

**Détection de rayonnements
à très basse température**
5e école thématique du 2 au 8 juin 2002

PHONON ?

A. Juillard

CSNSM, IN2P3-CNSR

Université Paris XI, Bâtiment 108

91405 Orsay Campus.

Juillard@csnsm.in2p3.fr

Oléron

-PHONONS ?-

Les atomes dans un solide sont liés par des forces de rappel importantes, des ondes élastiques vont pouvoir se propager dans un tel milieu. Or, tout comme l'énergie d'une onde électromagnétique dans une cavité, **l'énergie d'une onde élastique dans un solide est quantifiée** : le quantum d'énergie associé est un phonon. Le but de ce chapitre introductif est de familiariser le lecteur avec cette notion de phonon dans le cas notamment de modèles simples.

A. Réseau avec un atome par maille.

Pour bien comprendre les choses, considérons un cristal cubique avec un atome par maille. Quand une onde se propage dans certaines directions denses des plans entiers du cristal se déplacent en phase. Le mouvement est parallèle à la direction de propagation si l'onde est longitudinale (Figure 1) et perpendiculaire à cette direction si l'onde est transverse (Figure 2). Nous allons alors voir que le vecteur d'onde \vec{K} est lié à la fréquence ω par une **relation dite de dispersion**.

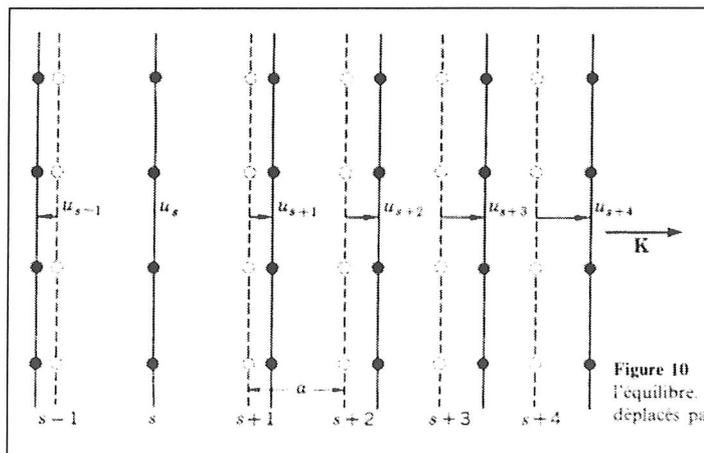


Fig1. En pleins, plans d'atome déplacés par le passage d'une onde longitudinale (en pointillés : plans à l'équilibre).

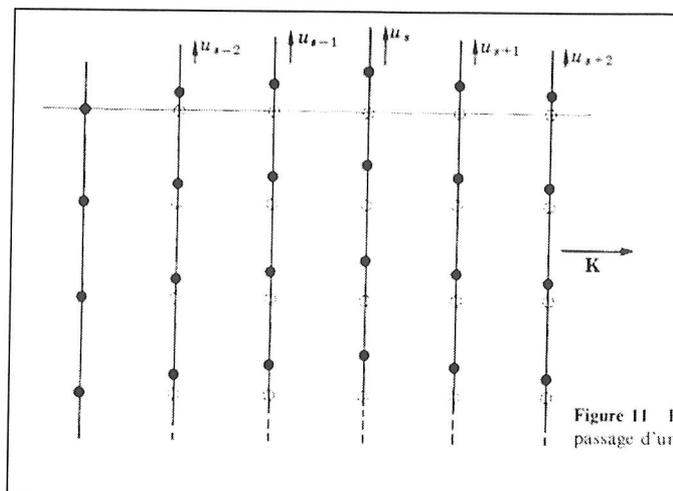


Fig2. Plans d'atome déplacés par le passage d'une onde transverse.

On considère que les interactions se limitent aux plans les plus proches, appelons C la force de rappel élastique entre deux plans proches, en conservant les notations des figures 1 et 2, la force exercée sur un atome du plan s s'exprime par:

$$F_s = C [(u_{s+1} - u_s) - (u_s - u_{s-1})] \quad (1.)$$

L'équation du mouvement pour le plan s est alors :

$$M \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C [(u_{s+1} - u_s) - (u_s - u_{s-1})] \quad (2.)$$

