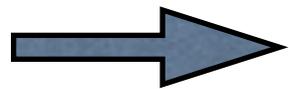


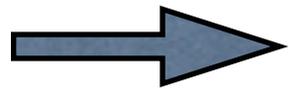
Physique Statistique (PHY432)

Amphi 11: Quantification des vibrations

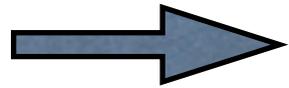
Oscillateurs harmoniques et gaz de bosons



Phonons

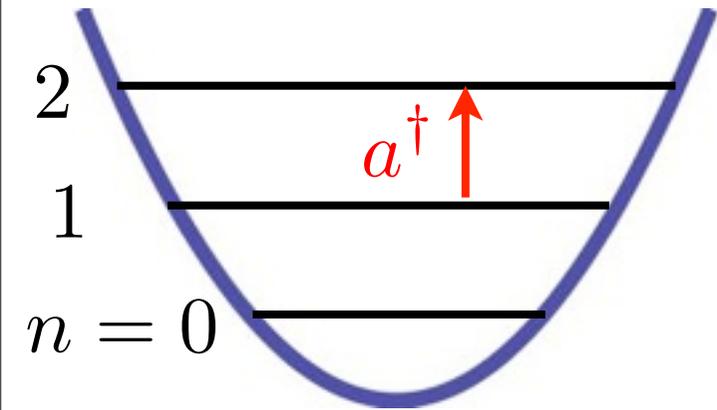


Photons et thermodynamique du rayonnement



Excitations de basse énergie dans les solides

Rappel : un oscillateur harmonique



$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Etat propre $|n\rangle$:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$
$$= E_0 + n\hbar\omega$$

Opérateurs permettant
de passer d'un état à un
état voisin:

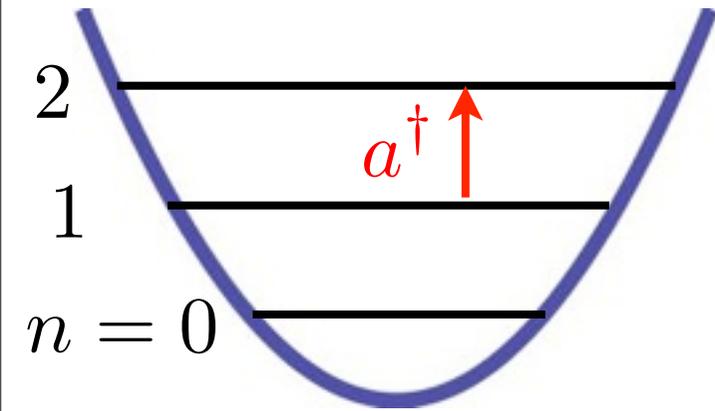
$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$
$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} \right)$$



Rappel : un oscillateur harmonique

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$



Etat propre $|n\rangle$: $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$
 $= E_0 + n\hbar\omega$

Equilibre canonique :



$$Z = \sum_n e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega} = e^{-\beta E_0} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n\hbar\omega} = \frac{e^{-\beta E_0}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}$$

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_n n e^{-\beta n\hbar\omega}}{\sum_n e^{-\beta n\hbar\omega}}$$



$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

Identique au
facteur de Bose
avec $\mu = 0$

Bosons avec un seul niveau d'énergie ω

au contact d'un réservoir avec $\mu = 0$



Equilibre grand canonique : $Z = \sum_n e^{-\beta n \hbar \omega} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}}$

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

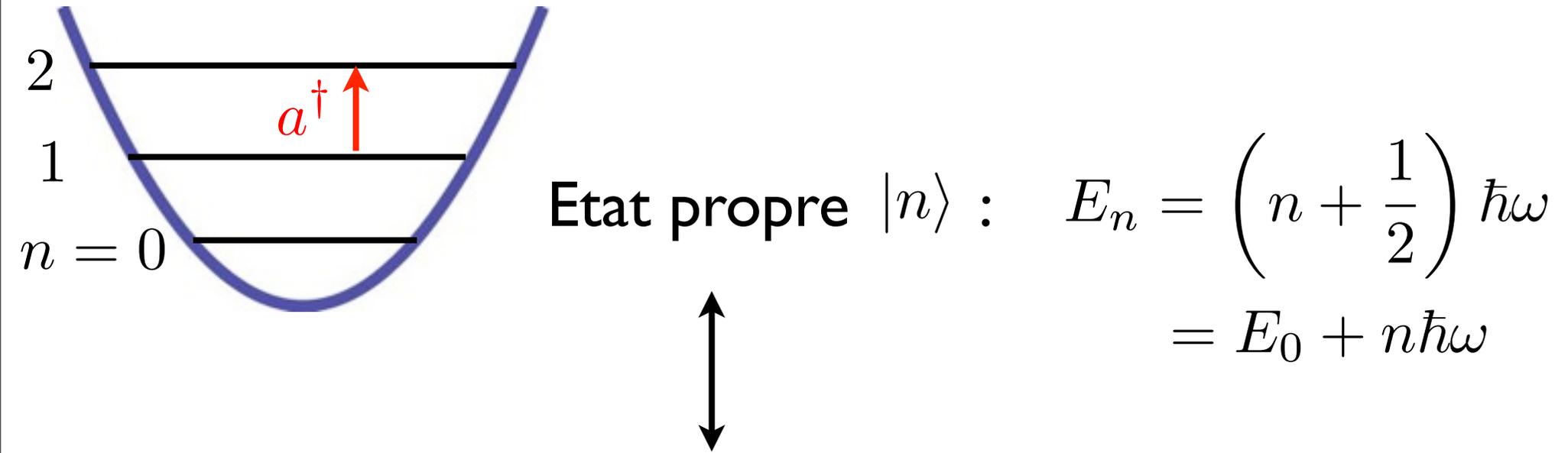
Equilibre canonique d'un oscillateur harmonique :

$$Z = \sum_n e^{-\beta (n+1/2) \hbar \omega} = e^{-\beta E_0} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \hbar \omega} = \frac{e^{-\beta E_0}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}}$$

$$\langle n \rangle = \frac{\sum_n n e^{-\beta n \hbar \omega}}{\sum_n e^{-\beta n \hbar \omega}} \rightarrow \langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

Identique au
facteur de Bose
avec $\mu = 0$

Rappel : un oscillateur harmonique



Présence de n bosons, chacun d'énergie $\hbar\omega$.

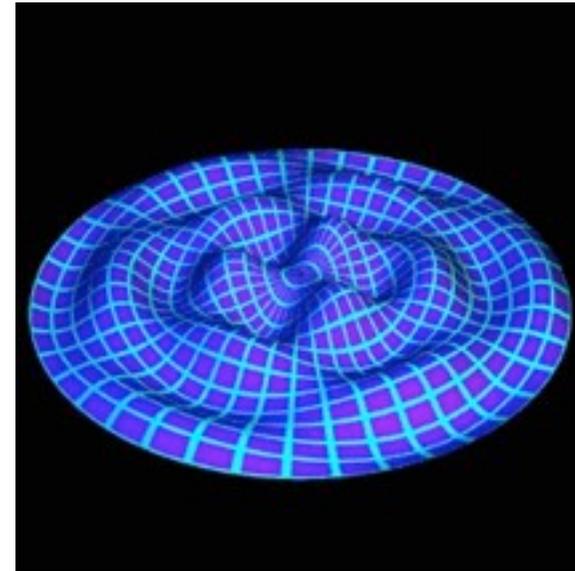
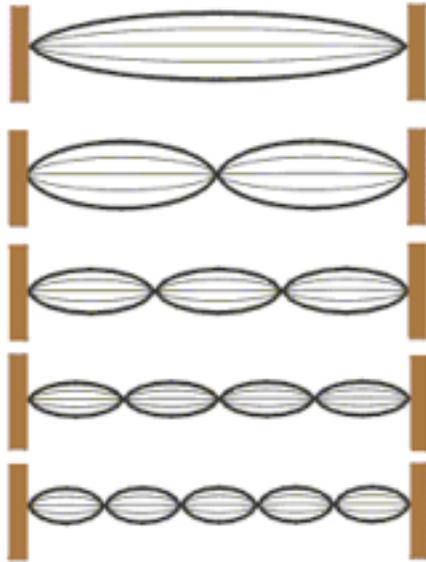
Un boson = un degré d'excitation de l'oscillateur harmonique

Phonons, photons, magnons,...

