

## **Introduction**

---

*Responsables* : Stéphane Pailhès

*Laboratoire* : Institut Lumière et Matière (UMR5306)

*E-mail* : [stephane.pailhes@univ-lyon1.fr](mailto:stephane.pailhes@univ-lyon1.fr)

*Durée du module* : 3h

## **Objectifs**

L'objectif de ce module est d'introduire les concepts microscopiques de la dynamique vibrationnelle des atomes, *i.e.* les phonons, dans l'objectif de comprendre les mécanismes de la conduction thermique réseau. Dans un premier temps, nous nous intéresserons à la quantification des modes de vibrations dans un cristal, les phonons. Les courbes de dispersion des phonons dans l'espace des phases en vecteur d'onde et en énergie seront dérivées dans des cas simples et reliées aux propriétés mécaniques et acoustiques. Nous utiliserons alors des modèles microscopiques simples (Debye et Einstein) pour dériver les propriétés thermodynamiques à l'équilibre. Les principaux processus de diffusion des phonons seront introduits afin de pouvoir déterminer la conductivité thermique dans le cadre de l'approximation du temps de relaxation de l'équation de Boltzmann. Sur le plan expérimental, nous introduirons les principaux outils spectroscopiques permettant de sonder les états de phonons. Enfin, nous passerons en revue les approches théoriques donnant accès aux énergies et temps de vie des phonons.

Le module inclut un TD permettant l'application des concepts introduits lors de ce cours et formant à l'utilisation de logiciel simples.

## **Contenu - cours**

1. Quantification des vibrations atomiques dans un cristal
2. Propriétés thermiques du gaz de phonons
3. Processus de diffusions des phonons, analyse de la conductivité thermique
4. Mesures spectroscopiques des phonons

## **Contenu – Travaux dirigés**

*Pour le TD, nous choisirons le cas d'un cristal ayant une structure cristallographique complexe tel qu'un clathrate. Nous utiliserons tout d'abord les modèles simples pour dériver la dépendance en température de la chaleur spécifique. Enfin, nous ferons les calculs directement à partir de mesures expérimentales des courbes de dispersions des phonons. Enfin, nous évaluerons les différents termes de diffusion des phonons afin d'identifier les termes principaux en fonction de la température. Cela nous permettra de calculer la conductivité thermique.*