



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique

Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi -Tébessa
Faculté des Sciences Exactes et Sciences de la Nature et de
la Vie

Département : Sciences de la Matière



N d'ordre :.....

Série :.....

Mémoire

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de

Master

Domain : *Physique*

Option : *Physique des matériaux*

Thème

Détermination des propriétés thermiques q-déformée d'un solide cristallin

par :

Brahmi Lynda

Devant le jury

Dr. Chaouche Yassine	Président	Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi -Tébessa
Pr. Boumali Abdelmalek	Rapporteur	Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi -Tébessa
Dr. Messai Nadjette	Examineur	Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi -Tébessa

Date de Soutenance : 13 Juin 2023

© *Mémoire effectué au*
Laboratoire de Physique Appliquée et Théorique



Détermination des propriétés thermiques q-déformée d'un solide cristallin

Brahmi Lynda

13 Juin 2023

ملخص

الهدف من هذا العمل, هو دراسة الخصائص الحرارية للأجسام الصلبة عن طريق تطبيق الجبر q . حيث تستند دراستنا على كل من نموذج أينشتاين وديباي. واكتشاف تأثير المعامل q على الديناميكا الحرارية للعنصر الكيميائي, حيث كشفت النتائج أن المعامل q يعمل كعامل اضطراب أو شوائب مما يعدل في خصائص البنية البلورية.

Abstract

We study the thermodynamics of a crystalline solid by applying q -deformed algebras. We start our study from the Einstein and Debye models, mainly exploring q thermal and electrical conductivities as a function of Debye specific heat. The results revealed that q deformation acts as a disorder or impurity factor, modifying the characteristics of a crystalline structure.

Résumé

L'objectif de ce travail est d'étudier les propriétés thermiques des solides en appliquant l'algèbre q . Notre étude est basée sur les modèles d'Einstein et de Debye. Nous avons découvert l'effet du facteur q sur la thermodynamique de l'élément chimique, les résultats ont révélé que le facteur q agit comme un facteur de perturbation ou d'impureté modifiant les caractéristiques de la structure cristalline.

Dédicace

*A mes chers parents, ma mère et mon père .
A mes sœurs ,
A mes frères ,
A ma famille ,
A tous mes amis ,
A tous mes collègues ,
A tous mes enseignants,*

A tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin, je dédie ce modeste travail.

Remerciements

Ce travail a été réalisé dans le cadre d'un projet de recherche, pour obtenir le diplôme de master en physique des matériaux de à l'Université Echahid Chikh Larbi Tébessi-Tébessa-. Avant tout, je remercie ALLAH tout puissant de nous avoir donné la volonté et le courage de mener à bien ce travail.

J'adresse mes sincères remerciements à mon encadreur le *Pr. Abdelmalek Boumali* pour m'avoir proposer mon sujet qui est aussi intéressant et riche et de m'avoir encadré pendant cette année. Je le remercie pour son savoir-faire, ses conseils, sa disponibilité et sa patience et aussi pour ses qualités scientifiques et humaines et Je le remercie pour ses discussions sympathiques et encourageantes . qui a contribué à la richesse de mon travail. J'exprime mes remerciements à *Dr. Yassine Chaouche*, Docteur à l'Université Echahid Chikh Larbi Tébessi-Tébessa-, pour l'honneur qu'il me fait en présidant le jury de mon mémoire.

Je remercie vivement *Dr. Nadjette Messai*, Docteur à l'Université Echahid Chikh Larbi Tébessi-Tébessa-, qui a accepté d'être examinateur de ce modeste travail . Que ses remarques et ses critiques soient les bienvenues. Nous tenons également à exprimer notre gratitude aux nombreuses personnes qui nous ont apporté leur aide précieuse avec beaucoup de gentillesse.

Je voudrais remercier *Bouzenada Abdelmalek* pour son aide, conseillé et même supporté et pour ces qualité humaines. Je ne crois pas me tromper en disant que ses soutient a une valeur inestimable, je le remercie chaleureusement.

Je ne peux terminer sans remercier ma famille pour le constant et précieux soutien, moral et matériel, qu'ils m'ont apporté tout au long de mes études. À Mon Père qui m'a appris les valeurs d'honneur, de respect, de modestie, de sincérité et d'amour du savoir illuminant le chemin de ma vie. À Ma Mère qui a su m'épauler chaque jour de ce modeste travail qui a su respecter mes décisions, qui m'a constamment encouragée dans les moments difficiles. MERCI! ... MERCI!....

TABLE DES MATIÈRES

ملخص	i
Abstract	ii
Résumé	iii
Dédicace	iv
Remerciements	v
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES TABLEAUX	ix
LISTE DE FIGURES	xi
Introduction	1
1 Rappel sur les propriétés thermiques d'un solide cristallin	4
1.1 L'équation de Schrödinger	4
1.2 La seconde quantification	5
1.2.1 Espace de Fock	5
1.2.2 Les opérateurs de création et d'annihilation	6
1.3 L'oscillateur harmonique unidimensionnel	7
1.3.1 Calcul des vecteurs propres	7
1.3.2 Les solutions dans le cadre de la théorie de la seconde quantification	8
1.4 Les propriétés thermodynamiques	10

1.5	Les propriétés thermiques d'un solide	13
1.5.1	Détermination de la capacité thermique	14
1.5.2	La densité des modes en trois dimensions	15
1.5.3	La théorie d'Einstein	16
1.5.4	La théorie de Debye	17
1.5.5	La conductivité thermique	21
1.5.6	La loi de Wiedemann et Franz	22
2	L'oscillateur harmonique q-déformé	24
2.1	Préambule	24
2.2	La mécanique quantique q-déformée	24
2.3	L'équation de Schrödinger q-déformée	26
2.4	L'oscillateur harmonique q-déformé	28
3	Le modèle de Debye q-déformé d'un solide cristallin : solutions exactes	32
3.1	Modèle d'Einstein	32
3.1.1	Les propriétés thermodynamiques q-déformées	34
3.2	Modèle de Debye	36
3.3	La conductivité thermique et électrique	44
4	Le modèle de Debye q-déformé d'un solide cristallin : solutions approximatives	46
4.1	L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique q-déformé	46
4.2	La fonction de partition	47
4.3	L'énergie totale	50
4.4	Discussion des résultats	51
4.4.1	La chaleur spécifique	51
4.4.2	La conductivité thermique	55
	Conclusion et Perspective	56
A	Le formalisme q-déformé	61
A.1	q-Produit (q-product)	61
A.2	q-Somme (q-sum)	62
A.3	q-dérivée et q-intégrale	64
A.3.1	Propriétés de la q-dérivée	65
A.4	q-intégration	66
A.5	Opération sur q-déformé algèbre	67

A.6	Les fonctions élémentaires q-déformées	68
B	Quelque définitions utiles	69
B.1	Algèbre de Lie	69
B.2	Groupes quantique	69
B.3	Algèbre de Hopf	70
B.4	Algèbre enveloppante	70

LISTE DES TABLEAUX

4.1	Les résultats théorique et expérimentales de la capacité thermique pour Césium, Rubidium et le Plomb	54
-----	--	----

LISTE DES FIGURES

1.1	Les propriétés thermodynamiques d'un oscillateur harmonique	13
1.2	La capacité thermique dans l'approximation d'Einstein (en cal/mol.K) en fonction de la température	17
1.3	La capacité thermique dans l'approximation de Debye (en cal/mol.K) en fonction de la température	20
1.4	Comparaison des approximation de Debye et d'Einstein de la capacité thermique	21
2.1	Le spectre d'énergie q-déformée pour le cas réel et le cas complexe	31
3.1	La capacité thermique d'Einstein q-déformée (en cal/mol.K) en fonction de la température pour différents valeurs de q	35
3.2	La capacité thermique d'Einstein q-déformée (en cal/mol.K) à basse température	36
3.3	La capacité thermique de Debye q-déformée (en cal/mol.K) en fonction de température pour différents valeurs de q	39
3.4	Température de Debye en fonction de q-déformée	40
3.5	Capacité thermique de l'Alluminium (en cal/mol.k) en fonction de la température pour différents valeurs de q ($\Theta_D = 394K$)	41
3.6	Capacité thermique de l'Argent (en cal/mol.k) en fonction de la température pour différents valeurs de q ($\Theta_D = 215K$)	42
3.7	Capacité thermique de la cuivre (en cal/mol.k) en fonction de la température pour différents valeurs de q ($\Theta_D = 315K$)	43
3.8	Capacité thermique de le Plomb (en cal/mol.k) en fonction de la température pour différents valeurs de q ($\Theta_D = 88K$)	44

3.9	(a) Le rapport entre la conductivité thermique déformée et non déformée ,(b) le rapport entre la conductivité électrique déformée et non déformée, en fonction de la température	45
4.1	La chaleur spécifique de Debye (en cal/mol.K) en fonction de température pour différentes valeurs de γ	51
4.2	La capacité thermique de Debye q-déformée (en cal/mol.K) à haute température pour différents valeurs de γ	52
4.3	La capacité thermique de Debye q-déformée (en cal/mol.K) à basse température différents valeurs de γ	52
4.4	La comparaison entre Les valeurs expérimentales et les valeurs théoriques de la capacité thermique	53
4.5	Le rapport entre la conductivité thermique déformée et non déformée en fonction de la température pour différents valeurs de γ	55

INTRODUCTION

La structure atomique interne de la matière était un grand mystère dans le cadre de la mécanique classique. Dans cette mécanique, l'état d'un système physique est bien défini par la connaissance des variables dynamiques, qui sont des quantités continues d'où la continuité des grandeurs qui déterminent l'état du système et l'énergie [1]. Au XXe siècle, les physiciens Niels Bohr, Dirac, Louis de Broglie, Werner Heisenberg, Jordon, Erwin Schrödinger et d'autres ont proposé une nouvelle mécanique appelée la mécanique quantique. C'est une théorie mathématique et physique décrivant la structure et l'évolution dans le temps et l'espace des phénomènes physiques à l'échelle de l'atome et en dessous. Elle a été découverte lorsque les physiciens ont voulu décrire le comportement des atomes et les échanges d'énergie entre la lumière et la matière à cette échelle.

En mécanique quantique, les phénomènes physiques sont décrits par une fonction d'onde qui contient toutes les informations sur l'état du système, et son comportement suit l'équation de Schrödinger [2, 3] dans le cas non-relativiste. Cette nouvelle théorie permet d'étudier les propriétés fondamentales des matériaux solides en partant autant que possible des propriétés à l'échelle atomique pour remonter aux propriétés à l'échelle macroscopique. Elle repose sur l'idée générale suivante : Dans un solide, l'élément fondamental simple sur lequel il est facile de raisonner est l'onde élastique se propageant à travers le milieu qui est appelée les phonons [1]. Les phonons représentent les modes normaux des vibrations du réseau cristallin et transmettent l'énergie thermique dans les matériaux solides. Ainsi, ils jouent un rôle important dans l'explication d'un certain nombre de propriétés physiques comme la capacité thermique, la conductivité thermique et la conductivité électrique des matériaux.