(3.) admet des solutions sous la forme d'onde de propagation :

$$u_s = U e^{i(sKa - \omega t)} \quad (3.)$$

où a est la distance entre plans, \vec{K} est le vecteur d'onde d'amplitude $\frac{2\pi}{\lambda}$ et $\omega = 2\pi\nu$ est la fréquence angulaire de l'onde (de fréquence ν est de longueur d'onde λ). On en déduit donc, la relation de dispersion $M\omega^2 = -C(e^{iKa} + e^{-iKa} - 2)$, soit

$$\omega^2 = \frac{4C}{M} \sin^2 \left(\frac{Ka}{2} \right) \quad (4.)$$

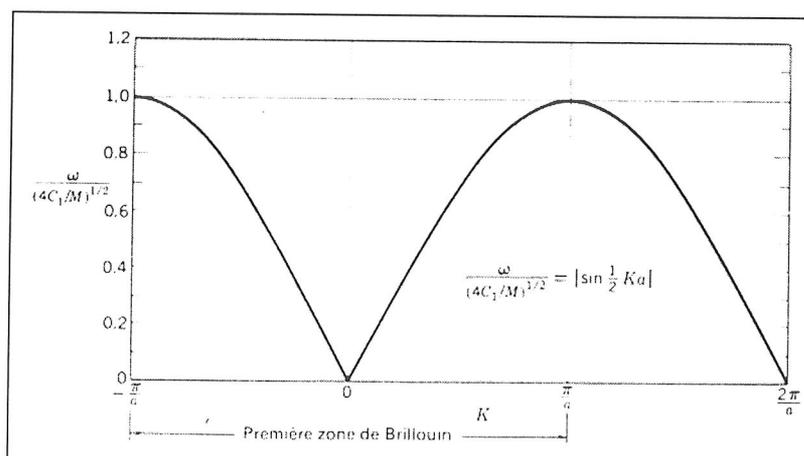


Fig3. Relation de dispersion de ω en fonction de K pour un réseau où l'interaction se réduit aux plus proches voisins.

Le domaine de K à considérer se réduit ainsi à $-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}$ (première zone de Brillouin).

* Pour $Ka \ll 1$, on a $\omega = \sqrt{\frac{C}{M}}Ka$, et la vitesse de propagation de l'onde est donc

$$v_s = \frac{\omega}{K} = a\sqrt{\frac{C}{M}} \text{ (c'est la vitesse du son dans le milieu).}$$

* Pour $K = \pm \frac{\pi}{a}$, limite de la zone de Brillouin, la solution à (3.) devient une onde stationnaire de la forme $u_s = U(-1)^s e^{-i\omega t}$. Des atomes voisins vibrent donc en opposition de phase, mais l'onde ne se déplace pas (la vitesse de groupe $\frac{d\omega}{dK}$, représentant la vitesse de déplacement d'un paquet d'onde et donc de l'énergie est nulle notamment).

B. Réseau avec deux atomes ou plus par maille.

Dans les cristaux ayant plusieurs atomes par maille élémentaire, le spectre de vibration présente de nouvelles caractéristiques. Pour chaque mode de polarisation dans une direction de propagation donnée, la relation de dispersion $w(K)$ donne deux branches : les branches acoustiques et optiques, avec à chaque fois des phonons longitudinaux ou transverses.

Si on a p atomes par maille, on aura $3p$ modes : 3 modes acoustiques et $3p-3$ modes optiques.

Considérons à nouveau un cristal cubique avec des plans contenant des atomes de masse M_1 et M_2 . Considérons des ondes se propageant perpendiculairement aux plans ne contenant qu'un seul type d'atomes (Figure 4.).

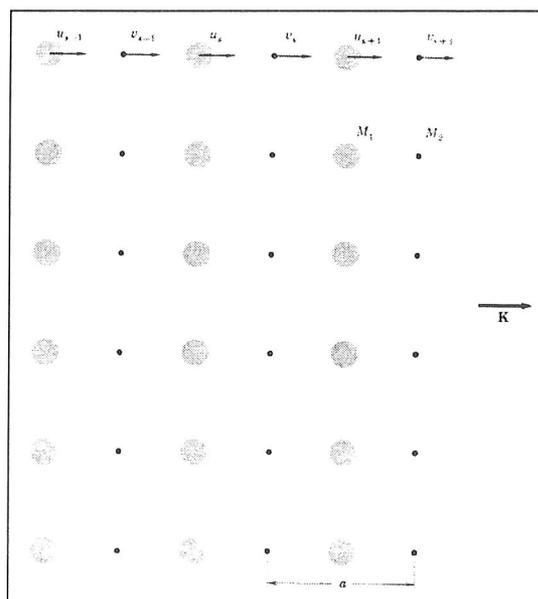


Fig4. Structure cristalline diatomique de masse M_1 et M_2 reliées par une constante de rappel C entre plans les plus proches.

En considérant des interactions uniquement entre plus proches voisins et des constantes d'interactions semblables, on a comme équations du mouvement :

$$\begin{cases} M_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s) \\ M_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+} + u_s - 2v_s) \end{cases} \quad (5.)$$

On cherche encore une fois des solutions sous forme d'onde de propagations $u_s = Ue^{i(sKa - \omega t)}$ et $v_s = Ve^{i(sKa - \omega t)}$ (les amplitudes sont évidemment différentes suivant les plans).