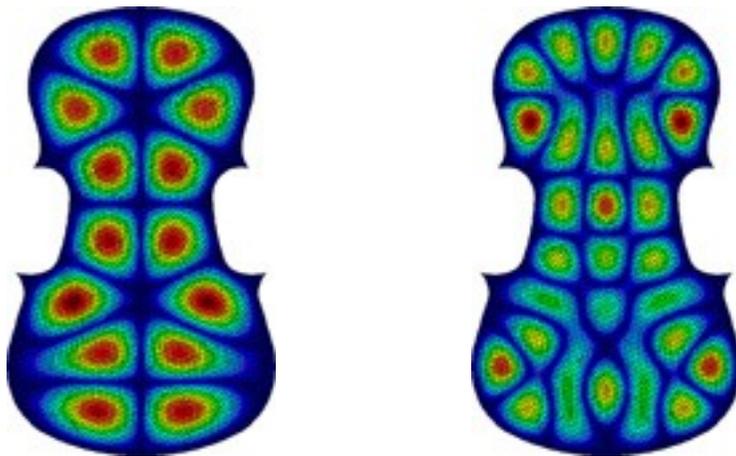
a^\dagger : opérateur de création d'un boson

a : opérateur d'annihilation d'un boson

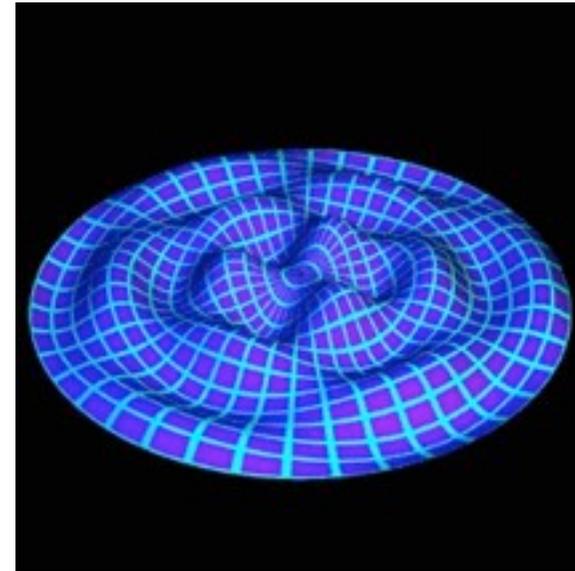
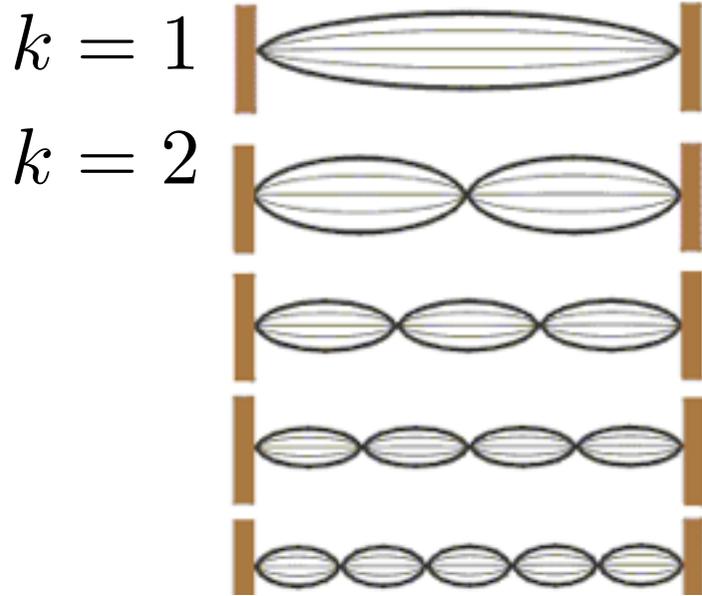
Modes de vibration des solides



Un mode propre k de vibration: pulsation ω_k



Modes de vibration des solides



Un mode propre k de vibration: pulsation ω_k

Quantification: chaque mode est un oscillateur harmonique

$$E_{n_k}^{(k)} = \left(n_k + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_k$$

Vibration des solides: ensemble d'oscillateurs harmoniques

Un mode de vibration $k \in \{1, \dots, M\}$: pulsation ω_k

Energie totale:
$$E = E_0 + \sum_{k=1}^M n_k \hbar \omega_k$$

avec $n_k \in \{0, 1, 2, \dots\}$ et
$$E_0 = \sum_{k=1}^M \frac{1}{2} \hbar \omega_k$$

Choix du zéro des énergies : $E_0 = 0$

Ensemble d'oscillateurs harmoniques

Energie totale:
$$E = \sum_{k=1}^M n_k \hbar \omega_k \quad ; \quad n_k \in \{0, 1, 2, \dots\}$$

Fonction de partition canonique:

$$Z = \sum_{n_1, n_2, \dots} e^{-\beta(n_1 \hbar \omega_1 + n_2 \hbar \omega_2 + \dots)}$$

$$= \left[\sum_{n_1} e^{-\beta(n_1 \hbar \omega_1)} \right] \left[\sum_{n_2} e^{-\beta(n_2 \hbar \omega_2)} \right] \dots$$

$$= \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_1}} \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_2}} \dots$$

$$Z = \prod_{k=1}^M \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_k}}$$

Ensemble d'oscillateurs harmoniques

Fonction de partition canonique:

$$Z = \prod_{k=1}^M \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_k}}$$

Energie libre:

$$F = \frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^M (1 - e^{-\beta \hbar \omega_k})$$

Degré d'excitation du mode k : n_k

$$P(n_k) = (1 - e^{-\beta \hbar \omega_k}) e^{-\beta n_k \hbar \omega_k}$$

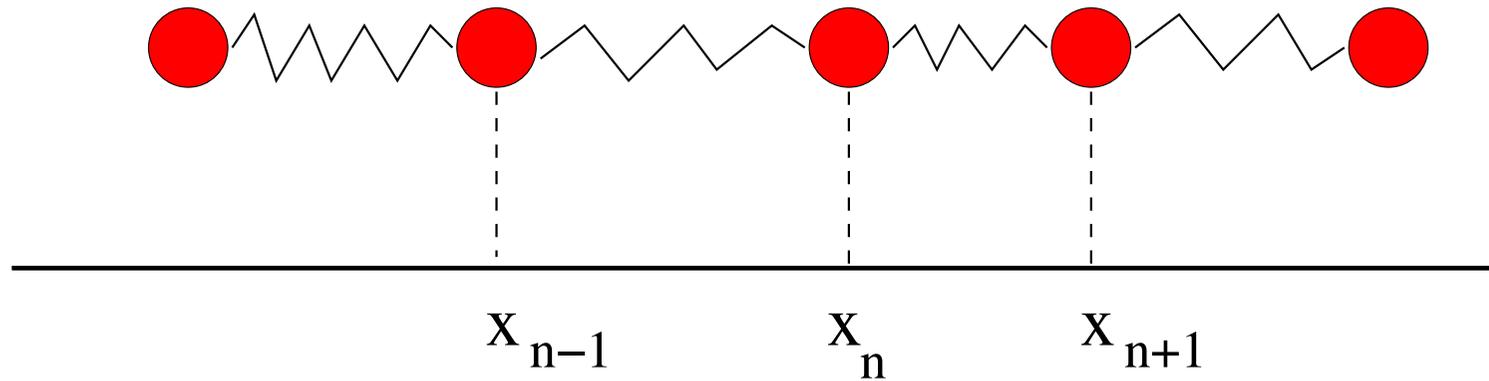
$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_k} - 1}$$

Rappel bosons :

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \hbar (\omega_k - \mu)} - 1}$$

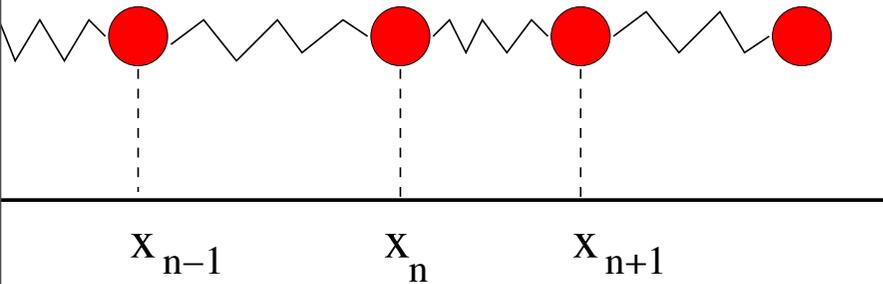
Osc. harmoniques: identique à gaz de bosons avec $\mu = 0$