La structure mathématique appelée groupe quantique « Quantum Group » a trouvé des applications dans plusieurs domaines de la physique théorique. Le groupe quantique a fait sa première apparition dans l'étude des systèmes quantiques intégrables. Plus tard, il a été démontré que cette structure algébrique peut être obtenue en quantifiant les algèbres de Lie de Poisson. Ces algèbres enveloppantes universelles quantifiées sont liées à l'analyse q-classique. La même structure mathématique apparaît

dans la théorie des invariants de nœuds et de liens et dans la géométrie non commutative. D'un point de vue physique, le groupe quantique comprend deux idées de base, à savoir "la déformation d'une structure algébrique et la notion de comultiplication non commutative. Dans la quantification algébrique, un paramètre de déformation q est impliqué et la structure non déformée est obtenue dans la limite $q \sim 1$. Ce paramètre de déformation rappelle les constantes universelles c et \hbar , qui agissent en quelque sorte comme des paramètres de déformation dans la transition de la relativité newtonienne à la relativité einsteinienne et dans la transition du régime classique au régime quantique respectivement. Mais contrairement à c ou \hbar ; q est sans dimension [4–15].

Les groupes quantiques et les algèbres quantiques ont suscité beaucoup d'intérêt chez les physiciens et les mathématiciens [4, 5, 7–10, 13, 16–18]. L'introduction de l'oscillateur harmonique q -déformé a été particulièrement remarquée dans ce domaine. Les groupes quantiques et les algèbres quantiques ont trouvé des applications inattendues en physique théorique [12]. Du point de vue mathématique, ce sont les q -déformations des algèbres enveloppantes universelles de l'algèbre de Lie qui correspondent à des exemples concrets d'algèbre de Hopf. Lorsque le paramètre de déformation q est égal à 1, on obtient l'algèbre de Lie habituelle.

La réalisation de l'algèbre quantique unitaire de spin $SU(2)$ en termes de l'analogue q -déformé de l'oscillateur harmonique quantique était le début des travaux sur ce sujet [17, 19]. Biedenharn et Macfarlane [10, 13, 16] ont étudié l'oscillateur harmonique q -déformé basé sur une algèbre de création et d'annihilation des opérateurs. Ils ont trouvé le spectre et les valeurs propres d'un tel oscillateur harmonique en supposant l'existence d'une limite inférieure d'énergie. La méthode de la mécanique quantique q -déformée était basée sur les règles de commutations de Heisenberg des bosons. Le paramètre principal tiré de cette méthode est un nombre réel $q \in [0, 1]$, appelée déformation.

Récemment, la théorie du q -déformé est devenue un sujet de grand intérêt, à cause de ces applications dans plusieurs branches de la physique. Ces applications touchent une vaste gamme de domaines, tels que la déformation de l'oscillateur harmonique [20], l'oscillateur de Morse-déformé [21], le q -déformé classique et quantique pour certaines systèmes physiques [22], modèle de Jaynes–Cummings, algèbre q -déformé d'un oscillateur [23], la super-symétrie q -déformée [24], certains potentiels q -déformés [15], les propriétés thermostatiques d'un gaz de Fermi parfait q -déformé [25], l'oscillateur de Tamm–Dancoff q -déformé [26], Approche algébrique des propriétés thermodynamiques des molécules diatomiques [27], symétrie quantique des groupes de molécules diatomiques [27] et enfin la q -déformation fermionique et sa connexion avec la masse effective d'une quasi-particule [28].

Comme la déformation de l'oscillateur harmonique, qui est l'un des systèmes quantiques les plus importants, car c'est l'un des très rares systèmes qui peuvent être résolus et parce qu'il existe de nombreuses applications de l'oscillateur harmonique dans divers systèmes physiques [29, 30]. La théorie de la représentation algébrique quantique déformée a conduit au développement de l'algèbre des os-

cillateurs harmoniques q -déformé [13, 29]. Dans ce contexte, notre étude sera étendue aux solides, où nous avons évalué diverses grandeurs thermodynamiques des solides grâce à l'utilisation de l'algèbre q -déformée telle que la fonction de partition, l'entropie et l'énergie interne. Ceci afin de découvrir l'effet et l'application de la q -déformation dans les solides, en particulier dans les solides d'Einstein et Debye : Ces derniers sont des modèles de solides cristallins qui contiennent un grand nombre d'oscillateurs harmoniques quantiques tridimensionnels indépendants de même fréquence. Le modèle d'Einstein est basé sur l'hypothèse que chaque atome de la structure est un oscillateur harmonique quantique 3D, tandis que le modèle de Debye permet d'expliquer précisément les relevés expérimentaux en prenant en compte les interactions entre les oscillateurs.

Ce mémoire est divisé en quatre chapitres.

Le premier chapitre rappelle quelques généralités des grandeurs physiques de la physique de solide. Il contient également une revue sur le modèle d'Einstein et le modèle de Debye.

Le deuxième chapitre présente en détail de l'algèbre q -déformée.

Le troisième chapitre implémente la q -déformation dans les solides d'Einstein et Debye afin d'explorer les propriétés thermiques.

Le quatrième chapitre se concentre sur l'application de très petite déformation de q .

CHAPITRE 1

RAPPEL SUR LES PROPRIÉTÉS THERMIQUES D'UN SOLIDE CRISTALLIN

في هذا الفصل، سنقوم بدراسة أنظمة الهزاز التوافقي باستخدام ميكانيكا الكم. حيث نبدأ بمراجعة الهزاز التوافقي أحادي البعد، ثم نتطرق الى دراسة الخواص الحرارية للاجسام الصلبة من خلال نموذج أينشتاين ونموذج ديبي.

1.1 L'équation de Schrödinger

En mécanique quantique non relativiste, les phénomènes physiques sont décrits par la fonction d'onde, qui contient toutes les informations sur l'état du système et son comportement suit l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la mécanique quantique. Comme l'est la loi de Newton en physique classique ou les équations de Maxwell en électromagnétisme. Elle décrit l'évolution temporelle de l'état d'un objet quantique représenté par une fonction d'onde [2]. Elle est basée sur la résolution de l'équation de Schrödinger, qui est une équation différentielle de second degré par rapport à la position et de premier degré par rapport au temps.

On s'intéresse ici au cas stationnaire (indépendant de temps), qui est défini par une fonction complexe des coordonnées d'espace et de temps $\psi(\mathbf{r}, t)$, solution d'une équation aux dérivées partielles. Ainsi, l'équation de Schrödinger s'écrit par [2,3] :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.1)$$

où H est l'opérateur Hamiltonien (associé à l'énergie totale) du système considéré. Si l'Hamiltonien du système ne dépend pas du temps, la solution de l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}. \quad (1.2)$$

avec $\psi(\mathbf{r})$, pour les états stationnaires, vérifié l'équation de Schrödinger stationnaire [3] :

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.3)$$

ici, E la valeur propre de l'Hamiltonien en question et [2]

$$H = T + V(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

dont

$$T = \frac{p^2}{2m},$$

avec p est l'impulsion de la particule. En mécanique quantique, l'impulsion est un opérateur différentiel définit par

$$\hat{P} = i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

ici, \hbar la constante de Planck réduit ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$), m la masse de la particule en enfin V l'énergie potentielle de la particule. On peut donc écrire l'équation de Schrödinger d'une autre façon par

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\mathbf{r}, t) \right) \psi, \quad (1.5)$$

où

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi = E\psi. \quad (1.6)$$

Lorsque $V(\mathbf{r}, t) = 0$, l'équation de Schrödinger d'une particule libre devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = E\psi. \quad (1.7)$$

1.2 La seconde quantification

1.2.1 Espace de Fock

L'espace de Fock est une construction algébrique utilisée en mécanique quantique pour construire l'espace des états quantiques d'un nombre variable ou inconnu de particules identiques à partir d'une seule particule de l'espace de Hilbert H . Il porte le nom de Vladimir A. Fock qui l'a présenté pour la première fois dans son article de 1932 "Konfigurationsraum und zweite Quantelung", traduisible par "espace de configuration et deuxième quantification." L'espace de Fock se définit comme l'espace de

Hilbert obtenu par la somme directe des produits tensoriels des espaces de Hilbert pour une particule.

1.2.2 Les opérateurs de création et d'annihilation

définition En physique, en particulier la mécanique quantique en seconde quantification, un opérateur de la création est un opérateur qui augmente d'une unité le nombre de particules d'un état quantique. L'opérateur d'annihilation, il est au contraire un opérateur qui réduit d'une unité le nombre de particules d'un état et est l'opérateur adjoint opérateur de la création. L'utilisation de ces opérateurs a été introduit dans le cas du problème de l'oscillateur harmonique quantique.

- **Opérateur de création** : C'est un opérateur qui agit sur l'espace de Fock en changeant un état à N particules en un état à $(N + 1)$ particules

$$a^+ |N\rangle = \sqrt{N+1} |N+1\rangle. \quad (1.8)$$

- **Opérateur d'annihilation** : C'est un opérateur qui fait passer d'un état de l'espace de Fock contenant $N \geq 1$ particules à un état contenant $(N - 1)$ particules. L'action d'un opérateur d'annihilation sur le vide ($N = 0$) donne zéro.

$$a |N\rangle = \sqrt{N} |N-1\rangle. \quad (1.9)$$

- **Le conjugué hermitique** : d'un opérateur d'annihilation est un opérateur de création $a = (a^+)^+$ dont le commutateur

$$[a, a^+] = 1. \quad (1.10)$$

Un état normalisé de l'espace de Fock s'écrit par

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (a^+)^N |0\rangle, \quad (1.11)$$

où $|0\rangle$ désigne le vide. Comme résultat, nous avons

$$[N, a] = [a^+ a, a] = a^+ [a, a] + [a^+, a] a = -a. \quad (1.12)$$

$$[N, a^+] = [a^+ a, a^+] = a^+ [a, a^+] + [a^+, a^+] a = a^+. \quad (1.13)$$

dont

$$N = a^+ a. \quad (1.14)$$

1.3 L'oscillateur harmonique unidimensionnel

Le problème de l'oscillateur harmonique est très important en physique, d'abord par ce qu'on peut résoudre l'équation de Schrödinger correspondante et aussi et plusieurs problèmes physiques (exemples : vibrations des atomes d'une molécule, réseau cristallin....) semblables à ceux d'un oscillateur harmonique.