Alors l'équation (5.) devient :

$$\begin{cases} -\omega^2 M_1 U = CV(1 + e^{-iKa}) - 2CU \\ -\omega^2 M_2 V = CU(1 + e^{iKa}) - 2CV \end{cases} \quad (6.)$$

(6.) admet des solutions si le déterminant de U et V est nul :

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1 \omega^2 & -C(1 + e^{-iKa}) \\ -C(1 + e^{iKa}) & 2C - M_2 \omega^2 \end{vmatrix} = 0, \text{ soit :}$$

$$\boxed{M_1 M_2 \omega^4 - 2C(M_1 + M_2) \omega^2 + 2C^2(1 - \cos Ka) = 0} \quad (7.)$$

Pour éviter de fastidieux calculs, on s'intéresse seulement aux cas limites :

1. $Ka \ll 1$: on a $\cos Ka \approx 1 - \frac{1}{2} K^2 a^2$, et les solutions de (7.) sont alors :

$$\boxed{\omega^2 \approx 2C \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)} \text{ pour la branche optique}$$

$$\boxed{\omega^2 \approx \frac{C/2}{M_1 + M_2} K^2 a^2} \text{ pour la branche acoustique}$$

2. Pour $K_{\max} = \pm \frac{\pi}{a}$, on a $\boxed{\omega^2 = \frac{2C}{M_1}}$ ou $\boxed{\omega^2 = \frac{2C}{M_2}}$ (voir Figure 5.).

On voit sur la courbe de dispersion donnée sur la figure 5 que certaines fréquences sont interdites en limites de zone de Brillouin. Si on cherche des solutions dans ce domaine, on

obtient des vecteurs d'ondes complexes correspondant à des ondes évanescentes qui s'amortissent rapidement.

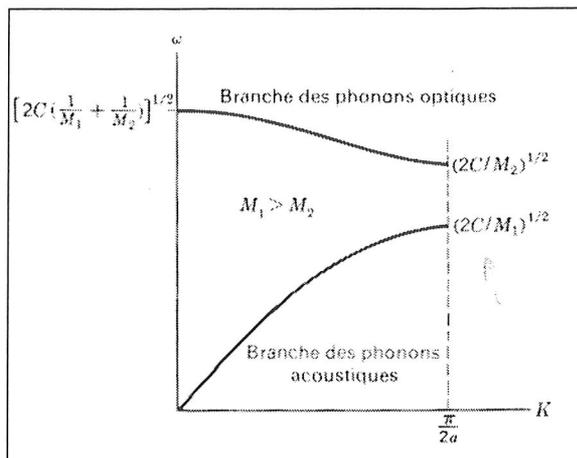


Fig5. Branche optique et acoustique de la relation de dispersion pour le réseau diatomique de la figure 4.

Remarque : a est typiquement de l'ordre de quelques Å, donc K_{\max} est de l'ordre de 1 \AA^{-1} . Les vitesses de son typiques (qui dépendent des polarisations, cf. figure 7) sont de l'ordre de $5 \cdot 10^5 \text{ cm.s}^{-1}$, et les fréquences maximales tournent autour de 10^{13} Hz .

La figure 6 montre un exemple de déplacement des atomes pour les branches transverses optiques et acoustiques. Si les atomes sont de charges opposées, les vibrations des branches optiques peuvent être excitées par le champ électrique d'une onde lumineuse, la dénomination optique vient de là.

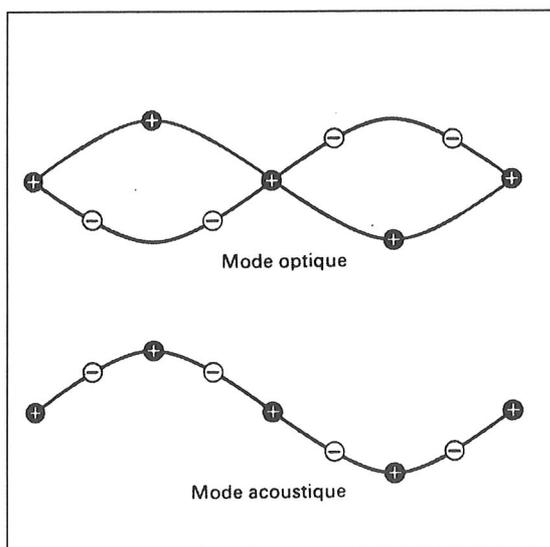


Fig6. Ondes transversales optiques et acoustique montrant le déplacement des atomes dans les deux modes (la longueur d'onde est la même dans les 2 cas).