Application : vibration d'une chaîne d'atomes



$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = C(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n)$$

Application : vibration d'une chaîne d'atomes



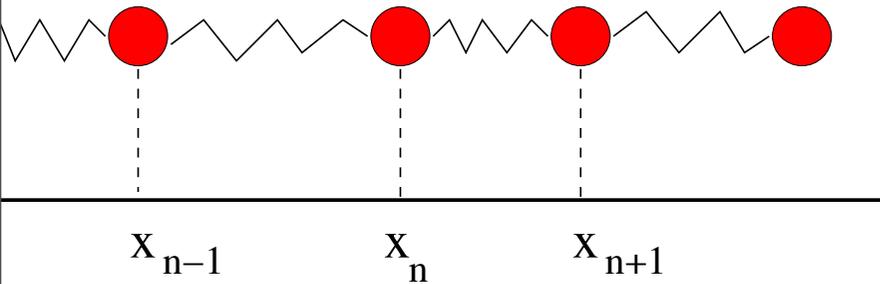
$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} = C(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n)$$

$$\frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = M \vec{x}$$

Conditions aux limites périodiques:

$$M = \frac{C}{m} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

Application : vibration d'une chaîne d'atomes



$$\frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = M \vec{x}$$

Modes propres: $x_n^{(k)}(t) = A \operatorname{Re} e^{i(kna - \omega_k t)}$

$$M \vec{x}^{(k)} = -2 \frac{C}{m} (1 - \cos(ka)) \vec{x}^{(k)}$$

Fréquence propre de vibration: $\omega_k^2 = 2 \frac{C}{m} (1 - \cos(ka))$

$$\omega_k = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \sin\left(\frac{|k|a}{2}\right)$$

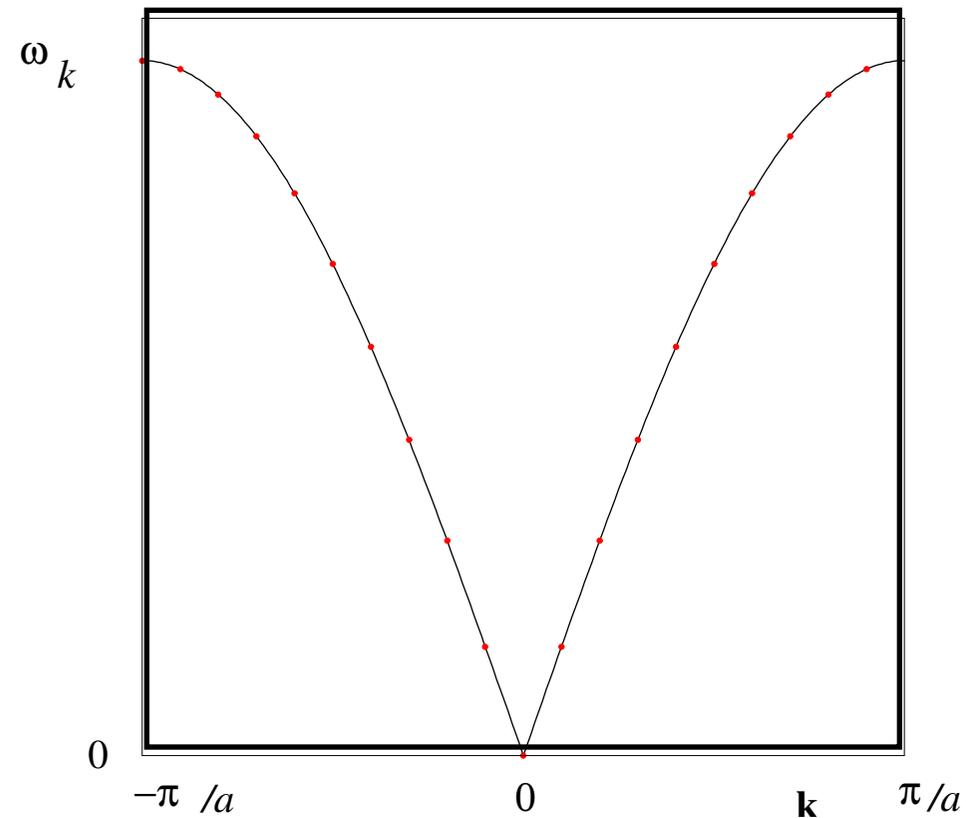
Application : vibration d'une chaîne d'atomes

$$\omega_k = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \sin \left(\frac{|k|a}{2} \right)$$

CLP: quantification de k

$$k = \frac{2\pi}{a} \frac{p}{N}$$

$$k \in \left[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right]$$



Phonons à une dimension

Modes propres: $x_n^{(k)}(t) = A \operatorname{Re} e^{i(kna - \omega_k t)}$

$$\omega_k = 2 \sqrt{\frac{C}{m}} \sin\left(\frac{|k|a}{2}\right)$$

Etat quantique de vibration:

Dans chaque mode k , degré d'excitation n_k

→ n_k phonons.

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_k} - 1}$$

Phonons à trois dimensions

Modes propres: $x_{\vec{R}_n}^{(\vec{k})}(t) = \text{Re} e^{i(\vec{R}_n \cdot \vec{k} - \omega_{\vec{k}} t)}$

Fréquence de vibration: $\omega(\vec{k}, \vec{e})$

(pour chacun des trois modes de polarisation \vec{e})

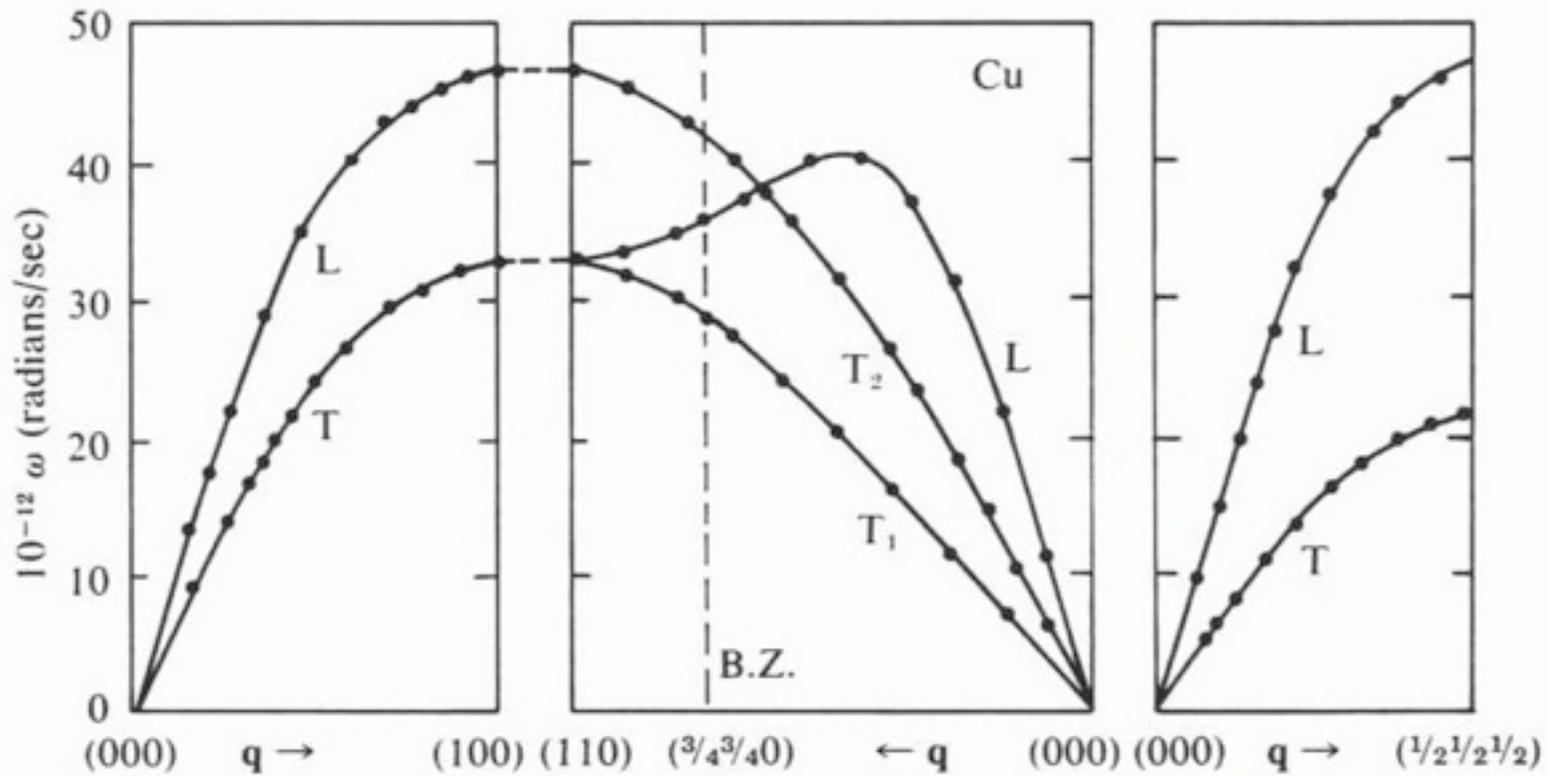
Quantification:

chaque mode (\vec{k}, \vec{e}) est un oscillateur harmonique

$$E = E_0 + \sum_{\vec{k}, \vec{e}}^M n_{\vec{k}, \vec{e}} \hbar \omega(\vec{k}, \vec{e}) \text{ avec } n_{\vec{k}, \vec{e}} \in \{0, 1, 2, \dots\}$$

$n_{\vec{k}, \vec{e}}$ 'phonons' dans le mode \vec{k}, \vec{e}

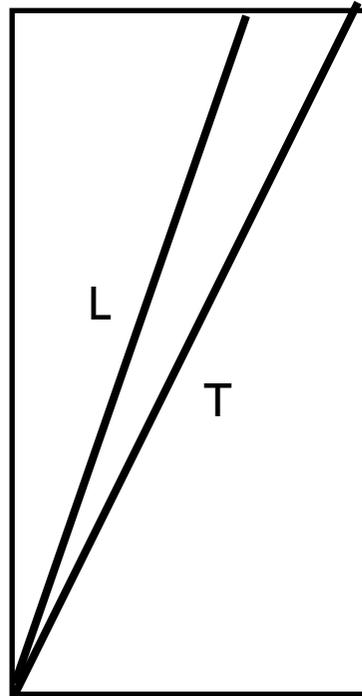
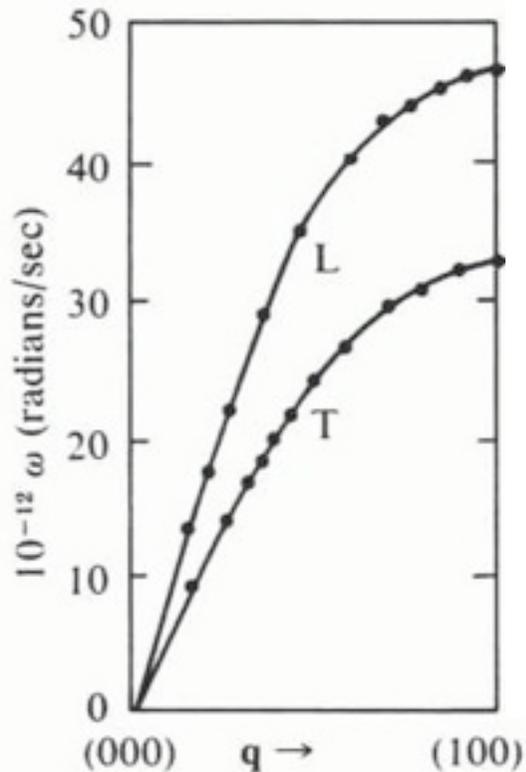
Phonons à trois dimensions



Spectre de phonons du cuivre

➡ modèle de Debye

Modèle de Debye



Approximation : $\omega = c_L |\vec{k}|$ mode longitudinal
 $\omega = c_T |\vec{k}|$ modes transverses (2)

NB: $c_L = d\omega/dk$ = vitesse du son

Modèle de Debye

$$\omega = c_L |\vec{k}| \text{ mode longitudinal (1)}$$

$$\omega = c_T |\vec{k}| \text{ modes transverses (2)}$$

Densité d'états?



Densité d'états pour un mode :

$$d\mathcal{N} = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 k$$

$$\epsilon = \hbar\omega = \hbar c |\vec{k}|$$

Entre $|\vec{k}| = k$ et $|\vec{k}| = k + dk$:

$$d\mathcal{N} = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{\epsilon^2 d\epsilon}{(\hbar c)^3}$$

Densité d'états :

$$D(\epsilon) = 4\pi \frac{V}{h^3} \left(\frac{1}{C_L^3} + \frac{2}{C_T^3} \right) \epsilon^2$$

Modèle de Debye

Densité d'états :

$$D(\epsilon) = 4\pi \frac{V}{h^3} \left(\frac{1}{C_L^3} + \frac{2}{C_T^3} \right) \epsilon^2$$



Cutoff en énergie : $\epsilon \leq \epsilon_D$

Energie de Debye ϵ_D déterminée par : $\int_0^{\epsilon_D} D(\epsilon) d\epsilon = 3N$

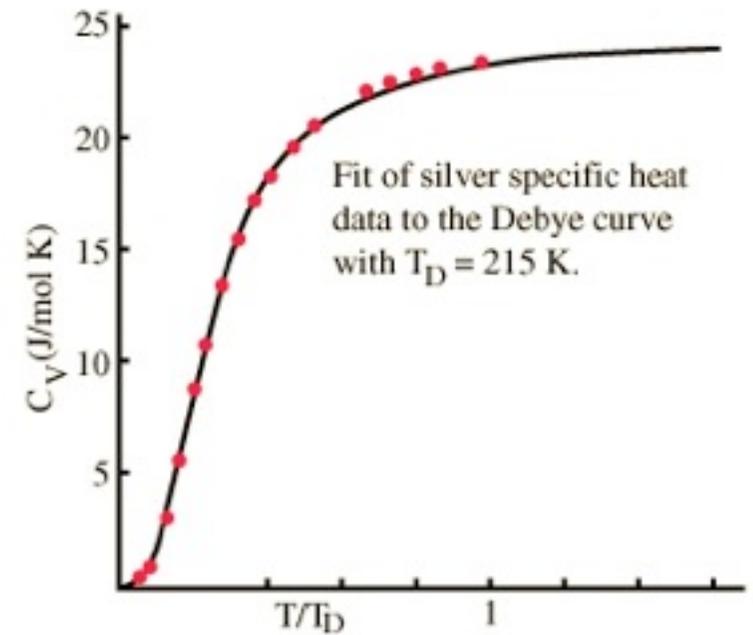
$$\Rightarrow \epsilon_D = \hbar c \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{1/3} = k\Theta_D$$

$$U = \int d\epsilon D(\epsilon) \frac{\epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1} \propto T^4 \int_0^{\Theta_D/T} dx \frac{x^3}{e^x - 1}$$