1.3.1 Calcul des vecteurs propres

On a

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E_n \psi(x), \quad (1.15)$$

où

$$\left(-\frac{\hbar}{2\omega m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \right) \psi(x) = \frac{E_n}{\hbar\omega} \psi(x). \quad (1.16)$$

Soit maintenant $\beta = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x$ et $\psi(x) = \phi(\beta)$, on obtient

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} + \frac{\beta^2}{4} \right) \phi(\beta) = \varepsilon_n \phi(\beta). \quad (1.17)$$

C'est une équation différentielle d'ordre 2, semblable à l'équation de Legendre de type [31]

$$\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \phi(\beta) + \left(\varepsilon_n - \frac{\beta^2}{4} \right) \phi(\beta) = 0, \quad (1.18)$$

avec

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.19)$$

Les solutions globales de cette équation sont [31]

$$\phi(\beta) = C_1 D_n(\beta) + C_2 D_{-n-\frac{1}{2}}(\beta), \quad (1.20)$$

où $D_n(\beta)$ est la fonction Hermite : pour que $D_n(\beta)$ soit une série, la condition suivante doit être bien vérifiée [31]

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \phi(\beta) = 0. \quad (1.21)$$

Ainsi, nous obtenons

$$\phi(\beta) = C_1 D_n(\beta), \quad (1.22)$$

avec

$$D_n(\beta) = H_{en}(\beta) \exp\left(-\frac{\beta^2}{2}\right), \quad (1.23)$$

dont

$$H_{en}(\beta) = 2^{\frac{n}{2}} H_n(\sqrt{2}\beta). \quad (1.24)$$

Avec H_n est la fonction de hermite et donnée par cette relation [3, 31]

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2}. \quad (1.25)$$

Enfin, les solutions propres sont :

$$\psi(x) = C_n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right), \quad (1.26)$$

La condition de normalisation C_n se calcul par la relation [31]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \psi(x)^* dx = 1. \quad (1.27)$$

Soit

$$C_n^2 = \sqrt{\frac{\lambda_n}{2^n \sqrt{\pi n!}}}. \quad (1.28)$$

1.3.2 Les solutions dans le cadre de la théorie de la seconde quantification

Les vecteurs propres de l'oscillateur harmonique sont écrit [32] :

$$\psi(\beta) = C_n \exp\left(-\frac{\beta^2}{4}\right) H_n(\beta), \quad (1.29)$$

où

$$\beta H_n = n H_{n-1} + \frac{1}{2} H_{n+1}, \quad \frac{d}{d\beta} H_n = 2n H_{n+2}. \quad (1.30)$$

À partir de cette relation, on a

$$\beta \psi_n = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}, \quad (1.31)$$

$$\frac{d}{d\beta} \psi_n = 2\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} - \beta \psi_{n+1}. \quad (1.32)$$

Selon les deux relations (1.31) et (1.32), (1.32) devient

$$\frac{d}{d\beta} \psi_n = 2\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}. \quad (1.33)$$

La somme des deux relations (1.31) et (1.33) conduit à :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta + \frac{d}{d\beta} \right) \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}, \quad (1.34)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta - \frac{d}{d\beta} \right) \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}. \quad (1.35)$$

Introduisons les opérateurs suivant [32]

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta + \frac{d}{d\beta} \right), \quad (1.36)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta - \frac{d}{d\beta} \right). \quad (1.37)$$

Alors

$$a\psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}, \quad (1.38)$$

$$a^+\psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad (1.39)$$

dont a et a^+ et sont non hermitiques avec [32]

$$\int \psi^* \left(\beta \varphi + \frac{d\varphi}{d\beta} \right) d\beta = \int \left(\beta \psi^* + \frac{d\psi^*}{d\beta} \right) \varphi \beta, \quad (1.40)$$

$$\langle \psi | a | \varphi \rangle = \langle a^+ \psi | \varphi \rangle. \quad (1.41)$$

Soit

$$a^+ a \psi = \sqrt{n} a^+ \psi_{n-1} = n \psi_n. \quad (1.42)$$

Posons $a^+ a = N$, opérateur nombre de particules, alors

$$N \psi_n = n \psi_n, \quad (1.43)$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} a^+ \psi_{n-1} = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \psi_0. \quad (1.44)$$

A partir de (1.38), pour $n = 0$, on a

$$a\psi_0 = 0 \implies \left(\beta + \frac{d}{d\beta} \right) \psi_0 = 0. \quad (1.45)$$

Les solutions de l'équation (1.45) sont

$$\psi_0 \simeq e^{-\alpha\beta^2}, \quad (1.46)$$

$$\psi_0 \simeq e^{-\frac{\beta^2}{2}}, \quad (1.47)$$

$$\psi_0 \simeq \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\frac{\beta^2}{2}}. \quad (1.48)$$

Partons de la forme de l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique dont :

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2, \quad (1.49)$$

avec $\beta = \sqrt{\lambda} x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$, et

$$p_\beta = -i \frac{d}{d\beta} \Rightarrow p_\beta^2 = -\frac{d^2}{d\beta^2} = -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2}{dx^2}, \quad (1.50)$$

alors,

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(\beta^2 - \frac{d^2}{d\beta^2} \right). \quad (1.51)$$

Comme

$$\beta^2 - \frac{d^2}{d\beta^2} = aa^+ + a^+a, \quad (1.52)$$

on trouve

$$H = \hbar \omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right), \quad (1.53)$$

où

$$H\psi_n = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \psi_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \psi_n = E_n \psi_n. \quad (1.54)$$

Enfin les valeurs propres de l'oscillateur harmonique à 1D sont

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (1.55)$$

1.4 Les propriétés thermodynamiques

La thermodynamique statistique est une branche de la thermodynamique qui permet d'expliquer les propriétés physiques des systèmes macroscopiques à partir des données théoriques et expérimentales relatives aux particules composants ce système (variables microscopiques). L'objectif de la thermodynamique statistique est de décrire les objets du seul point de vue macroscopique à partir de quantités comme la fonction d'état, l'énergie interne ou l'entropie.

La probabilité pour que le système soit dans le niveau n d'énergie E_n est donnée par [33, 34] :

$$p_n = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_n}{k_b T}}. \quad (1.56)$$

dont Z est la fonction de partition canonique. Elle est donnée par :

$$Z = \sum e^{-\beta E_n}. \quad (1.57)$$

Pour le cas de l'oscillateur harmonique, on trouve

$$Z = e^{-\frac{\hbar\omega}{2}} \sum e^{-n\hbar\omega},$$

dont $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Posons que

$$\mathcal{I} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-\beta\hbar\omega})^n, \quad (1.58)$$

alors

$$\mathcal{I} = 1 + (e^{-\beta\hbar\omega}) + (e^{-\beta\hbar\omega})^2 + (e^{-\beta\hbar\omega})^3 + \dots (e^{-\beta\hbar\omega})^n, \quad (1.59)$$

avec

$$\mathcal{I} = \frac{1 - \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-\beta\hbar\omega n})}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad (1.60)$$

dont

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-\beta\hbar\omega n}) = 0, \quad (1.61)$$

ainsi

$$\mathcal{I} = \frac{1}{1 - (e^{-\beta\hbar\omega})} = \frac{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}} - e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}. \quad (1.62)$$

La forme finale de la fonction Z est

$$\begin{aligned} Z &= e^{-\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)} \mathcal{I} \quad (1.63) \\ &= e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \frac{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}} - e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}} = \frac{1}{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}} - e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}} \\ &= \frac{1}{2 \left(\frac{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}} - e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{2} \right)}. \end{aligned}$$

où

$$Z = \frac{1}{2 \sinh \frac{\beta\hbar\omega}{2}}, \quad (1.64)$$

est la forme exacte de la fonction de partition pour un atome. Pour N atomes, (1.64) devient

$$Z = \frac{1}{\left(2 \sinh \frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)^N}. \quad (1.65)$$

La dernière équation détermine la fonction de partition exacte. Maintenant, avant de présenter les résultats pour l'oscillateur Harmonique, toutes les propriétés thermodynamiques de l'oscillateur, comme l'énergie libre, l'entropie, l'énergie totale et la chaleur spécifique, seront obtenues via la fonction de partition Z . Les définitions thermodynamiques de toutes ces quantités en fonction de Z mènent aux

relations suivantes : [35]

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z, U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \quad (1.66)$$

$$\frac{S}{k_B} = \ln Z - \beta \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}, \frac{C_V}{k_B} = \beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}. \quad (1.67)$$

Ainsi :

- **L'énergie libre F** : Elle est donnée par l'expression suivant :

$$F = N k_B T \ln \left(2 \sinh \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right). \quad (1.68)$$

- **L'entropie S** : L'entropie d'un oscillateur harmonique est connue par la relation suivante :

$$S = -N k_B \ln \left(2 \sinh \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) + \frac{N \hbar \omega}{2T} \coth \frac{\beta \hbar \omega}{2}. \quad (1.69)$$

- **Energie moyenne** : Elle suit la relation suivante

$$U = N \frac{\hbar \omega}{2} \coth \frac{\beta \hbar \omega}{2}. \quad (1.70)$$

- **Capacité thermique** : Enfin, la chaleur spécifique pour N atomes est donnée par

$$C_V = N k_B \beta^2 \left(\frac{\hbar \omega}{2} \right)^2 \frac{1}{\sinh^2 \frac{\beta \hbar \omega}{2}}. \quad (1.71)$$

La figure. 1.1 montre les propriétés thermiques de l'oscillateur Harmonique à 1D en fonction de la température réduite $\tau = \frac{1}{\beta}$

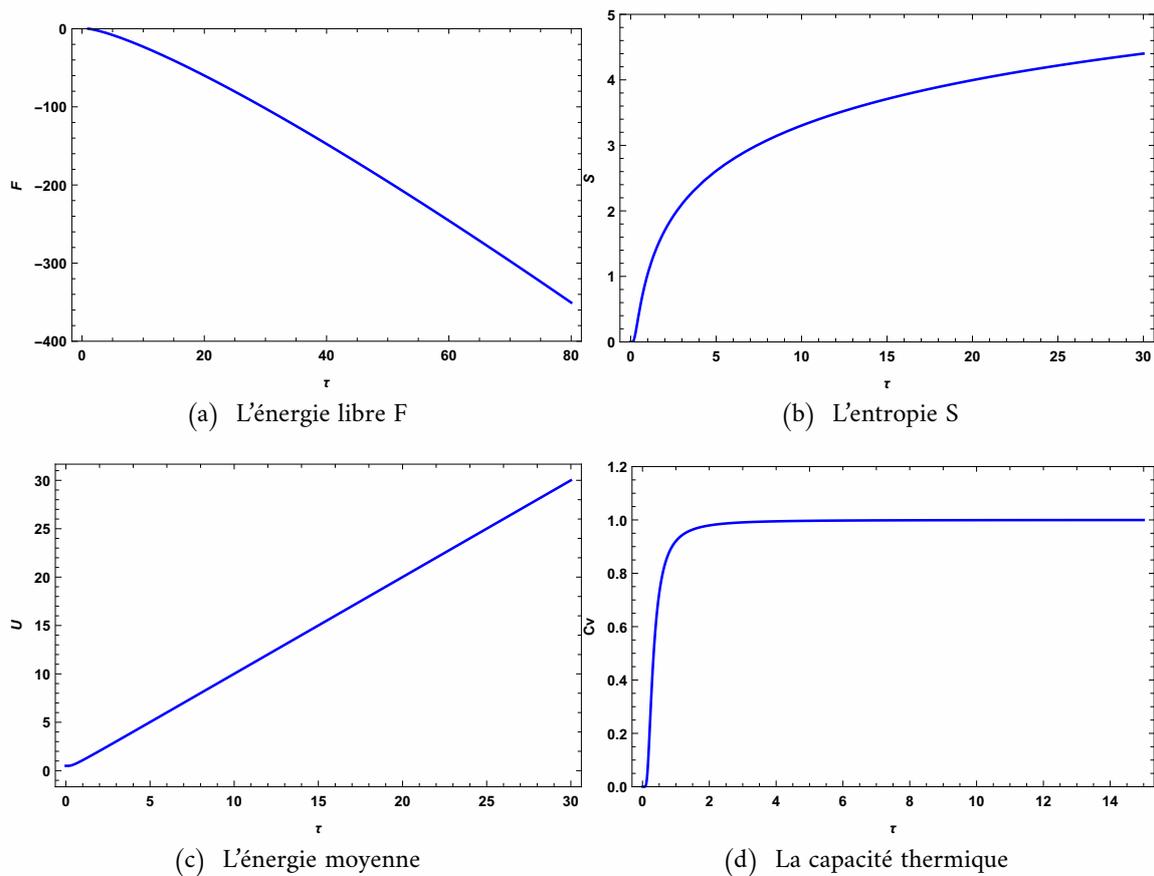


Fig. 1.1 : Les propriétés thermodynamiques d'un oscillateur harmonique

. La courbe de la chaleur spécifique montre une limite à haute température égale à $1k_B$. A très basses température, le troisième loi thermodynamique

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} C_V = 0. \quad (1.72)$$

est bien vérifié [34].