Un exemple de courbe expérimentale de dispersion obtenue par diffusion inélastique de neutrons est montré dans le cas du diamant sur la figure 7. Le diamant a deux atomes de carbone par maille élémentaire : on a ainsi 6 branches dans la courbe de dispersion : 1 LA (longitudinale acoustique), 1 LO (longitudinale optique), 2 TA (transverse acoustique) et 2 TO. Dans certaines directions de propagations, des modes peuvent être dégénérés : c'est le cas sur cette figure.

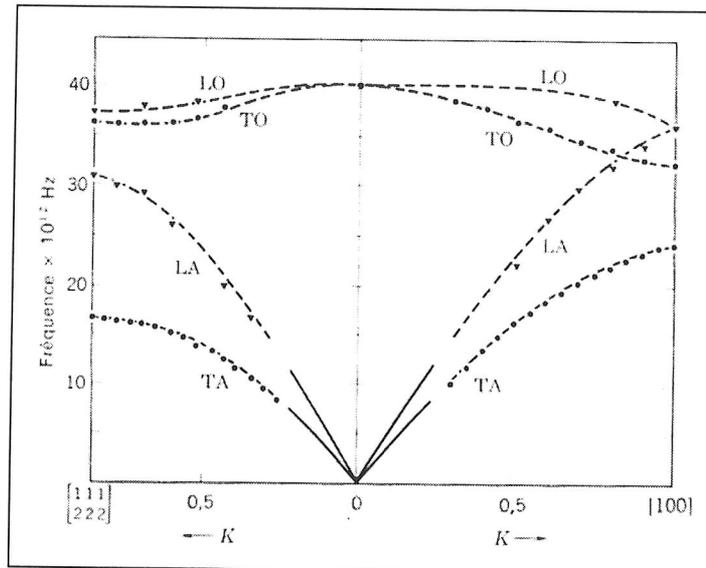


Fig7. Courbes de dispersion expérimentale du diamant pour différentes directions de propagation. K est donné en unité réduite (K/K_{max}). Dans toutes les directions considérées, les modes transverses sont dégénérés.

C. Quantification de l'énergie vibrationnelle : phonons.

Pour un cristal contenant N mailles avec p atomes chacune, nous avons $3Np$ modes de vibrations indépendants (nombres de degrés de liberté). Nous avons vu que ces modes se décrivent généralement sous forme d'onde progressive de la forme $Ue^{i(\vec{K}\vec{r}-\omega t)}$, où \vec{K} est le vecteur d'onde d'amplitude $\frac{2\pi}{\lambda}$ et $\omega = 2\pi\nu$ est la fréquence angulaire de l'onde (de fréquence ν est de longueur d'onde λ). Les conditions aux limites du cristal réduisent les valeurs possibles de \vec{K} à un certain nombre de valeurs discrètes dans l'espace des \vec{K} qui est limité par la première zone de Brillouin. Cette quantification des vecteurs d'ondes provient donc simplement de la mécanique classique.

Ensuite des considérations sur la dynamique du réseau nous permettent de trouver la fréquence associée à un vecteur d'onde par **les relations de dispersion**, en considérant les forces élastiques liant les atomes. Ces relations de dispersion peuvent aussi se mesurer

expérimentalement par des expériences de diffusions inélastiques. Ces relations nous permettent alors de calculer la densité de modes par unités de fréquence $D(\omega)$.

La mécanique quantique entre alors en jeu : l'énergie vibrationnelle d'un mode de vibration collectif de vecteur d'onde \vec{K} et de fréquence ω ne peut prendre que des valeurs discrètes $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, n s'interprète comme le nombre de phonons dans le mode de vecteur d'onde \vec{K} et de fréquence ω . Une onde sera donc constituée de n phonons d'énergie $\hbar\omega$. Les phonons sont des bosons du point de vue de la statistique quantique et ils suivent à l'équilibre thermique **une distribution de Bose-Einstein (ou loi de Planck)** : le nombre de phonons dans un mode de fréquence ω est :

$$\langle n(\omega) \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}.$$

La densité d'énergie par unité de fréquence est alors donnée par :

$$\frac{dE}{d\omega} = \hbar\omega \langle n(\omega) \rangle D(\omega) \quad (8.)$$

La densité d'états à trois dimensions se calcule en imposant des conditions aux limites périodiques sur les atomes contenus par exemple dans un cube de côté L : \vec{K} doit vérifier $e^{i(K_x x + K_y y + K_z z)} = e^{i(K_x(x+L) + K_y(y+L) + K_z(z+L))}$ et donc les K_i doivent avoir des valeurs du type $\frac{2n\pi}{L}$ et il n'y a donc qu'une valeur permise de \vec{K} par volume $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ et donc $\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$ valeurs permises par unités de volume dans l'espace des \vec{K} .