Loi de Debye

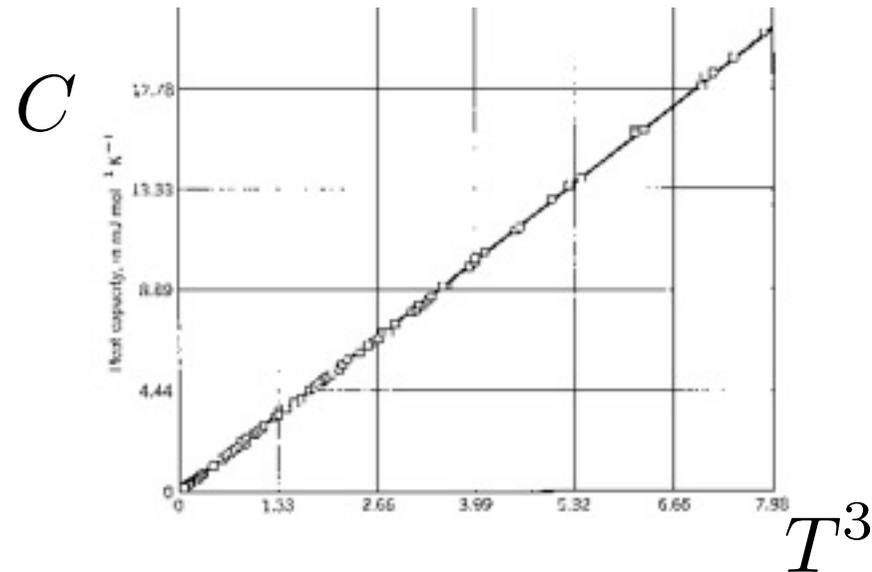
$$C = \frac{\partial U}{\partial T}$$

$$C = 9Nk \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2}$$



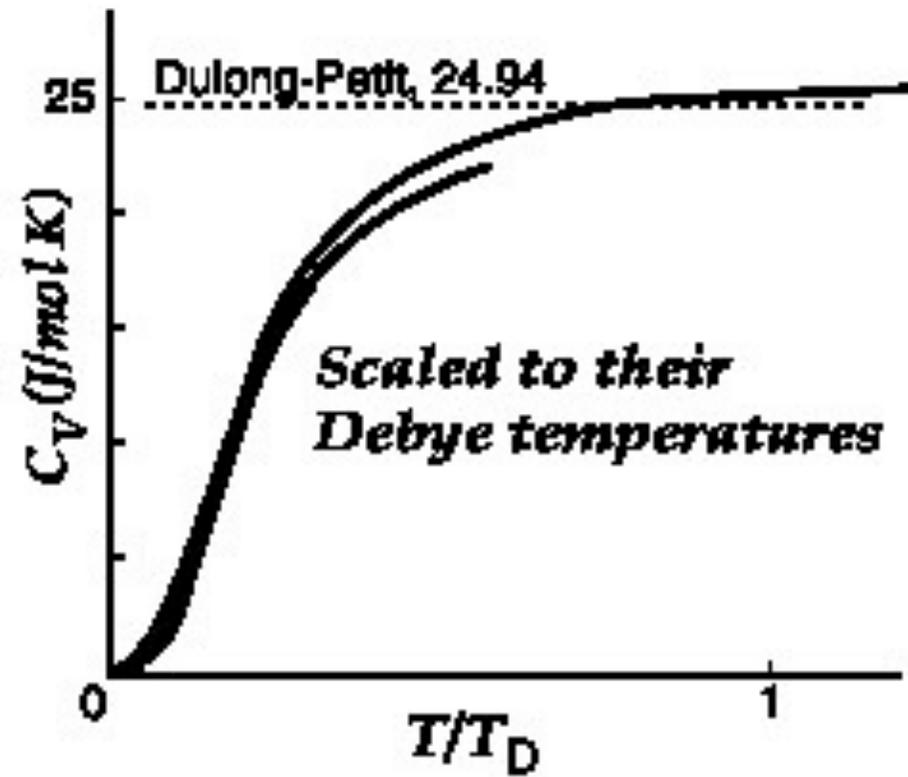
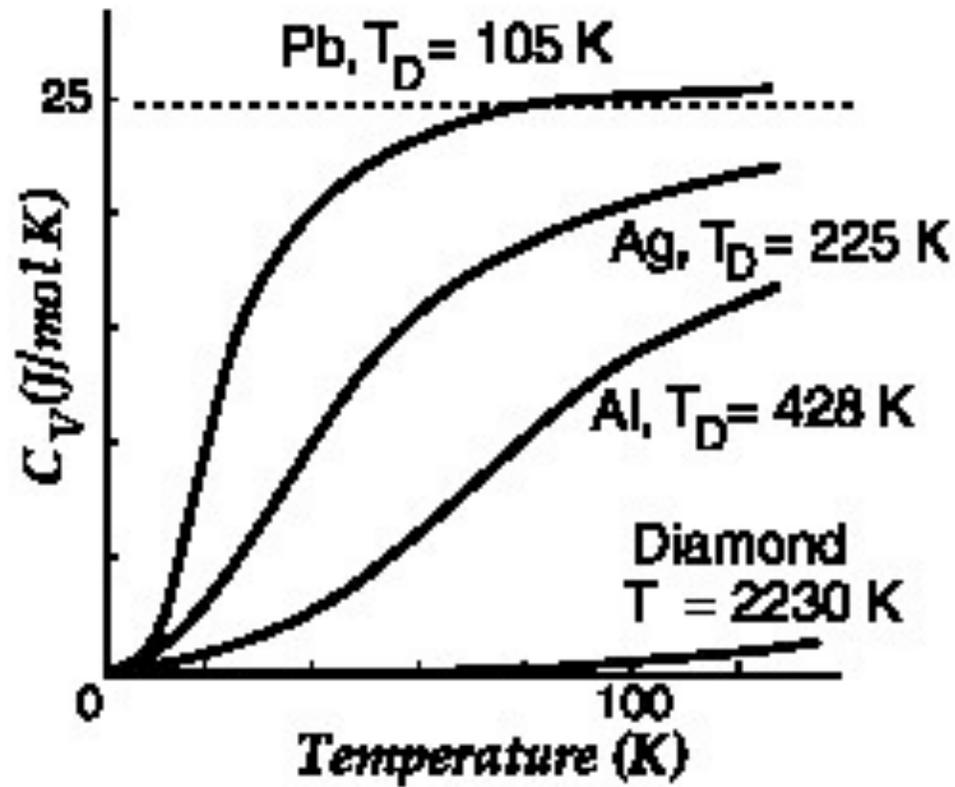
$T \gg \Theta_D$: $C \rightarrow 3Nk = 3R \simeq 25$ J/K **Dulong-Petit**

$$T \ll \Theta_D : \frac{C}{Nk} = \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3$$



NB : très différent du modèle d'Einstein ($e^{-\Theta_E/T}$) : phonons
Argon :

Loi de Debye



«Modes de vibration» du champ électromagnétique

Maxwell dans le vide $\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right) \mathcal{S}(\vec{r}, t) = 0$

Etats propres de Δ , boîte L^3

$$f_{\vec{k}}(\vec{r}) \propto \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)$$

avec $k_{x,y,z} = n_{x,y,z} \frac{\pi}{L}$ et $n_{x,y,z} \in \mathbb{N}$

Mode propre de vibration $f_{\vec{k}}(\vec{r})$; fréquence : $\omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}|$

Photons

Mode propre de vibration $f_{\vec{k}}(\vec{r})$; fréquence : $\omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}|$

Quantiquement : chaque mode est un oscillateur harmonique

$n_{\vec{k}}$ = nombre de photons dans le mode \vec{k}

Un photon : $E = \hbar\omega_{\vec{k}}$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

$E = c|\vec{p}| = \sqrt{m^2c^4 + \vec{p}^2c^2}$: masse $m = 0$

$n_{\vec{k}}$ photons : $E = E_0 + \sum \vec{k} n_{\vec{k}} \hbar\omega_{\vec{k}}$

Densité d'états des photons

Energie de point zéro : $E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \hbar c |\vec{k}|$ renormalisée à zéro

Densité d'états entre \vec{k} et $\vec{k} + d^3 k$: $d\mathcal{N} = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 k$

$\epsilon = \hbar c |\vec{k}|$ donc $D(\epsilon) = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \epsilon^2$

En fréquence ($\epsilon = h\nu$) : $D(\nu) = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2$

(physique classique)

Energie du rayonnement, calcul classique (Rayleigh)

Densité de modes du rayonnement à la fréquence ν :

$$D(\nu) = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2$$

Rayonnement à l'équilibre, température T

Equipartition = kT par mode (deux degrés de liberté quadratiques).

Densité d'énergie du rayonnement par unité de fréquence et de volume :

$$u(\nu) = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 kT$$

Bon accord avec l'expérience à fréquences basses ($h\nu \ll kT$).

