU(\tau)}{V} x facteur.géométrique$$

Le facteur géométrique est $\frac{1}{4}$, car tous les rayons n'arrivent pas parallèlement au trou.

$$J_u = \frac{cU(\tau)}{V}\frac{1}{4} = \frac{cu(\tau)}{4}$$

Donc : $J_u = \frac{\pi^2}{60\hbar^3 c^2}\tau^4 = \sigma_{SB} T^4$

σ_{SB} est la constante de Stefan-Boltzmanne

$\sigma_{SB} = 5{,}67.10^{-8} Wm^{-2}.K^{-4}$

C'est la loi de rayonnement du corps noir

3 – <u>Phonons et modèle de Debye de la chaleur spécifique des solides</u>

3.1 Ondes élastiques et phonons

Dans un solide les atomes vibrent autour de leur position d'équilibre. Des ondes se propagent. En Mécanique Quantique, leur énergie est quantifiée :

$$E = \hbar\omega$$

On traite les phonons comme les photons. Le nombre moyen de phonons de fréquence ω à la température τ et donné par :

$$< s(\omega) >= \frac{1}{\exp\frac{\hbar\omega}{kT} - 1} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

L'objectif est de trouver l'énergie et la chaleur spécifique des ondes élastiques (phonons) dans les solides.

Hypothèse :

ω est indépendant de l'amplitude des vibrations

La vitesse v des ondes élastiques est indépendante de ω, de la direction de propagation et de la polarisation.

Donc les résultats obtenus avec les photons sont valables avec les phonons

3.2 Nombre de modes pour les phonons

Le nombre total de modes de vibration est $3N$, puisqu'il y a N atomes, le nombre 3 vient des 3 possibilités de vibration quand une onde se propage : 2 vibrations transversales, et une longitudinal. Alors que pour les photons ce nombre est infini.

Le nombre de modes entre n et $n + dn$ est $4\pi n^2 dn \frac{3}{8}$. Le chiffre 3 provient des 3 modes de vibration, et le rapport $\frac{1}{8}$ vient du fait que l'intégration sur toute la sphère correspond à 8 fois celui des n_x, n_y et n_z positifs.

La valeur maximale n_{max} est donnée par :

$$\frac{3}{8}\int_0^{n_{max}} 4\pi n^2 \, dn = 3N$$

D'où $\boxed{n_{max} = n_D = \left(\frac{6N}{\pi}\right)^{1/3}}$

La lettre D est en hommage à Debye

3.3 Energie moyenne des phonons et chaleur spécifique

$$U = \sum_n < \varepsilon_n > = \sum_n < s_n > \hbar\omega_n = \sum_{\omega_n} \frac{\hbar\omega_n}{\exp\frac{\hbar\omega_n}{\tau} - 1}$$

On remplace : $\sum_{\omega_n}$ par $\int_0^{n_D}$

$$U = \frac{3}{8}\int_0^{n_D} \frac{\hbar\omega_n}{\exp\frac{\hbar\omega_n}{\tau} - 1} 4\pi n^2 dn = \frac{3\pi}{2}\int_0^{n_D} \frac{\hbar\omega_n}{\exp\frac{\hbar\omega_n}{\tau} - 1} n^2\, dn$$

On fait le même calcul que pour les photons en remplaçant la vitesse de la lumière c par la vitesse des phonons dans le solide v.

$$\omega_n = \frac{n\pi v}{L}$$

Comme pour les photons :

$$U = \frac{3}{2}\left(\frac{\pi^2\hbar v}{L}\right)\left(\frac{\tau L}{\pi\hbar v}\right)^{4} \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

avec $x = \frac{\pi\hbar v n}{L\tau}$ par ailleurs : $\omega = kv = \frac{n\pi v}{L}$

et $x_D = \frac{\pi\hbar v n_D}{L\tau}$ en remplaçant n_D par sa valeur $n_D = \left(\frac{6N}{\pi}\right)^{1/3}$.

On en déduit : $x_D = \frac{\hbar v}{\tau}\left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{1/3}$

On pose $x_D = \frac{\theta_D}{T} = \frac{k\theta_D}{\tau}$

θ_D est la température de Debye :

$$\boxed{\theta_D = \frac{\hbar v}{k}\left(\frac{6\pi^2 N}{V}\right)^{1/3} = \frac{\hbar v}{k}\left(6\pi^2 n\right)^{1/3}}$$

a) Basses températures

$T << \theta_D$

$$U = \frac{3}{2}\left(\frac{\pi^2\hbar v}{L}\right)\left(\frac{\tau L}{\pi\hbar v}\right)^4 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

$\int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$, car si T est petit, $x_D \approx \infty$

$$\boxed{U(T) = \frac{3\pi^4 N\tau^4}{5(k\theta_D)^3} = \frac{3\pi^4 NkT^4}{5\theta_D^3}}$$

$U(T)$ est proportionnel à T^4

$$\boxed{C_v = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_v = \frac{12\pi^4 Nk}{5}\left(\frac{\tau}{k\theta_D}\right)^3 = \frac{12\pi^4 Nk}{5}\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3}$$

A basse température C_v est une fonction en T^3 de la température.

b) Haute température

$T >> \theta_D$

On trouve $U(T) = 3NkT$ (voir exercice en TD)

D'où $\boxed{C_v = 3Nk}$

C'est la loi de Dulong et Petit.

Si N est le nombre d'Avogadro, alors :

$$\boxed{U = 3RT \text{ et } C_v = 3R}$$