D. Le phonon est une quasiparticule.

Nous venons de voir qu'une onde élastique est formée d'un certain nombre de phonons, voyons qualitativement pourquoi ce quantum d'excitation élastique présente comme le photon une dualité onde-corpuscule et se comporte ainsi comme une quasi-particule.

La diffusion élastique d'un photon X par un cristal (ce qu'on appelle la diffraction de Bragg) est contrôlé par la loi de conservation suivante $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$ où \vec{k} est le vecteur d'onde du photon incident, \vec{k}' le vecteur d'onde du photon diffusé et \vec{G} est un vecteur du réseau réciproque.

Mais le photon peut également subir une diffusion inélastique, c'est à dire être diffusé par une onde sonore : une telle interaction peut avoir lieu car le champ de déformation élastique de l'onde sonore change la densité locale d'atomes et change ainsi l'indice de réfraction du milieu. Inversement le champ électrique de l'onde lumineuse peut créer une déformation

mécanique dans le cristal et ainsi en moduler les propriétés élastiques. En d'autres termes, un photon dans un cristal peut créer ou absorber un phonon : son vecteur d'onde passera de \vec{k} à \vec{k}' et sa fréquence de ω à ω' . Supposons qu'on ait créé dans ce processus un phonon de vecteur d'onde \vec{K} et de fréquence ω_p , **on peut alors traiter le processus comme une collision simple entre deux corps** avec conservations de l'énergie et du vecteur d'onde (dans notre cas à un vecteur du réseau réciproque près) :

$$\begin{cases} \hbar\omega = \hbar\omega' + \hbar\omega_p \\ \vec{k} = \vec{k}' + \vec{K} \quad (+\vec{G}) \end{cases}$$

Nous voyons bien sur cet exemple que comme le photon, **le phonon présente des propriétés corpusculaires.**

E. Modèle de Debye.

La densité de mode $D(\omega)$ est assez complexe à déterminer : il faut trouver ω sur un maillage assez serré de l'espace des \vec{K} et ensuite calculer le nombre de valeurs permises dans des intervalles égaux de fréquence. La figure 8 montre ce calcul pour l'aluminium

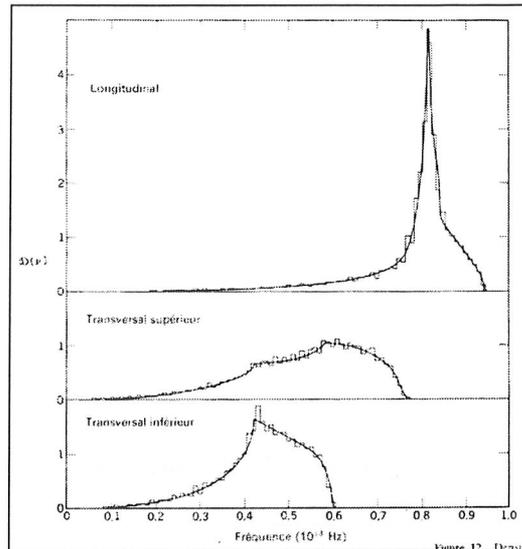


Fig8. Densité des modes de phonons pour les 3 branches de l'aluminium.

On utilise ainsi souvent l'approximation de Debye, la vitesse du son est supposée constante : on a $\omega(\mathbf{K})=v_s \mathbf{K}$. On voit sur les figures 5 et 7 que ce modèle est bien adapté aux petits vecteurs d'onde (grande longueur d'onde) et nous allons voir qu'il l'est aussi à basse température (où les phonons excités thermiquement sont de faibles énergies et donc de grande longueur d'onde).

L'approximation de Debye consiste à ignorer les branches optiques et à remplacer les relations de dispersion des 3 branches acoustiques par des relations linéaires (les vitesses du son pour chaque branche peuvent être différentes cf figure 9), mais également à intégrer ces relations sur une région sphérique (le domaine d'intégration correct est la zone de Brillouin).

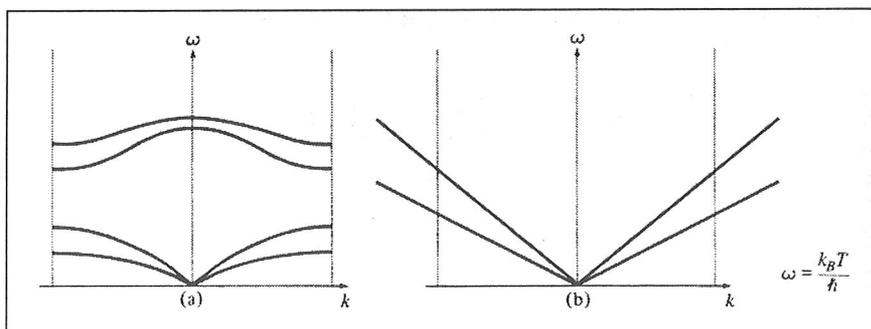


Fig9. Approximation de Debye : on ignore les branches optiques et on remplace les relation de dispersion des 3 branches acoustiques par des relation linéaires.