Faux pour $h\nu > kT$, et prédit $\int d\nu u(\nu) = \infty$

Distribution d'énergie du rayonnement

Planck (1901) : suppose que l'énergie du rayonnement, dans chaque mode de fréquence ν est quantifiée en multiple d'une énergie de base $h\nu$

→ calcul de l'oscillateur harmonique quantique

Densité de modes par unité de fréquence : $D(\nu) = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2$

Nombre moyen de photons dans un mode : $\frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1}$

Energie de chacun : $h\nu$

$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{(e^{\beta h\nu} - 1)}$$

Loi de Planck

Densité d'énergie par unité de fréquence et de volume

Loi de Planck

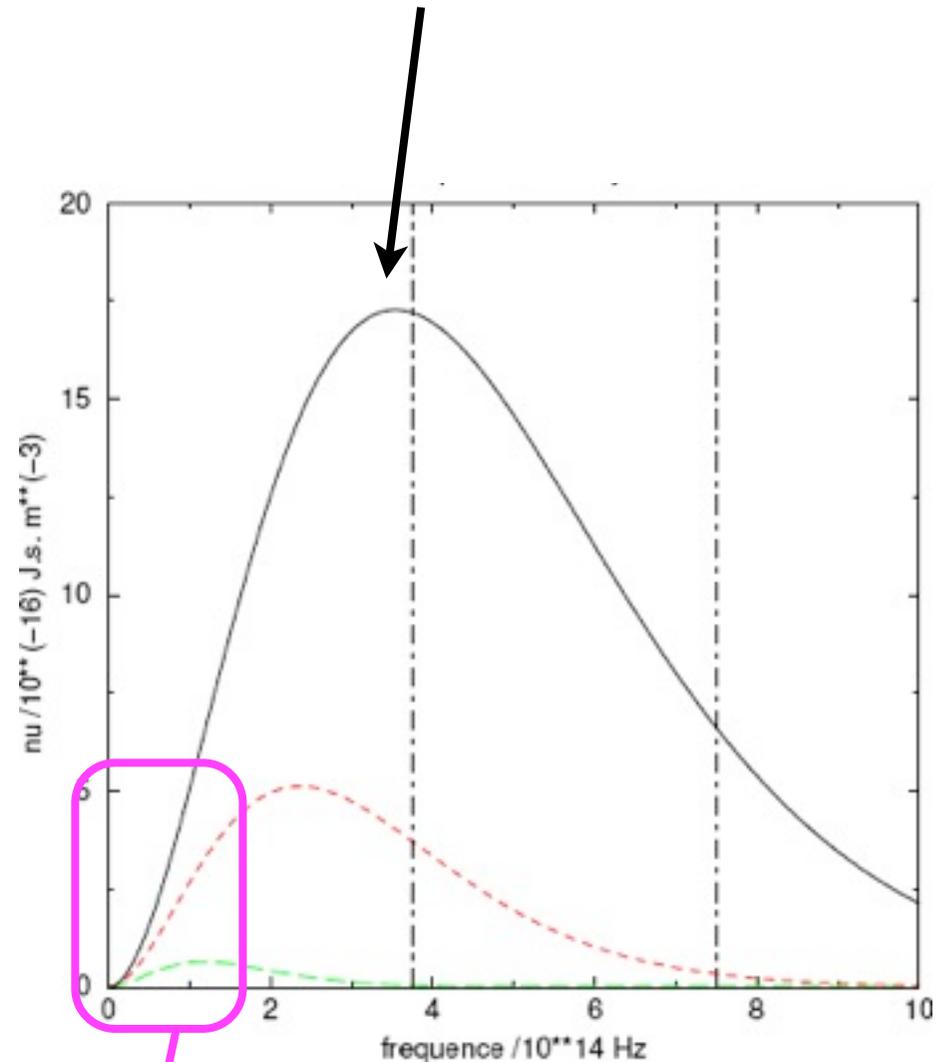
$$u(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\beta h\nu} - 1}$$

Fit de Planck!

$T = 2000, 4000, 6000K :$

NB : $3 \cdot 10^{14} \text{ Hz} = 1 \mu\text{m}$

Maximum en $\nu = 2,82 \frac{kT}{h}$



$\propto \nu^2 T$ (Rayleigh)



Température $T \sim 1200K$

Soleil : Température $T \sim 6000K$

Thermodynamique du rayonnement

Energie libre (bosons $\mu = 0$) :

$$F = \frac{1}{\beta} \int_0^\infty d\epsilon \mathcal{D}(\epsilon) \log [1 - e^{-\beta\epsilon}] = -\frac{\pi^2}{45} \frac{V(kT)^4}{(\hbar c)^3} = -pV$$

$$S = k \frac{4\pi^2 V (kT)^3}{45(\hbar c)^3} \quad ; \quad U = \frac{\pi^2 V (kT)^4}{15(\hbar c)^3}$$

Loi de Stefan : émission par un corps noir de surface A

$$I = \sigma T^4 A \quad \text{avec} \quad \sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 \hbar^3 c^2} \simeq 5.6 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$$

Constantes universelles

Planck 1901 : Obtenir k^4/h^3 à partir de σ et k/h
à partir du maximum de $u(\nu)$...

La loi de Stefan et nous



Polytechnicien moyen :

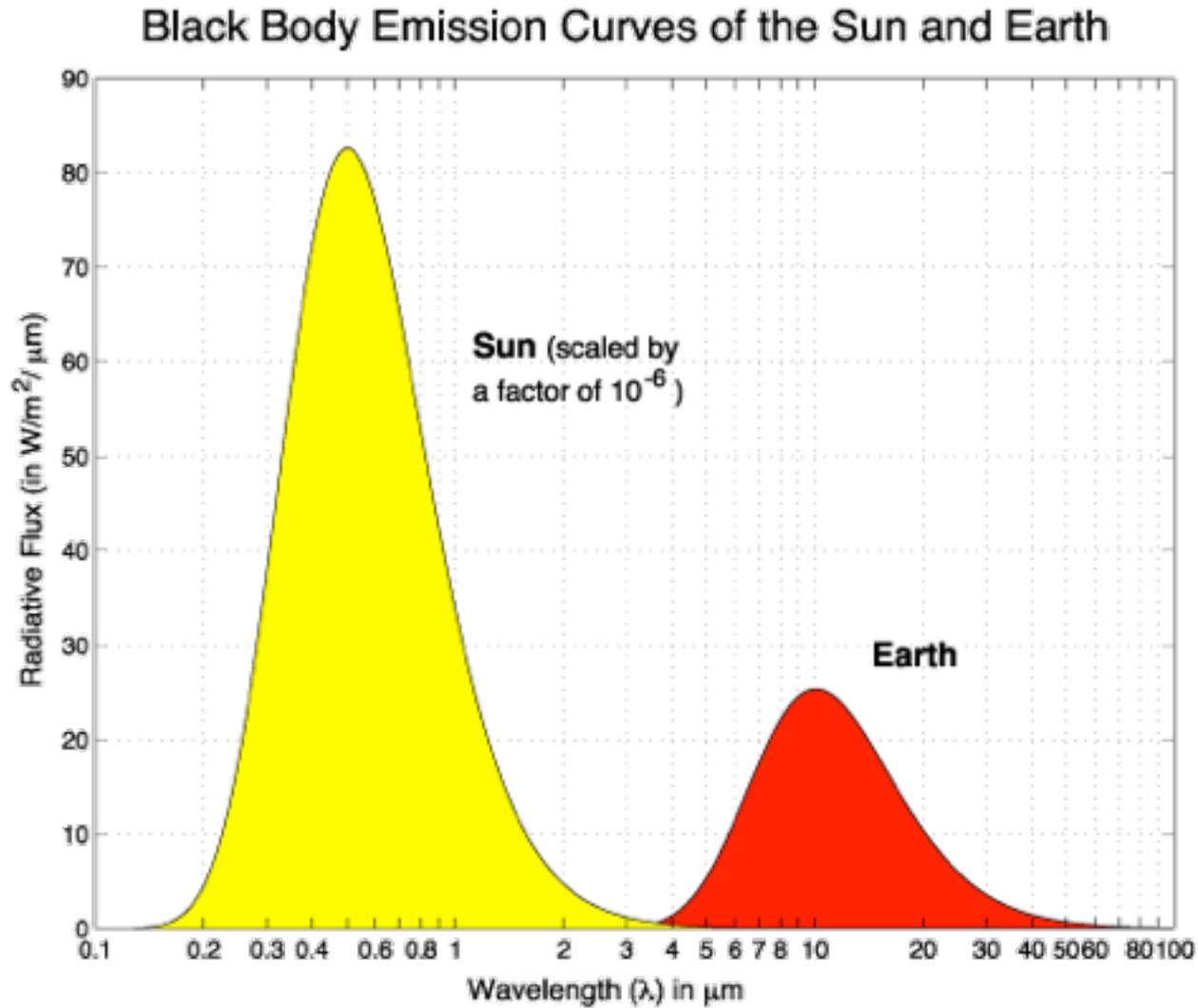
$$S = 1,5m^2; T \simeq 310K; \text{ émet } 786W.$$