1.5 Les propriétés thermiques d'un solide

Les propriétés thermiques sont des caractéristiques d'un matériau liées à la température et qui peut être défini comme une propriété du matériau qui varie selon la température sans modifier l'identité chimique du matériau. Cependant, tous les propriétés thermique expriment le comportement du matériau soumis à un gradient de températures. Donc d'un point de vue thermique, un matériau est caractérisé par sa conductivité, sa capacité thermique et sa diffusivité thermique .

1.5.1 Détermination de la capacité thermique

Le calcul de la capacité thermique d'un matériau absorbé une quantité de la température δQ , l'augmentation de la température qui correspond δQ liée à une quantité thermodynamique qui s'appelle la capacité thermique C_V . On entend habituellement la capacité thermique à volume constant. Dans le cas des solides, la différence entre la capacité thermique à volume constante et capacité thermique à pression constante est faible et peut être négligée en première approximation [36].

La capacité thermique à volume constante d'un système est définie par :

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V, \quad (1.73)$$

où U est l'énergie d'excitation thermique et T la température de ce système.

La capacité thermique des matériaux solides dépend de leur température et de leur nature. La contribution des vibrations du réseau à la capacité thermique d'un réseau harmonique classique était indépendante de la température (loi de Dulong et Petit). [36, 37] dont

$$C_V = 3Nk_B. \quad (1.74)$$

Cependant, les résultats expérimentaux montrent que le comportement de la capacité thermique des matériaux est relatif à la température. À mesure que la température descend en dessous de la température ambiante, la capacité thermique de tous les solides commence à descendre au-dessous de la valeur classique. Finalement, on observe qu'elle s'annule comme T^3 (dans les isolants) ou $AT + BT^3$ (dans les métaux) [37]. Ainsi, la mécanique classique permet d'expliquer le comportement de la capacité thermique à haute température. Mais à basse température, l'explication de ce phénomène a été expliquée par la théorie quantique des solides. En calculant l'énergie totale liée aux phonons dans un cristal et en utilisant la statistique de Bose-Einstein, on peut exprimer la capacité du réseau en fonction de la constante de Boltzmann k_B , la densité d'états par unité de fréquence $D(\omega)$, la température et la constante de Dirac \hbar [36]. Ainsi, l'énergie totale du cristal est

$$U = \sum_k \sum_p U_{k,p} = \sum_k \sum_p \langle n_{k,p} \rangle \hbar \omega_{k,p}, \quad (1.75)$$

où $\langle n_{k,p} \rangle$ est l'occupation à l'équilibre thermique des phonons de vecteur d'onde k et de polarisation p qui représente la branche (acoustique ou optique) du mode étudié [36]. Partons de

$$\langle n_{k,p} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1},$$

l'énergie totale devient

$$U = \sum_k \sum_p \hbar\omega_{k,p} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}. \quad (1.76)$$

Généralement on remplace la sommation sur k par une intégrale, on trouve

$$U = \sum_p \int \hbar\omega_{k,p} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} dN, \quad (1.77)$$

avec $dN = D(\omega) d\omega$ est le nombre des modes normaux. Dans ce cas, on a

$$U = \sum_p \int \hbar\omega_{k,p} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} D(\omega) d\omega. \quad (1.78)$$

Ici $D(\omega)$ est la densité de mode connue par le nombre des modes dans un intervalle $[\omega, \omega + d\omega]$.

La capacité thermique du réseau est trouvée par différenciation par rapport à la température. Alors

$$C_V = k_B \sum_p \int \frac{D(\omega) \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1\right)^2} d\omega. \quad (1.79)$$

Posons que $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$, alors

$$C_V = k_B \sum_p \int D(\omega) d\omega \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}. \quad (1.80)$$

1.5.2 La densité des modes en trois dimensions

Nous appliquons des conditions limites périodiques sur les mailles primitives N^3 dans un cube du côté L afin que k soit déterminé par la condition [36]

$$e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = e^{i\{k_x(x+L) + k_y(y+L) + k_z(z+L)\}}, \quad (1.81)$$

alors

$$k_x, k_y, k_z = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z). \quad (1.82)$$

Ainsi, il y a une valeur autorisée de k par volume $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ dans l'espace k où

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 = \frac{V}{8\pi^3}. \quad (1.83)$$

Le nombre total de modes avec un vecteur d'onde inférieur à k

$$N = \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V k^3}{6\pi^2}, \quad (1.84)$$

avec

$$dN = \frac{V k^2 dk}{2\pi^2}. \quad (1.85)$$

La densité des modes est :

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = \frac{dN}{dk} \frac{dk}{d\omega}, \quad (1.86)$$

où

$$D(\omega) = \frac{V k^2}{2\pi^2} \frac{dk}{d\omega}. \quad (1.87)$$

1.5.3 La théorie d'Einstein

Le modèle d'Einstein, établi en 1906, représente aux physiques de solide une approximation qui permet de décrire la contribution des vibrations de réseau des matériaux [36–38]. Einstein imagina les atomes en vibration suivant une loi harmonique, autour de leur position moyenne d'équilibre, et eut l'inspiration d'appliquer à ces vibrations l'hypothèse des quanta. Einstein supposa donc que les N atomes d'un cristal étaient équivalents à $3N$ oscillateurs vibrant à la même fréquence ω_0 . Attribuant à chacun l'énergie d'un oscillateur de Planck, ça veut dire que chaque type de vibration prend des valeurs $\hbar\omega_0$ [33, 38] dont ω_0 la fréquence de la vibration au modèle d'Einstein.

À partir de cela on peut écrire la densité de mode au modèle d'Einstein

$$D(\omega) = 3N\delta(\omega - \omega_0), \quad (1.88)$$

Ainsi, l'énergie totale du cristal devient

$$\begin{aligned} U &= \int D(\omega) d\omega \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}, \\ &= \frac{3N\hbar\omega_0}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} - 1}. \end{aligned} \quad (1.89)$$

Enfin, la capacité thermique aura la forme suivante :

$$C_V = \frac{3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right)^2 e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} - 1\right)^2}. \quad (1.90)$$

Le comportement asymptotique de cette fonction par rapport à la température peut être compris comme suit :

- **À haute température** : ici $T \rightarrow \infty$, $x = \frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \rightarrow 0$

En utilisant l'approximation suivant $e^x \simeq 1 + x$, on trouve

$$C_V = 3Nk_B. \quad (1.91)$$

C'est la loi du Dulong et Petit.

- **À basse température** : dont $T \rightarrow 0$, on trouve

$$C_V = \frac{3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}}}{e^{\frac{2\hbar\omega_0}{k_B T}}} \quad (1.92)$$

$$= 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}},$$

Posons que $\frac{\hbar\omega_0}{k_B} = \Theta_E$, ainsi

$$C_V = 3Nk_B \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{\Theta_E}{T}}. \quad (1.93)$$

La théorie d'Einstein donne la valeur classique $3Nk_B$ à haute température, lorsque $k_B T \gg \hbar\omega_0$.

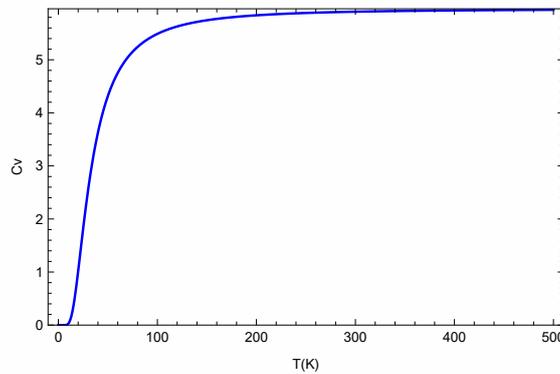


Figure 1.2 : La capacité thermique dans l'approximation d'Einstein (en cal/mol.K) en fonction de la température

La théorie d'Einstein explique comment la chaleur est stockée dans les solides. Elle montre que la chaleur stockée diminue lorsque la température augmente. Einstein a également montré que les atomes dans un solide vibrent à une certaine fréquence, et que cette fréquence peut être utilisée pour expliquer comment la chaleur est stockée dans le solide. Cependant, cette théorie ne fonctionne pas bien à basse température, car les atomes dans le solide sont en contact et ne peuvent pas vibrer indépendamment les uns des autres. Au lieu de cela, il faut considérer la vibration du cristal dans son ensemble [33,38].

1.5.4 La théorie de Debye

Le modèle de Debye est une explication du comportement de la capacité thermique des solides en fonction de la température. Il consiste à étudier les vibrations du réseau d'atomes formant le solide, autrement dit, les phonons. Ce modèle, établi en 1912 par Peter Debye [39], est basé sur deux approximations essentielles.

- Toutes les branches du spectre des vibrations sont remplacées par trois branches, chacune avec la même loi de dispersion linéaire [37, 39] :

$$\omega_D = v_g k_D. \quad (1.94)$$

Le milieu est donc considéré comme élastique et isotrope ; les mode optique ne sont pas considérés, c'est-à-dire que l'on raisonne comme si le cristal avait un atome par maille. Ainsi, $v_g = \frac{d\omega}{dk} = c$ est la vitesse de propagation de l'énergie dans un milieu cristallin.

- Le nombre de modes dont la pulsation est inférieure à une valeur particulière $\omega(k)$ est tout simplement le nombre de mode dont le vecteur d'onde est inférieur à la sphère de rayon $k = \|\vec{k}\|$.

Dans ce sens, la densité des modes [36, 39] :

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega}. \quad (1.95)$$

dont, le nombre d'états N

$$N = \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \frac{V}{6\pi^2} k^3 = \frac{V}{6\pi^2 c^3} \omega_D^3. \quad (1.96)$$

Dans ce cas,

$$D(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = \frac{V}{2\pi^2 c^3} \omega_D^2. \quad (1.97)$$

Considérons les contribution cumulées des vibrations longitudinales et transversales :

$$D(\omega) = D_{\parallel}(\omega) + 2D_{\perp}(\omega), \quad (1.98)$$

avec

$$D_{\parallel}(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 c_{\parallel}^3} \omega_D^2, \quad D_{\perp}(\omega) = \frac{V}{2\pi^2 c_{\perp}^3} \omega_D^2, \quad (1.99)$$

dont c_{\parallel} et c_{\perp} sont les vitesses de propagation des ondes sonores, polarisées longitudinalement et transversalement par rapport à la direction de propagation. On déduit que

$$D(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 c^3} \omega_D^2, \quad (1.100)$$

avec

$$\omega_D = \left[\frac{6\pi^2 c^3 N}{V} \right]^{\frac{1}{3}}. \quad (1.101)$$

Dans l'approximation de Debye, on n'autorise pas de mode dont la pulsation serait supérieure à ω_D . Le nombre de modes tels que $\omega \leq \omega_D$ épuise exactement le nombre de degrés de liberté du réseau. C'est à dire que la première zone de Brouillon est remplacée par une sphère de rayon $\kappa_D = \frac{\omega_D}{c}$ [37, 39].