Le nombre total de modes (par polarisation) dont le vecteur d'onde est inférieur à \bar{K} est donc simplement $N_p = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4}{3} \pi K^3 = \frac{V}{6\pi^2} \frac{\omega^3}{v_s^3}$ (on multiplie la densité de mode par unité de volume par le volume de la sphère de rayon K , $V=L^3$ est le volume du cristal), et donc la densité de mode est :

$$D(\omega) = \frac{dN_p}{d\omega} = \frac{V}{2\pi^2 v_s^3} \omega^2 \quad (9.)$$

Bien évidemment le volume de la sphère doit être limité pour avoir exactement N_p vecteurs d'onde (nombre de mode par polarisation), on définit ainsi le vecteur d'onde de Debye K_D comme le rayon de cette sphère. K_D vérifie ainsi $N_p = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{4}{3} \pi K_D^3$ et donc :

$$\boxed{K_D^3 = 6\pi^2 \left(\frac{N_p}{3}\right)} \quad (10.)$$

On peut définir aussi une fréquence de Debye ainsi qu'une **température de Debye** :

$$\boxed{\begin{cases} \omega_D = K_D v_s \\ k_B \Theta_D = \hbar \omega_D \end{cases}} \quad (11.)$$

De (8.) et (9.) on déduit la densité (par polarisation) d'énergie par unité de fréquence à la température T :

$$\frac{dE}{d\omega} = V \frac{\hbar}{2\pi^2} \frac{1}{v_s^3} \omega^3 \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (12.)$$

$\frac{dE}{d\omega}$ est tracé sur la figure 10. On reconnaît **la loi de Stefan-Boltzmann** identique à la densité d'énergie du rayonnement d'un corps noir. La densité d'énergie est maximale pour des phonons de fréquence telle que $\hbar\omega = 2.8k_B T$.

Il faut bien avoir à l'esprit que cela n'est vrai rigoureusement qu'à l'équilibre thermique et dans l'approximation des grande longueur d'onde (donc à basse température où $\frac{T}{\Theta_D} \ll 1$).

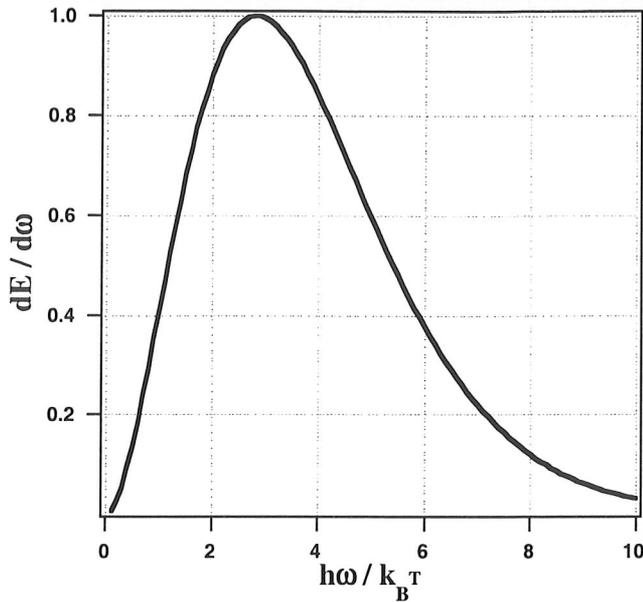


Fig10. Densité d'énergie à l'équilibre thermique en fonction de la fréquence des phonons. La courbe est normalisée, la fréquence dominante des phonons est $2.8 k_B T$.

Ainsi on a une idée de la distribution en fréquence des phonons pour une température donnée, et on peut aussi avoir une idée du peuplement des modes de phonons en fonction de la température. La figure 11 montre ainsi des spectres de Planck à 10 K et 100K ainsi que la relation de dispersion du germanium dans une direction particulière. Le tableau 1 donne pour quelques énergies typiques, les fréquences et la température de Planck correspondantes.