Reçoit $\sigma T_e^4 S$ de l'extérieur $T_e \simeq 295K$

$$\text{Bilan : } P = \sigma(T^4 - T_e^4)S \simeq 140W.$$

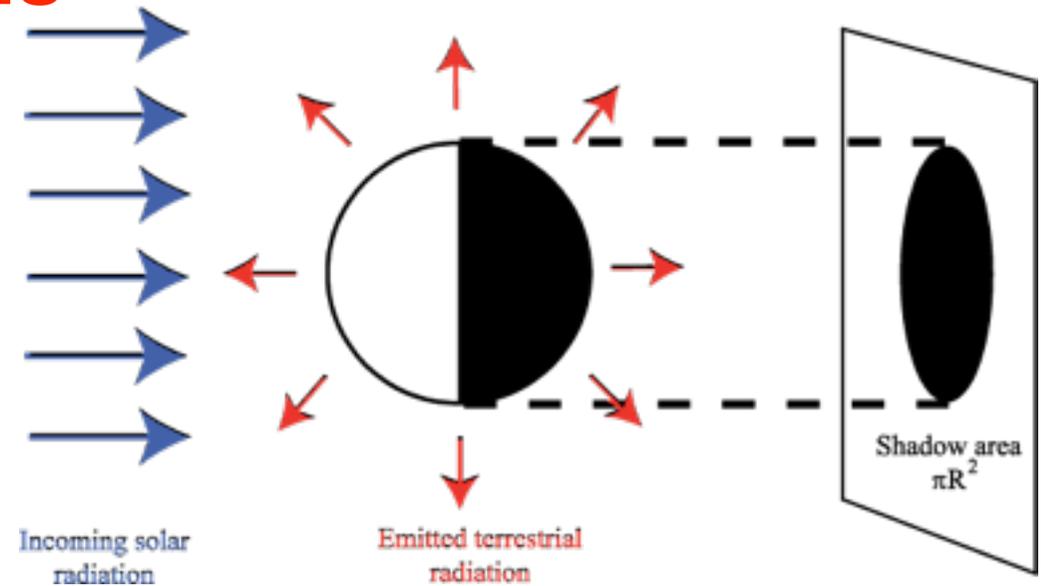
En fait $\simeq 100W$

La loi de Stefan et nous



Au sommet de l'atmosphère : $S_0 = 1400 W/m^2$

La loi de Stefan et nous



Au sommet de l'atmosphère : $S_0 = 1400 \text{ W/m}^2$
(perpendiculaire)

Flux reçu : $\pi R^2 S_0 (1 - \alpha_p)$ (Albedo $\alpha_p \sim .3$)

Température effective $4\pi R^2 \sigma T_e^4 = \pi R^2 S_0 (1 - \alpha_p)$

→ $255K$. En fait, effet de serre → $288K$

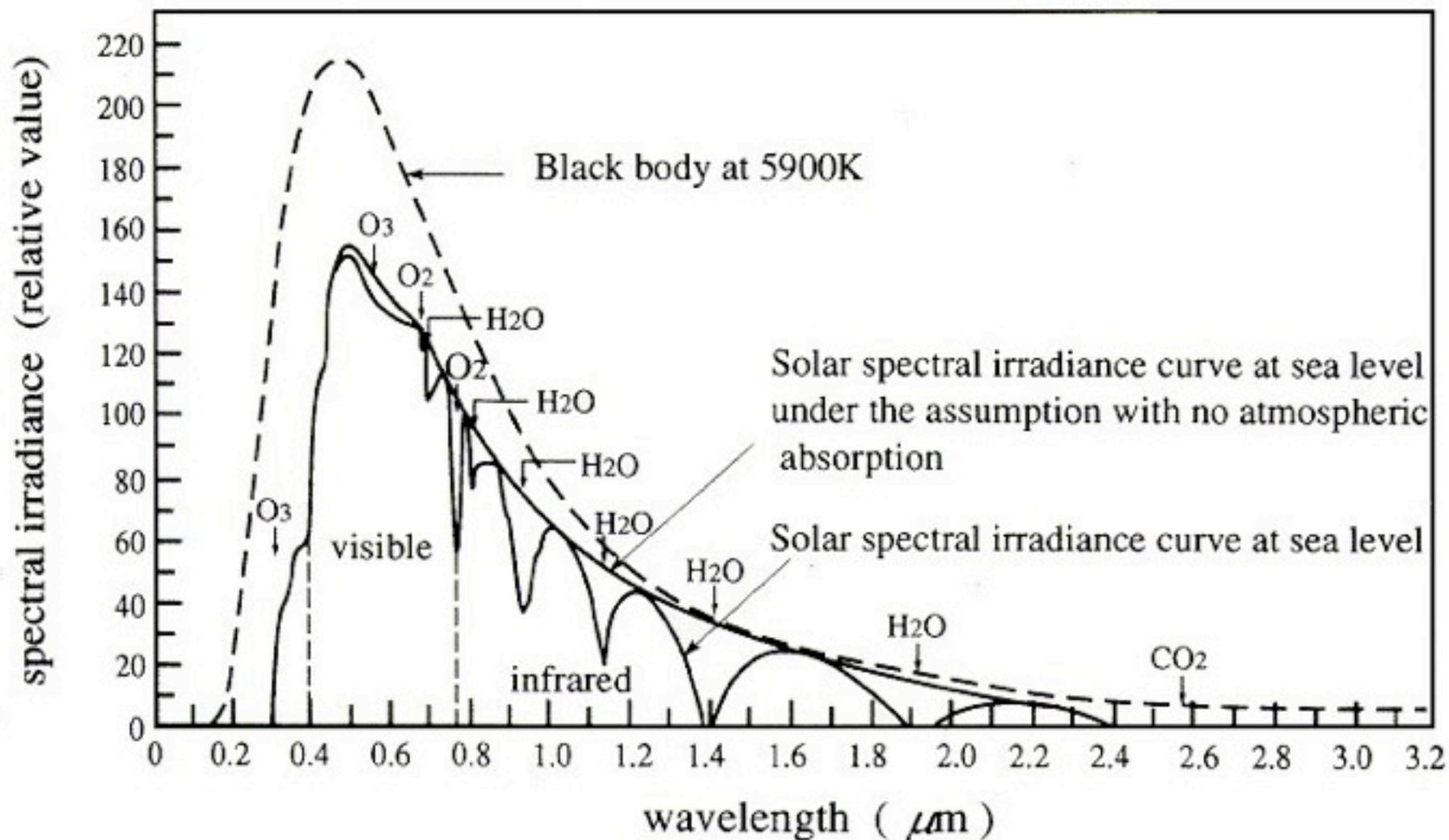
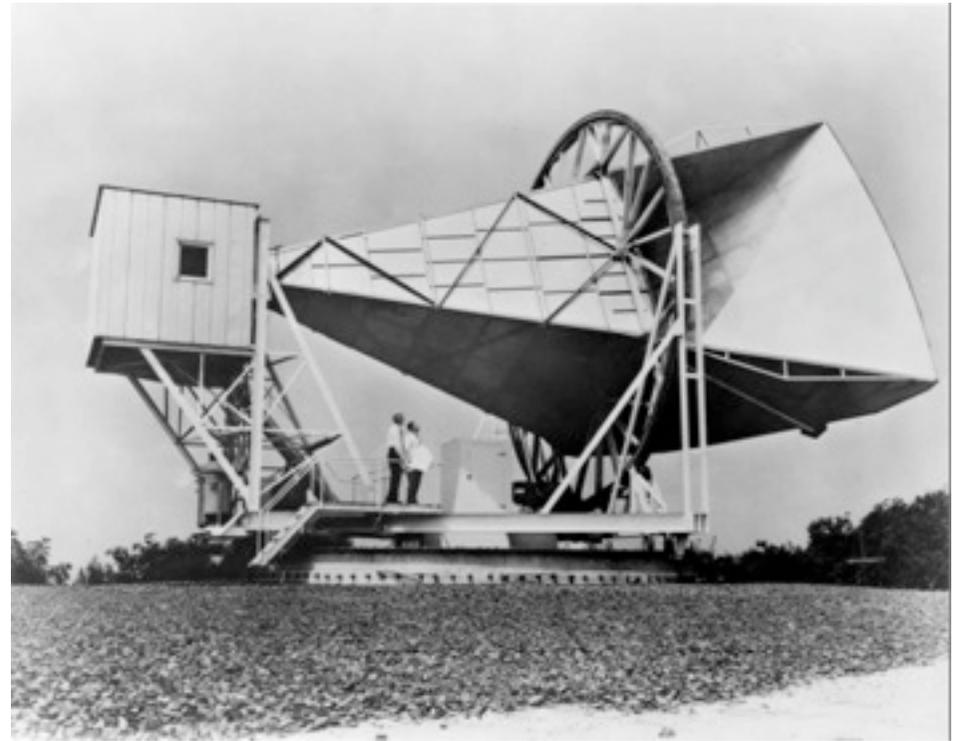