Donc l'énergie thermique du cristal à un atome par maille se déduit :

$$\begin{aligned}
 U &= \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \\
 &= \int_0^{\omega_D} \frac{3V}{2\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \\
 &= \frac{3V}{2\pi^2 c^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} d\omega.
 \end{aligned} \tag{1.102}$$

Posons que $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$, alors (1.102) se transforme à

$$\begin{aligned}
 U &= \frac{3V}{2\pi^2 c^3} \int_0^{x_D} \frac{\hbar \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \frac{k_B T}{\hbar} x^3}{e^x - 1} dx \\
 &= \frac{3V}{2\pi^2 c^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 k_B T \int_0^{x_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx.
 \end{aligned} \tag{1.103}$$

Par conséquence, la capacité thermique est représentée par :

$$C_V = \frac{3k_B V}{2\pi^2 c^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx, \tag{1.104}$$

dont

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B} = \frac{\hbar}{k_B} c \left(6\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad x_D = \frac{\Theta_D}{T}. \tag{1.105}$$

Ici, Θ_D est une mesure de la température au-dessus de laquelle tous les modes commencent à être excités, et au-dessous de laquelle certains modes commencent à geler [37].

Si nous effectuons le changement de variable, on peut alors écrire la fonction (1.104) en fonction de la température de Debye [36, 39] :

$$C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \int_0^{x_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx. \tag{1.106}$$

Cette formule exprime la capacité thermique à toute température en fonction de l'unique paramètre empirique, Θ_D .

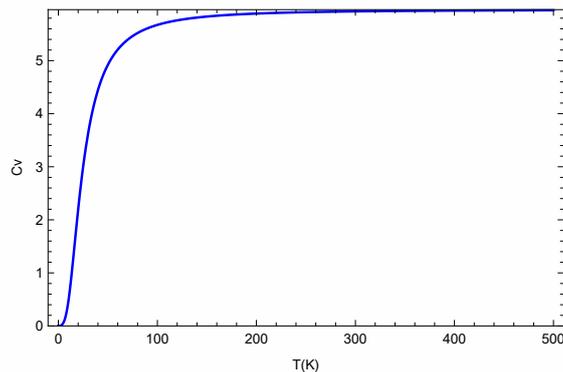


Fig. 1.3 : La capacité thermique dans l'approximation de Debye (en cal/mol.K) en fonction de la température

Ici, deux cas à distinguer

- **À haute température** : dont $T \gg \Theta_D$. Dans ce cas, $x < 1$, on trouve

$$C_V \simeq 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \frac{1}{3} x_D^3, \quad (1.107)$$

donc

$$C_V = 3Nk_B. \quad (1.108)$$

On retrouve ainsi la loi de Dulong et Petit, qui est relativement bien vérifiée par l'expérience. Ici, on a utilisé que $e^x \simeq 1 + x$.

- **À basse température** $T \ll \Theta_D$: Le facteur intégrant est tout à fait négligeable lorsque $x > x_D$. Ceci justifie le remplacement de la borne supérieure de l'intégrale par $+\infty$. Dans ce cas l'intégrale est une constante numérique : L'intégrale définie dans (1.103) peut être calculée en écrivant [37]

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} x^3 e^{-nx} dx. \quad (1.109)$$

Posons que $nx = t$, alors

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} x^3 e^{-nx} dx = \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{1}{n^4} t^3 e^{-t} dt = \zeta(4) \Gamma(3) = \frac{\pi^4}{15}. \quad (1.110)$$

Finalement

$$C_V \simeq \frac{36\pi^4}{15} Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 = 233Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3. \quad (1.111)$$

La théorie de la capacité thermique de Debye conduit à une représentation relativement satisfaisante des résultats expérimentaux. En particulier, le comportement en T^3 [33, 36, 39]. Alors que le modèle d'Einstein, fondé sur la notion d'oscillateur harmonique quantique, présentait une légère différence.

Ainsi les modèles d'Einstein et de Debye donnent des résultats relativement proches de telle sorte qu'elles tendent vers la valeur de Dulong et Petit à hautes températures, mais celui de Debye est valable aux basses températures alors que celui d'Einstein ne l'est pas. Ces modèles ne donnent pas de valeur exactes, car ils sont toujours approximatifs, mais donnent les bonnes tendances et des ordres de grandeur corrects.

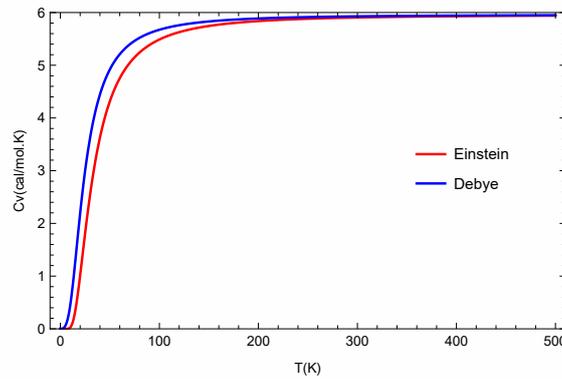


Fig. 1.4 : Comparaison des approximation de Debye et d'Einstein de la capacité thermique

Enfin, la théorie de Debye implique trois hypothèses de base : (i) l'isotropie du solide (ii) la non-dispersion des ondes sonores dans le milieu et (iii) la dégénérescence des différentes branches de modes autorisés. Surtout, elle est basée sur l'approximation harmonique. Les cristaux réels présentent des effets anharmoniques tels que l'expansion thermique ; les constantes élastiques adiabatiques et isothermes sont en général différentes et dépendantes de la température et de la pression. L'influence de l'anharmonicité sur les différentes quantités pour des cas spécifiques a été traitée dans un certain nombre livre [37]. Motivé par le fait que la déformation q peut prendre en charge les effets d'anharmonicité dans une certaine mesure, il est tenté d'expliquer la dépendance de la température de la capacité calorifique du réseau dans la région de température $T \gg \Theta_D$ en suggérant un modèle de Debye à basant sur les q -oscillateurs [5].

1.5.5 La conductivité thermique

La conductivité thermique du solide cristallin est la capacité d'un matériau à conduire la chaleur. Dans un cristal parfait, la symétrie translatrice induit une continuité parfaite du réseau de liaisons chimiques et les phonons s'étendent à travers tout le cristal, ils sont « délocalisés ». Le transfert de chaleur est principalement dû aux phonons, aux électrons et aux magnons. Les magnons peuvent représenter une part importante de la conductivité thermique chez certains matériaux comme pour le cas des cuprates.

La conduction thermique est le mode de transfert de chaleur qui prédomine dans les solides. Lorsqu'un gradient de température existe au sein d'un système, le retour à l'équilibre se traduit par une

uniformisation de la température : la chaleur se propage par contact (ou de proche en proche) au sein de la matière. La conduction dans les solides a été décrite pour la première fois par Joseph Fourier en 1822 dans son traité intitulé Théorie Analytique de la Chaleur. Cette théorie est aujourd'hui connue comme la loi de Fourier et s'écrit par [36,40] :

$$\mathbf{j} = -k\nabla T. \quad (1.112)$$

où k est la constante de proportionnalité, est appelée **conductivité thermique**, est un mode de transfert d'énergie qui se fait à l'échelle microscopique.

Dans les solides non métalliques, le transfert de l'énergie entre deux zones de températures différentes se fait par échange d'énergie de vibration entre les atomes du réseau cristallin. Dans les métaux, l'énergie thermique est aussi transportée par les électrons de conduction, ce qui rend le transfert plus efficace. La conduction thermique est rapide sur des petites distances, mais très lente sur les grandes distances. Elle est exprimée par la l'expression suivante [36] :

$$k = \frac{1}{3}C_V v \ell. \quad (1.113)$$

où v est la vitesse de propagation de l'énergie, ℓ est le libre parcours moyen entre les particules où ($\ell = v\tau$) donc

$$k = \frac{1}{3}C_V v^2 \tau. \quad (1.114)$$

1.5.6 La loi de Wiedemann et Franz

La loi de Wiedemann et Franz (1853) stipule que le rapport de la contribution électronique de la conductivité thermique (k) à la conductivité électrique (σ) d'un métal est proportionnel à la température (T) [37].

$$\frac{k}{\sigma} = \frac{1}{3} \frac{m C_V v^2 \tau}{n e^2}. \quad (1.115)$$

À l'époque de Drude, où la théorie quantique du gaz électronique n'était pas connue, c_v et v^2 ont été estimés sur la base de la théorie cinétique des gaz [40], soit

$$C_V = \frac{3}{2} n k_B, \quad (1.116)$$

comme

$$\frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} k_B T. \quad (1.117)$$

alors

$$\frac{k}{\sigma} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T, \quad (1.118)$$

soit

$$\frac{k}{\sigma T} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 1.11 \times 10^{-8} W.\Omega.K^{-2}. \quad (1.119)$$

D'autre part, Drude avait fait une erreur dans l'estimation de σ , ce qui le conduisit à trouver la moitié du nombre de Lorentz égal à $2.22 \times 10^{-8} W.\Omega.K^{-2}$ [37, 40] en excellent accord avec l'expérience. Théoriquement, la constante de proportionnalité L , appelée nombre de Lorenz, est égale à $\pi^2/3(k_B/e)$ où k_B est la constante de Boltzmann et e est la charge élémentaire.

CHAPITRE 2

L'OSCILLATEUR HARMONIQUE Q-DÉFORMÉ

في هذا الفصل نريد دراسة جبر الهزات التوافقية باستخدام التعريف الرياضي q .

2.1 Préambule

Le problème de l'oscillateur harmonique simple (SHO) joue un rôle indispensable en physique. Il est courant d'utiliser le SHO pour illustrer les concepts de base et les nouvelles méthodes en physique classique ainsi qu'en physique quantique. La théorie mécanique des ondes des oscillateurs fournit la base pour comprendre les propriétés d'une grande variété de systèmes qui sont analysables en termes d'oscillateurs harmoniques. Elle est utile non seulement dans l'étude des vibrations des molécules diatomiques, mais aussi dans l'étude des vibrations d'autres systèmes plus complexes exprimés en termes de leurs modes normaux. Ainsi, ses applications ne se limitent pas à la spectroscopie moléculaire, mais s'étendent à une variété de branches de la physique moderne telles que la physique de l'état solide, la structure nucléaire, la théorie du champ quantique, l'optique quantique, la mécanique statistique quantique [4, 7, 8, 11–13, 41].