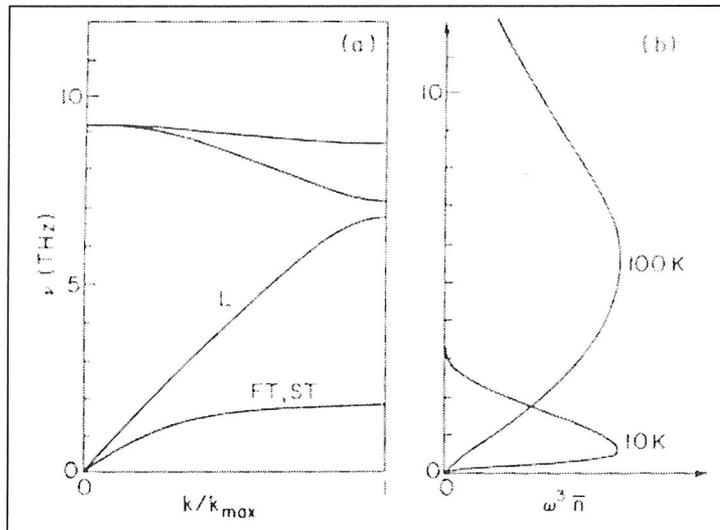


Fig11. A gauche, relation de dispersion dans la direction 111 dans le Germanium. Les branches FT et ST sont dégénérées dans cette direction. A droite, deux exemples de spectres de Planck dans l'approximation de Debye ou $D(\omega) \propto \omega^2$.

Energie	Fréquence	Vecteur d'onde	Longueur d'onde	Température de
---------	-----------	----------------	-----------------	----------------

hν (meV)	ν (GHz)	ν/v_s (m⁻¹) (v_s=5km/s)	λ_{typ} (Å) (v_s=5km/s)	Planck hν/2.8k_B (K)
4	967	1 10 ⁹	50	16.5
1	242	3 10 ⁸	200	4.1
0.25	60	8 10 ⁷	800	1

Tableau 1.

F. Capacité calorifique du réseau.

La capacité calorifique est une grandeur extrêmement importante pour un bolomètre, c'est elle que relie l'élévation de température à l'énergie déposée par une particule. Il est donc intéressant de voir qu'elle est la contribution du réseau, ceci peut-être fait très simplement dans le cadre du modèle de Debye.

Remarque : on parlera implicitement dans la suite de la capacité calorifique à volume constant (celle-ci est égale à la capacité calorifique à pression à basse température d'après le principe de Nernst).

La capacité calorifique est définie par $C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v$, or E est donnée en intégrant la relation (12.) (qu'on multiplie par 3 pour avoir l'énergie totale des 3 polarisations) :

$$E = \frac{3V\hbar}{2\pi^2 v_s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega \quad (13.)$$

En utilisant la définition de la température de Debye et en posant $x_D = \frac{\Theta_D}{T}$, (13.) devient

$$E = 9Np k_B T \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (14.)$$

Limite à basse température :

On a alors $T \ll \Theta_D$ et donc x_D tend vers l'infinie, or $\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$ et la capacité est alors

$C_v = \frac{15}{6} \pi^4 N p k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$: c'est la fameuse **loi de Debye en T^3** . Tout calcul fait, on obtient :

$$C_v = 1944 \frac{n_{\text{maille}}}{M_{\text{maille}}} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \text{ en } J.K^{-1}.g^{-1} \quad (15.)$$

n_{maille} est le nombre d'atome dans la maille élémentaire et M_{maille} la masse molaire de cette même maille. Il suffit de multiplier cette expression par la densité du cristal considéré pour obtenir la capacité calorifique en $J.K^{-1}.cm^{-3}$

Les températures de Debye données dans les tables peuvent prêter à confusion dans le cas où la maille élémentaire n'est pas simple, il faut bien faire attention de les utiliser dans une formule adéquate. Le tableau 2 donne la température de Debye pour un certain nombre d'éléments, les températures ont été obtenues en ajustant l'expression (15.) aux mesures expérimentales.

DEBYE TEMPERATURES FOR SELECTED ELEMENTS ^a			
ELEMENT	Θ_D (K)	ELEMENT	Θ_D (K)
Li	400	A	85
Na	150	Ne	63
K	100		
		Cu	315
Be	1000	Ag	215
Mg	318	Au	170
Ca	230		
		Zn	234
B	1250	Cd	120
Al	394	Hg	100
Ga	240		
In	129	Cr	460
Tl	96	Mo	380
		W	310
C (diamond)	1860	Mn	400
Si	625	Fe	420
Ge	360	Co	385
Sn (grey)	260	Ni	375
Sn (white)	170	Pd	275
Pb	88	Pt	230
As	285	La	132
Sb	200	Gd	152
Bi	120	Pr	74

Tableau 2.

G. Limite de l'approximation harmonique.

Tous les modèles que nous venons de voir rentrent dans l'approximation dite harmonique : l'expression de l'énergie potentielle a été limitée aux termes quadratiques par rapport aux déplacements relatifs des atomes.