Figure 1.10.2 Comparison of spectral irradiance of solar light at sea level with black body radiation

Une anecdote

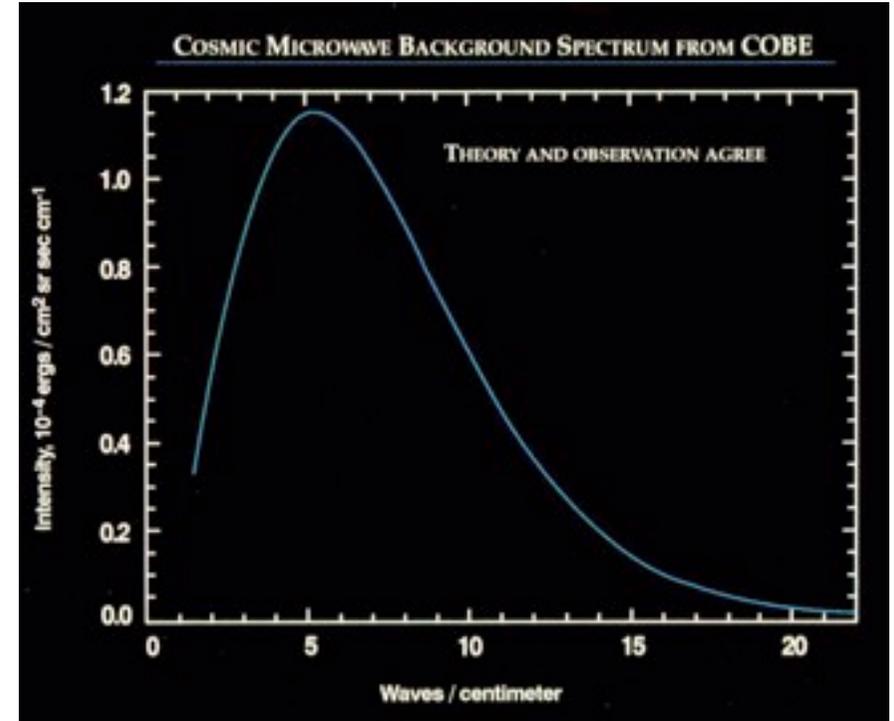
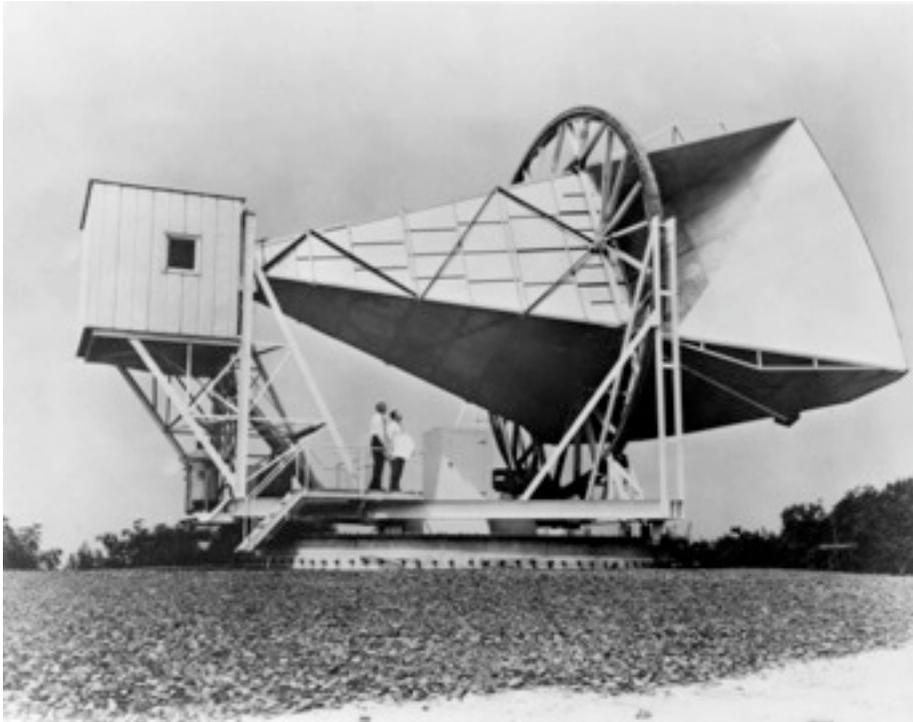
Penzias Wilson 1965 :
Une antenne pour
communiquer avec Telstar,
satellite de communication.



Ondes centimétriques ($\lambda \sim 7cm$)

Signal soustrait des radars, radios, ... refroidi à
4K ... Mais **bruit anormal**, isotrope nuit et jour

Rayonnement fossile



Penzias Wilson 1965 :
Rayonnement de
l'univers

$$T = 2,73K$$

Rayonnement fossile

Rayonnement de l'univers

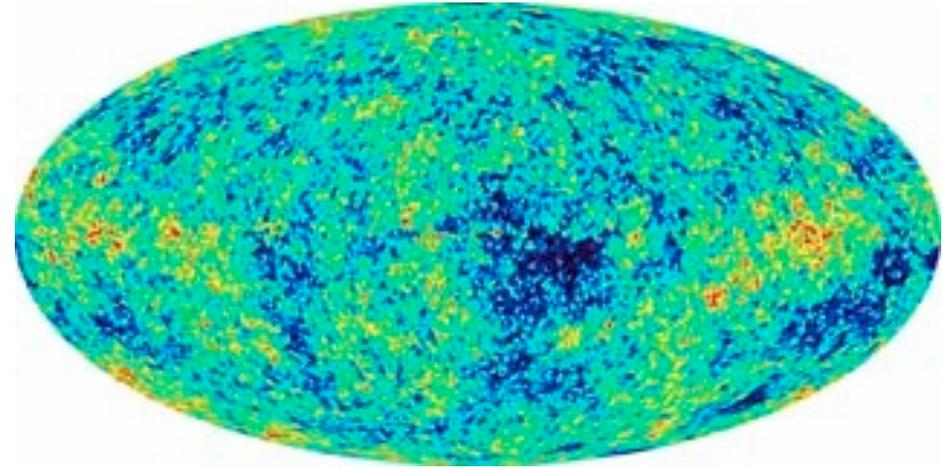
$$T = 2,73K$$

Découplage des photons et de la matière 400000 ans après BB : $T = 3000K$

Expansion depuis $S = C^{te}$
donc $VT^3 = C^{te}$

Rayon multiplié par 1000.

Prédiction Gamow Alpher 1948



WMAP :

Petits anisotropies $\sim 10^{-5}$:
information sur l'univers
primordial



Satellite Planck

Une sorte de résumé

Hypothèse microcanonique : Tous les microétats d'énergie E sont équiprobables, et $S = k \log W(E)$.

➔ Dénaturation de l'ADN, basculements d'opinion, enrichissement de l'uranium, compression de données, transitions de phases, voyageur de commerce, théorie de l'information, codes correcteurs d'erreurs, étoiles à neutrons, conducteurs isolants et semi-conducteurs, condensation de Bose, supraconductivité, loi de Planck du rayonnement, rayonnement fossile de l'univers...

Mécanique Quantique+ Physique Statistique : les deux piliers de la physique moderne. Applications les plus diverses...

N'oubliez pas ... le contrôle

Le contrôle aura lieu le 1er juillet de 9h à 12h. Il portera essentiellement sur le cours de physique statistique. Il pourra également faire appel aux principaux résultats de mécanique quantique vus lors des 7 premiers amphis du cours PHY432.

Documents autorisés : cours de mécanique quantique et physique statistique, copies de transparents, notes personnelles de PC, calculatrices, traducteurs.