2.2 La mécanique quantique q -déformée

Le oscillateur harmonique q -déformé inspire la recherche d'une mécanique quantique q -déformée qui produit les résultats de la mécanique quantique standard lorsque le paramètre de déformation

approche une valeur particulière. Le calcul q -déformé, lorsqu'il est appliqué à la mécanique quantique avec ses postulats fondamentaux préservés, donne lieu à une mécanique quantique q -déformée. La mécanique quantique est généralement déformée de deux manières différentes : soit en remplaçant les relations de commutation canoniques par une relation de q -commutation, où soit modifier l'opérateur de moment dans l'équation de Schrödinger par un opérateur q -déformé [7-9].

Dans un espace vectoriel linéaire ζ la norme est défini par

$$\begin{aligned} \|\cdot\| : \zeta &\rightarrow \mathbb{R}^+ \\ v &\rightarrow \|v\|, \end{aligned} \quad (2.1)$$

dont,

- $\|\alpha v\| = |\alpha| \|v\|$.
- $\|v + u\| \leq \|v\| + \|u\|$.
- $\|v\| = 0 \Rightarrow v = 0$.

$\forall (v, u) \in \zeta$ et $\alpha \in \mathbb{C}$. Pour les fonctions intégrables au carré, la norme est définie comme

$$\|v\| = \sqrt{\int v^*(x) v(x) d(qx)}, \quad (2.2)$$

où l'intégrale sera définie plus tard. Nous définissons également le produit scalaire de deux vecteurs u et v dans ζ comme

$$\begin{aligned} \zeta \times \zeta &\rightarrow \mathbb{C} \\ (u, v) &\rightarrow \langle u|v \rangle = \frac{1}{4} \{ \|u + v\|^2 - \|u - v\|^2 - i (\|u + iv\|^2 - \|u + v\|^2) \}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

En utilisant (2.2), dont elle possède les propriétés suivantes :

- $\|v\|^2 = \langle v|v \rangle$.
- $\langle v|u \rangle = \langle u|v \rangle^*$.
- $\langle v|\alpha u \rangle = \alpha \langle v|u \rangle$.
- $\langle u|v + w \rangle = \langle u|v \rangle + \langle u|w \rangle$.
- $\langle v|v \rangle = 0 \Leftrightarrow v = 0$,

l'intégrale doit satisfaire les conditions ci-dessus ainsi que le théorème fondamental du calcul intégral, à savoir

$$\int_a^b [D_x f(x)] d(qx) = f(b) - f(a). \quad (2.4)$$

Un espace vectoriel linéaire est dit complet s'il existe un ensemble de vecteurs dans celui-ci de telle sorte que chaque vecteur v de l'espace peut être exprimé comme une somme convergente de ces vecteurs. Un espace linéaire complet, avec une norme définie comme ci-dessus, est appelé un espace q -Banach. L'espace linéaire ζ' des fonctionnelles linéaires continues de l'espace q -Banach est appelé l'espace q -dual de ζ .

Soit $\alpha(\zeta, F)$ désigne l'espace des applications linéaires continues de l'espace q -Banach ζ dans l'espace q -Banach F . Alors $A \in \alpha(\zeta, F)$ induit une application $A^+ : F \rightarrow \zeta$ appelée opérateur q -adjoint. L'opérateur q -adjoint est unique. Il est défini par

$$\int u^*(x) Av(x) d(qx) = \int [A^+u(x)]^* v(x) d(qx), \quad (2.5)$$

avec la condition suivante

$$\int u^*(x) Av(x) d(qx) = \int [Au(x)]^* v(x) d(qx). \quad (2.6)$$

C'est-à-dire que si $A^+ = A$, donc A est dit q -hermitien.

On peut montrer que les valeurs propres d'un opérateur q -hermitien ne peuvent prendre que des valeurs réelles; de plus, les vecteurs propres d'un opérateur q -hermitien appartenant à des valeurs propres différentes sont q -orthogonaux.

2.3 L'équation de Schrödinger q -déformée

L'équation de Schrödinger q -déformée est une généralisation de l'équation de Schrödinger qui inclut un paramètre de déformation q . Elle s'écrit par :

$$H_q \psi_q = \left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \right\} \psi_q = E_q \psi_q. \quad (2.7)$$

Ici, le moment q -déformé est défini comme $p = -i\nabla_q$. Dans la représentation des coordonnées de la mécanique quantique standard, $-i\hbar d/dx$ sert comme un opérateur de moment unidimensionnel. Il est donc naturel d'inclure l'opérateur de différence q dans l'expression de l'opérateur de moment q -déformé. Selon le choix de l'opérateur de différence q , il existe plusieurs possibilités pour l'équation de Schrödinger q -déformée. Si nous choisissons l'opérateur de différence [9]

$$\mathcal{D}_x f(x) = \frac{q^{x\partial_x} f(x) - f(x)}{x(q-1)}, \quad (2.8)$$

dont

$$[\mathcal{D}_x, x]_q = 1. \quad (2.9)$$

De plus, il peut être démontré que

$$[\mathcal{D}_x, q^{x\partial_x}]_q = 0, \quad (2.10)$$

$$[\mathcal{D}_x, q^{-x\partial_x}]_{q^{-1}} = 0. \quad (2.11)$$

La généralisation des résultats ci-dessus est

$$[\mathcal{D}_x, q^{ax\partial_x}]_{q^a} = 0; a \in \mathbb{Q}, \quad (2.12)$$

$$[\mathcal{D}_x^n, q^{ax\partial_x}]_{q^{na}} = 0; n \in \mathbb{Z}, a \in \mathbb{Q}. \quad (2.13)$$

Ainsi

$$\mathcal{D}_x^2 q^{-x\partial_x} = \left(q^{-\frac{1}{4}} \mathcal{D}_x q^{-\frac{1}{2}x\partial_x} \right). \quad (2.14)$$

D'autres définitions de q -nombre de base et d'opérateur de différence q existent dans la littérature

$$[n]_q = \frac{q^n - q^{-n}}{q - q^{-1}}, \quad (2.15)$$

$$\mathcal{D}_x f(x) = \frac{f(qx) - f(q^{-1}x)}{q - q^{-1}}. \quad (2.16)$$

On peut voir que \mathcal{D}_x dont son conjoint

$$\mathcal{D}^+ = \mathcal{D}_x q^{-x\partial_x}, \quad (2.17)$$

n'est pas q -Hermite. Dons, nous prenons

$$\mathbf{p}^2 = -\hbar^2 \mathcal{D}_x^2 q^{-x\partial_x}. \quad (2.18)$$

Ainsi, l'équation de Schrödinger q -déformée devient

$$H_q \psi_q = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{D}_x^2 q^{-x\partial_x} + V(\mathbf{x}) \right\} \psi_q = E_q \psi_q. \quad (2.19)$$

A partir de (2.14), nous avons

$$\mathcal{D}_x^2 q^{-x\partial_x} = \left(q^{-\frac{1}{4}} \mathcal{D}_x q^{-\frac{1}{2}x\partial_x} \right)^2, \quad (2.20)$$

ce qui indique que l'opérateur de moment q -déformé a la forme

$$\mathbf{p} = -i\hbar q^{-\frac{1}{4}} \mathcal{D}_x q^{-\frac{1}{2}x\partial_x}. \quad (2.21)$$

Le signe est choisi de telle sorte que dans la limite $q \rightarrow 1$, l'expression de la mécanique quantique standard est retrouvée. Ainsi pour $q \neq 1$, l'opérateur de moment n'est pas hermitien. Cependant, le carré de l'opérateur de moment ainsi que l'hamiltonien sont q-hermitiens.

En mécanique quantique standard, seuls les opérateurs hermitiens ou anti-hermitiens peuvent donner un opérateur hermitien en les élevant au carré. En fait, il peut être démontré que toutes les puissances impaires de l'opérateur de moment ne sont pas q-hermitiennes et que toutes les puissances paires sont q-hermitiennes. Puisque le moment est le générateur de la translation, l'invariance translationnelle est absente en q-mécanique quantique.

2.4 L'oscillateur harmonique q-déformé

L'intérêt pour les applications possibles des algèbres quantiques en physique a été déclenché en 1989 par l'introduction de l'oscillateur harmonique q-déformé [4, 7, 8, 10, 12, 16, 17, 41], dont des versions équivalentes antérieures existaient. L'oscillateur harmonique q-déformé est défini en termes d'opérateurs de création et d'annihilation a^+ et a et de l'opérateur de nombre N , qui satisfont aux relations de commutation. L'oscillateur harmonique q-déformé est défini en termes de création et d'annihilation opérateurs a^+ et a et le numéro opérateur N , qui satisfont les relations de commutation [16, 20]

$$[N, a^+] = a^+, \quad (2.22)$$

$$[N, a] = -a. \quad (2.23)$$

L'oscillateur harmonique q-déformé est décrit par l'hamiltonien [20]

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (aa^+ + a^+a), \quad (2.24)$$

où ω est la fréquence de l'oscillateur et a^+ et a sont les opérateurs de création et d'annihilation satisfaisant le relation de commutation [10-12, 41]

$$[a, a^+]_q = aa^+ - qa^+a = 1, \quad (2.25)$$

avec le paramètre de déformation $q \in [0, 1]$. De plus, les conditions suivantes de conjugaison hermitienne sont satisfaites (dans le cas où q est un nombre réel ou une racine de l'unité)

$$(a^+)^+ = a, N^+ = N. \quad (2.26)$$

L'équation (2.25) est modifiée par la présence du paramètre de déformation q . Pour $q \rightarrow 1$, il est clair que l'équation (2.26) se réduit à la relation de commutation de boson habituelle $[a, a^+] = 1$.

Une conséquence immédiate de (2.26) est que

$$a^+a = [N], aa^+ = [N + 1]. \quad (2.27)$$

Ainsi, l'opérateur de nombre N n'est pas égal à a^+a , comme dans le cas ordinaire. Les opérateurs a^+ et a sont appelés respectivement les opérateurs de création et d'annihilation de bosons q-déformés.