Par exemple la force de rappel C que nous avons considérée en A. est reliée à la dérivée seconde de l'énergie potentielle U .

En effet on a $F = -C\Delta R$ (ΔR étant le déplacement relatif des atomes) mais F est reliée à

$$\text{l'énergie potentielle } U \text{ par } F = \frac{-dU}{dR} = \left. \frac{-dU}{dR} \right|_{R_0} - \left. \frac{d^2U}{dR^2} \right|_{R_0} \Delta R - \frac{1}{2} \left. \frac{d^3U}{dR^3} \right|_{R_0} \Delta R^2 + \dots$$

On a donc $C = \left. \frac{d^2U}{dR^2} \right|_{R_0}$ puisque à l'équilibre (où $\Delta R=0$ on doit avoir $F=0$).

L'approximation harmonique consiste à ne pas considérer de termes d'ordre supérieur. Cela implique par exemple qu'il n'y a aucune interaction entre les phonons parce que les modes normaux du cristal vibrent indépendamment (c'est leur définition). La théorie harmonique ne peut expliquer par exemple la dilatation thermique et une approche harmonique simple donne une conductivité thermique infinie. Les termes correctifs dans l'expression de l'énergie potentielle sont appelés termes anharmoniques, bien qu'ils soient d'importances majeures

pour de nombreux phénomènes physiques, il suffit généralement de les traiter comme de petites perturbations du terme harmonique dominant.

Par exemple l'interaction phonon-phonon qui limite la conductivité thermique peut-être décrite ainsi : la présence d'un phonon provoque une déformation élastique périodique qui va alors moduler dans le temps et l'espace (par interaction anharmonique) la constante d'élasticité du cristal. Un second phonon peut alors subir cette modulation et être diffracté. Les seuls termes harmoniques ne permettent pas de modulation acoustique (les constantes d'élasticités étant notamment indépendantes de la pression et de la température dans un tel modèle).

La figure 12 montre quelques processus d'interactions phonon-phonon possible du fait de termes anharmoniques.

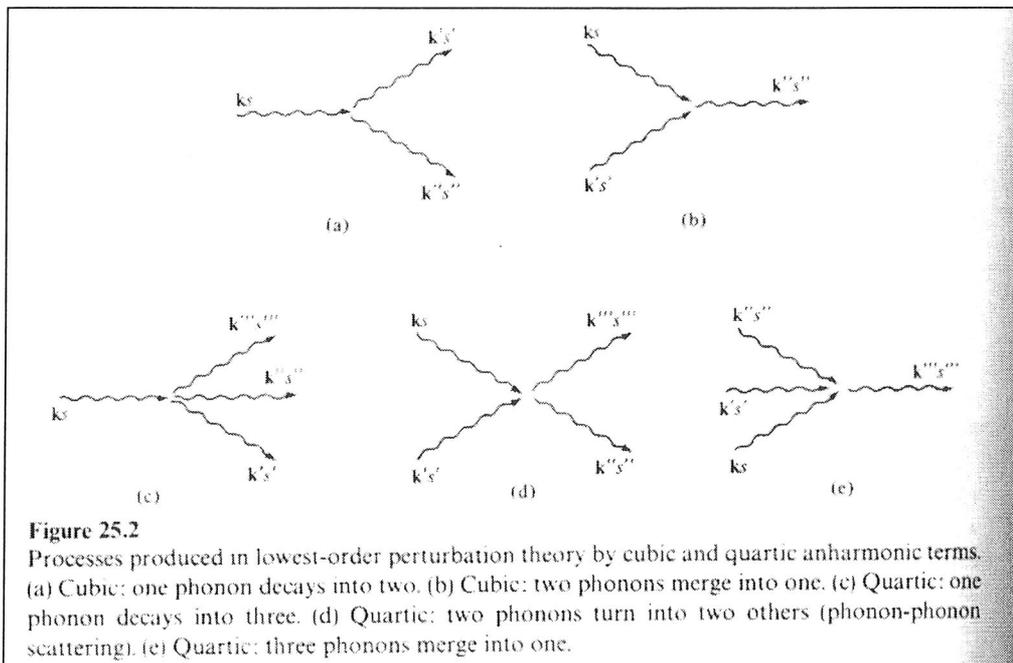


Fig12.

BIBLIOGRAPHIE

Les figures de cette introduction aux phonons sont tirées de :

- C. KITTEL, Physique de l'état solide (5^{ème} édition), Dunod, Paris (1985)
- N. M. ASHCROFT / N. D. MERMIN, Solid State Physics.

• *Donner les relations de dispersion ?*