La base de l'espace de Fock est définie par l'action répétée de l'opérateur de création a^+ sur l'état de vide, qui est annihilé par a [13, 18] :

$$a|n\rangle = 0, |n\rangle_q = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{[n]!}}|0\rangle_q. \quad (2.28)$$

Dans l'espace des vecteurs propres $\{|n\rangle\}, n = 0, 1, 2, \dots$, l'action des opérateurs sur la base est donnée par

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \quad (2.29)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{[n]}|n-1\rangle, \quad (2.30)$$

$$a^+|n\rangle = \sqrt{[n+1]}|n+1\rangle, \quad (2.31)$$

dont [18, 42]

$$[n]_q = \frac{q^{\frac{n}{2}} - q^{-\frac{n}{2}}}{q^{\frac{1}{2}} - q^{-\frac{1}{2}}}. \quad (2.32)$$

Nous remarquons que ces équations ressemblent beaucoup à celles du cas ordinaire, la seule différence étant que les q-nombres apparaissent sous les racines carrées au lieu des nombres habituels. L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique q-déformé q est [43]

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} ([n] + [n + 1]), \quad (2.33)$$

où sous une autre forme par :

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{q^{\frac{n}{2}} - q^{-\frac{n}{2}}}{q^{\frac{1}{2}} - q^{-\frac{1}{2}}} + \frac{q^{\frac{(n+1)}{2}} - q^{-\frac{(n+1)}{2}}}{q^{\frac{1}{2}} - q^{-\frac{1}{2}}} \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\left(\frac{q^{\frac{n}{2}} - q^{-\frac{n}{2}}}{2} \right)}{\left(\frac{q^{\frac{1}{2}} - q^{-\frac{1}{2}}}{2} \right)} + \frac{\left(\frac{q^{\frac{(n+1)}{2}} - q^{-\frac{(n+1)}{2}}}{2} \right)}{\left(\frac{q^{\frac{1}{2}} - q^{-\frac{1}{2}}}{2} \right)} \right). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Posons que $q = e^\gamma$, (2.34) devient

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{e^{\frac{\gamma n}{2}} - e^{-\frac{\gamma n}{2}}}{2} + \frac{e^{\gamma(\frac{n+1}{2})} - e^{-\gamma(\frac{n+1}{2})}}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\sinh \frac{\gamma n}{2}}{\sinh \frac{\gamma}{2}} + \frac{\sinh \frac{\gamma}{2} (n+1)}{\sinh \frac{\gamma}{2}} \right). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Ses valeurs propres dans la base donnée ci-dessus sont

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\sinh \frac{\gamma n}{2}}{\sinh \frac{\gamma}{2}} + \frac{\sinh \frac{\gamma}{2} (n+1)}{\sinh \frac{\gamma}{2}} \right). \quad (2.36)$$

où [41]

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\sinh \gamma (n + \frac{1}{2})}{\sinh \frac{\gamma}{2}}. \quad (2.37)$$

Maintenant, pour le cas $q = e^{i\gamma}$, (2.36) se transforme en :

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\sin \frac{\gamma n}{2}}{\sin \frac{\gamma}{2}} + \frac{\sin \frac{\gamma}{2} (n+1)}{\sin \frac{\gamma}{2}} \right), \quad (2.38)$$

où

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} \frac{\sin \gamma (n + \frac{1}{2})}{\sin \frac{\gamma}{2}}. \quad (2.39)$$

On peut facilement voir que pour $q = e^\gamma$ réel les valeurs propres d'énergie augmentent plus rapidement que dans le cas ordinaire, dans lequel le spectre est équidistant, c'est-à-dire que le spectre est "étendu". En revanche, pour q étant un facteur de phase ($q = e^{i\gamma}$ avec γ réel), les valeurs propres de l'énergie augmentent moins rapidement que dans le cas ordinaire (équidistant), c'est-à-dire que le spectre est "comprimé".

Dans les deux cas, dans la limite $q \rightarrow 1$ ($\gamma \rightarrow 0$), l'expression ordinaire Dans les deux cas dans la limite $q \rightarrow 1$ ($\gamma \rightarrow 0$), l'expression ordinaire

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2.40)$$

est retrouvée.

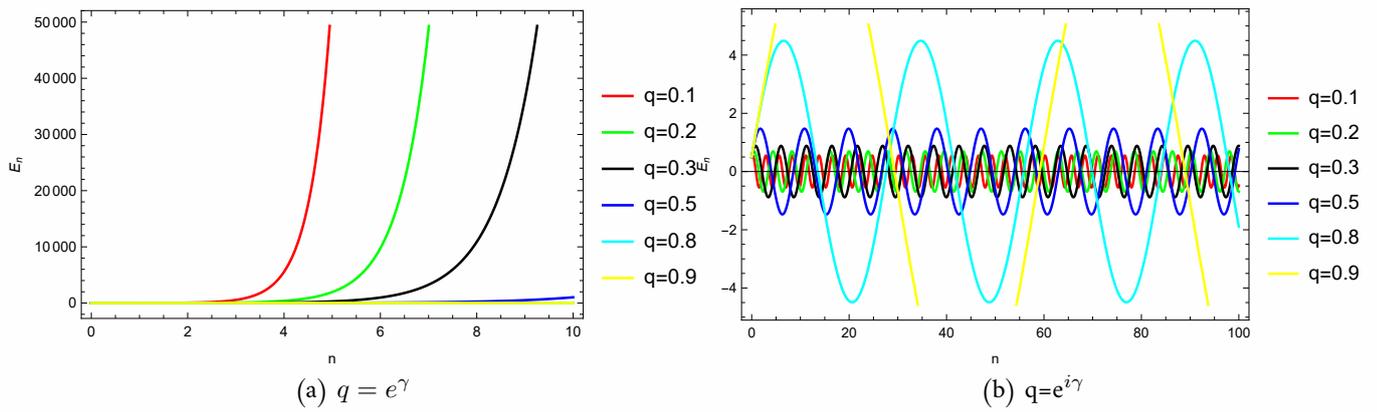


Figure 2.1 : Le spectre d'énergie q-déformée pour le cas réel et le cas complexe

CHAPITRE 3

LE MODÈLE DE DEBYE Q-DÉFORMÉ D'UN SOLIDE CRISTALLIN : SOLUTIONS EXACTES

في هذا الفصل، نقوم بتنفيذ الجبر q في نموذج كل من أينشتاين وديباي من أجل استكشاف الخصائص الحرارية للمواد الصلبة .

3.1 Modèle d'Einstein

Partons de la relation de l'énergie d'un oscillateur dont [11, 14, 19] :

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} ([n] + [n + 1]), \quad (3.1)$$

avec

$$[n] = \frac{\sinh \frac{n\gamma}{2}}{\sinh \frac{\gamma}{2}},$$

ainsi

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\sinh \frac{n\gamma}{2}}{\sinh \frac{\gamma}{2}} + \frac{\sinh \frac{\gamma(n+1)}{2}}{\sinh \frac{\gamma}{2}} \right). \quad (3.2)$$

Comme

$$\sinh \left(\frac{n\gamma}{2} \right) + \sinh \frac{\gamma(n+1)}{2} = 2 \sinh \frac{\gamma n + \gamma n + \gamma}{4} \cosh \frac{\gamma}{4}, \quad (3.3)$$

$$\cosh \frac{\gamma}{4} = \frac{\sinh \frac{\gamma}{2}}{2 \sinh \frac{\gamma}{4}}, \quad (3.4)$$

alors

$$\begin{aligned}
 E_n &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{2 \sinh \frac{2\gamma n + \gamma}{4} \cosh \frac{\gamma}{4}}{\sinh \frac{\gamma}{2}} \right) \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{2 \sinh \frac{2\gamma n + \gamma}{4} \sinh \frac{\gamma}{2}}{2 \sinh \frac{\gamma}{4} \sinh \frac{\gamma}{2}} \right) \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\sinh \frac{\gamma}{2} (n + \frac{1}{2})}{\sinh \frac{\gamma}{4}} \right).
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

À partir de cette expression, la fonction de partition dont :

$$Z_q = \sum \exp(-\beta E_n), \tag{3.6}$$

est donnée par [14]

$$Z_q = \sum \exp \left(-\beta \frac{\hbar\omega_E}{2} \left(\frac{\sinh \frac{\gamma}{2} (n + \frac{1}{2})}{\sinh \frac{\gamma}{4}} \right) \right). \tag{3.7}$$

Posons que

$$\beta = \frac{1}{k_B T}, \quad \Theta_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B},$$

on obtient

$$\begin{aligned}
 Z_q &= \sum \exp \left(-\frac{\Theta_E}{2T} \left(\frac{e^{(n+\frac{1}{2})\frac{\gamma}{2}} - e^{-(n+\frac{1}{2})\frac{\gamma}{2}}}{2 \sinh \frac{\gamma}{4}} \right) \right) \\
 &= \sum \exp \left(-\frac{\Theta_E}{4T \sinh \frac{\gamma}{4}} \left(q^{\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})} - q^{-\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})} \right) \right) \\
 &= \sum \exp -2 \left[\frac{\Theta_E (\sqrt{q} + 1)}{8T \sqrt[4]{q} \sinh \frac{\gamma}{4}} \right] \left[\frac{q^{\frac{n}{2}} \sqrt{q} - q^{-\frac{n}{2}}}{\sqrt{q} + 1} \right].
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Soit

$$\alpha_q = \frac{\Theta_E (\sqrt{q} + 1)}{8T \sqrt[4]{q} \sinh \frac{\gamma}{4}}, \tag{3.9}$$

alors

$$Z_q = \sum \exp \left(-2\alpha_q \left[\frac{q^{\frac{n}{2}} \sqrt{q} - q^{-\frac{n}{2}}}{\sqrt{q} + 1} \right] \right). \tag{3.10}$$

Cette équation peut être mise sous une autre forme par [14]

$$Z_q = \frac{q^{\alpha_q} \exp \left(-2\alpha_q \left(\frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} \right) \right)}{q^{\alpha_q} - 1}. \tag{3.11}$$

3.1.1 Les propriétés thermodynamiques q-déformées

La détermination de toutes les propriétés thermiques, comme l'énergie libre, l'entropie, l'énergie totale et la capacité thermique, est obtenue par la relation de la fonction de partition Z [34]. Ainsi

- **L'énergie libre F** : l'énergie libre q-déformée suit l'expression suivante :

$$F_q = -\frac{1}{\beta} \ln Z_q, \quad (3.12)$$

$$F_q = k_B T \left(2\alpha_q \left(\frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} \right) - \ln q^{\alpha_q} + \ln (q^{\alpha_q} - 1) \right). \quad (3.13)$$

- **L'entropie S** : En utilisant le résultat de l'équation (3.13), on définit l'entropie q-déformée par

$$S_q = -\frac{\partial F_q}{\partial T}, \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} S_q &= k_B \left(2\alpha_q \left(\frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} \right) - \ln q^{\alpha_q} + \ln (q^{\alpha_q} - 1) \right) \\ &\quad - k_B T \frac{\partial \alpha_q}{\partial T} \frac{\partial}{\partial \alpha_q} \left(2\alpha_q \left(\frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} \right) - \ln q^{\alpha_q} + \ln (q^{\alpha_q} - 1) \right) \\ &= -k_B \left(2\alpha_q \left(\frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} \right) - \ln q^{\alpha_q} + \ln (q^{\alpha_q} - 1) \right) + k_B T \frac{\alpha_q}{T} \left(2 \left(\frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} \right) + \frac{\ln q}{(q^{\alpha_q} - 1)} \right), \end{aligned} \quad (3.15)$$

où

$$S_q = k_B \left(\ln q^{\alpha_q} - \ln (q^{\alpha_q} - 1) + \frac{\alpha_q \ln q}{(q^{\alpha_q} - 1)} \right). \quad (3.16)$$

- **L'énergie totale U** : partons de

$$U_q = -\frac{\partial \ln Z_q}{\partial \beta} = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z_q}{\partial T}, \quad (3.17)$$

dont

$$U_q = k_B T^2 \cdot \left(\frac{\partial \alpha_q}{\partial T} \cdot \frac{\partial \ln Z_q}{\partial \alpha_q} \right), \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial \ln Z_q}{\partial \alpha_q} = \left(-2 \frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} - \frac{\ln q}{q^{\alpha_q} - 1} \right), \quad (3.19)$$

ainsi, l'énergie totale q-déformée

$$U_q = k_B T \left(2\alpha_q \frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} + \frac{\alpha_q \ln q}{q^{\alpha_q} - 1} \right). \quad (3.20)$$

- **Capacité thermique C_V** : La capacité thermique q-déformée est déterminée par :

$$C_{V_q} = T \frac{\partial S_q}{\partial T}, \quad (3.21)$$

où

$$C_{V_q} = T \left(\frac{\partial \alpha_q}{\partial T} \cdot \frac{\partial S_q}{\partial \alpha_q} \right) = -\alpha_q \frac{\partial S_q}{\partial \alpha_q}, \quad (3.22)$$

avec

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_q}{\partial \alpha_q} &= k_B \left(\ln q - \frac{q^{\alpha_q} \ln q}{(q^{\alpha_q} - 1)} + \frac{\ln q}{(q^{\alpha_q} - 1)} + \alpha_q \ln q \frac{q^{\alpha_q} \ln q}{(q^{\alpha_q} - 1)^2} \right) \\ &= k_B \left(-q^{\alpha_q} \frac{\alpha_q (\ln q)^2}{(q^{\alpha_q} - 1)^2} \right). \end{aligned} \quad (3.23)$$

par conséquent la capacité thermique déformée à volume constant selon Einstein s'exprime, sous la forme :

$$C_{V_q} = k_B q^{\alpha_q} \left(\frac{\alpha_q \ln q}{(q^{\alpha_q} - 1)} \right)^2. \quad (3.24)$$

Posons que

$$E(\alpha_q) = q^{\alpha_q} \left(\frac{\alpha_q \ln q}{(q^{\alpha_q} - 1)} \right)^2, \quad (3.25)$$

dont $E(\alpha_q)$ est la fonction q-déformée d'Eintein. Dans ce cas, la chaleur spécifique sera

$$C_{V_q} = 3k_B E(\alpha_q). \quad (3.26)$$

Figure. 3.1 montre la chaleur spécifique déformée selon le modèle d'Einstein pour différentes valeurs de q

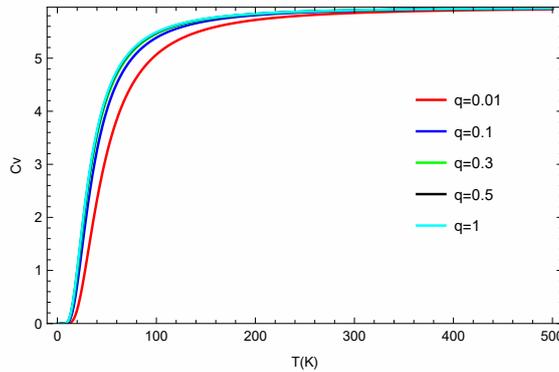


Fig. 3.1 : La capacité thermique d'Einstein q-déformée (en cal/mol.K) en fonction de la température pour différents valeurs de q

À travers l'étude de la relation obtenue et la figure (3.1), le comportement de la capacité thermique déformée est identique aux études précédentes. Ainsi,

- A haute température, $T \gg \Theta_E$, (voir figure. 3.1) nous obtenons le résultat classique, loi de dulong et petit $C_{V_q} = 3k_B$ c'est à dire la capacité thermique est constante
- A basse température, $T \ll \Theta_E$, (voir figure. 3.2), la décroissance de la capacité thermique

observée suit la forme suivante

$$C_{V_q} = 3k_B \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{\Theta_E q}{T}}, \quad \Theta_{E_q} = \frac{\Theta_E (\sqrt{q} + 1) \ln q}{4(\sqrt{q} - 1)} \quad (3.27)$$

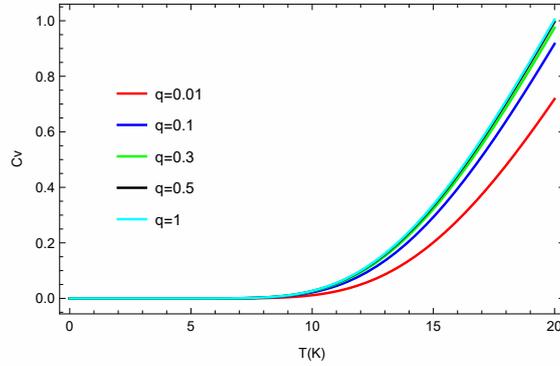


Fig. 3.2 : La capacité thermique d'Einstein q-déformée (en cal/mol.K) à basse température

Dans le cas où $q = 1$, on trouve la formule bien connue [33, 34, 36, 37]

$$C_{V_q} = 3k_B \left(\frac{\Theta_E}{T} \right)^2 e^{-\frac{\Theta_E}{T}}, \quad (3.28)$$

En général, et d'après l'analyse des courbes obtenues, nous concluons que le modèle d'Einstein en physique de solide est une approximation qui permet de décrire la contribution des vibrations de réseau des matériaux. Nous constatons également que la déformation q influence les valeurs de la capacité thermique de sorte que la courbe s'éloigne du modèle d'Einstein et cette déviation augmente lorsque la valeur q diminue. Lorsque q est inférieur à 0,1, nous observons un changement significatif dans la courbe à des températures moyennes. Nous remarquons également une correspondance dans les courbes à partir de $q=0,3$, c'est-à-dire qu'elles sortent de l'état déformé.

3.2 Modèle de Debye

Dans le modèle de Debye, les atomes vibrent de manière interconnectée, c'est-à-dire qu'ils ne sont pas indépendants. Donc il faut étudié la vibration du cristal dans son ensemble [33, 36, 37].

A travers le modèle Debye, en peut écrire l'énergie thermique du cristal sous la forme :

$$U_{Dq} = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega U_q, \quad (3.29)$$

avec U_q est l'énergie interne q-déformée de l'oscillateur harmonique [14]

$$U_{Dq} = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega . k_B T \left(2\alpha_{0q} \frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} + \frac{\alpha_{0q} \ln q}{q^{\alpha_{0q}} - 1} \right), \quad (3.30)$$

dont

$$\alpha_{0q} = \frac{\hbar\omega_q}{k_B T} = \frac{\Theta_{Dq}}{T}, \quad \omega_{Dq} = \frac{\omega \sinh \frac{\ln q}{2}}{2 \sinh \frac{\ln q}{4}},$$

avec ω_{Dq} est la fréquence q-déformé de Debye et Θ_{Dq} la température déformé de Debye [14,44].

Ainsi,

$$\begin{aligned} U_{Dq} &= \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega . k_B T \left(2 \frac{\hbar\omega \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}} \frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} + \frac{\hbar\omega \ln q \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \left(\frac{\ln q}{4}\right) q^{\frac{\hbar\omega \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}} - 1}} \right) \quad (3.31) \\ &= \int_0^{\omega_D} \frac{V\omega^2}{2\pi^2 c^3} \left(\frac{\hbar\omega \sinh \frac{\ln q}{2}}{\sinh \frac{\ln q}{4}} \frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} + \frac{\hbar\omega \ln q \sinh \frac{\ln q}{2}}{2 \sinh \left(\frac{\ln q}{4}\right) q^{\frac{\hbar\omega \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}} - 1}} \right) d\omega \\ &= \left(\frac{V\hbar \sinh \frac{\ln q}{2}}{8\pi^2 c^3 \sinh \frac{\ln q}{4}} \frac{\sqrt{q}-1}{\sqrt{q}+1} \right) \omega^4 + \frac{V\hbar \sinh \frac{\ln q}{2} \ln q}{4\pi^2 c^3 \sinh \frac{\ln q}{4}} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega \ln q \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}} - 1}} d\omega. \end{aligned}$$

La chaleur spécifique q-déformée de Debye est défini par

$$C_{Vq} = \frac{\partial U_{Dq}}{\partial T}, \quad (3.32)$$

alors

$$\begin{aligned} C_{Vq} &= \frac{V\hbar \ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}}{4\pi^2 c^3 \sinh \frac{\ln q}{4}} \int_0^{\omega_D} \frac{\frac{\hbar \ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T^2 \sinh \frac{\ln q}{4}} \omega^4 e^{\frac{\hbar\omega \ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega \ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}} - 1} \right)^2} d\omega \quad (3.33) \\ &= \frac{V^2 \hbar^2 (\ln q)^2 \sinh^2 \left(\frac{\ln q}{2}\right)}{8\pi^2 c^3 k_B T^2 \sinh^2 \left(\frac{\ln q}{4}\right)} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^4 e^{\frac{\hbar\omega \ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega \ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}} - 1} \right)^2} d\omega. \end{aligned}$$

Posons que

$$\alpha = \frac{\hbar\omega \ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}}{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}}, \quad (3.34)$$

on obtient

$$C_{Vq} = \frac{V^2 \hbar^2 (\ln q)^2 \sinh^2 \left(\frac{\ln q}{2} \right)}{8\pi^2 c^3 k_B T^2 \sinh^2 \left(\frac{\ln q}{4} \right)} \left(\frac{2k_B T \sinh \frac{\ln q}{4}}{\hbar \ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}} \right)^5 \int_0^{\omega_D} \frac{\alpha^4 e^\alpha}{(e^\alpha - 1)^2} d\alpha \quad (3.35)$$

$$= \frac{4k_B V^2}{\pi^2 c^3} \left(\frac{\sinh \frac{\ln q}{4}}{\ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}} \right)^3 \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_0^{\alpha_{0q}} \frac{\alpha^4 e^\alpha}{(e^\alpha - 1)^2} d\alpha.$$

À travers de l'équation (3.35), la forme finale de C_{Vq} est :

$$C_{Vq} = \frac{24Nk_B}{\omega_D^3} \left(\frac{\sinh \frac{\ln q}{4}}{\ln(q) \sinh \frac{\ln q}{2}} \right)^3 \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 \int_0^{\alpha_{0q}} \frac{\alpha^4 e^\alpha}{(e^\alpha - 1)^2} d\alpha. \quad (3.36)$$

Cette fonction peut être mise sous une autre forme par [14, 44] :

$$C_{Vq} = 3Nk_B D(\alpha_0)_q, \quad (3.37)$$

où

$$D(\alpha_0)_q = \frac{3}{\alpha_{0q}^3} \int_0^{\alpha_{0q}} \frac{\alpha^4 e^\alpha}{(e^\alpha - 1)^2} d\alpha. \quad (3.38)$$

L'intégration de l'équation (3.38) donne :

$$D(\alpha_0)_q = -\frac{3\alpha_{0q}}{1 - e^{-\alpha_{0q}}} + \frac{12}{\alpha_{0q}^3} \int_0^{\alpha_{0q}} \frac{\alpha^4}{1 - e^{-\alpha}} d\alpha. \quad (3.39)$$

En simplifiant la relation (3.39), nous obtenons :

$$D(\alpha_0)_q = \frac{3\alpha_{0q}}{1 - e^{-\alpha_{0q}}} + \frac{12}{\alpha_{0q}^3} \left(-\frac{\pi^4}{15} + \alpha_{0q}^3 \ln(1 - e^{-\alpha_{0q}}) + 3\alpha_{0q}^2 \text{Li}_2[\exp(\alpha_{0q})] \right) \quad (3.40)$$

$$+ \frac{12}{\alpha_{0q}^3} \left(-\frac{1}{2} \text{Li}_3[\exp(\alpha_{0q})] + 6\text{Li}_4[\exp(\alpha_{0q})] \right).$$

dont

$$\text{Li}_s = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^s},$$

est la fonction polylogarithme [45]. Le paramètre s et l'argument z sont pris sur l'ensemble des nombres complexes \mathbb{C} .

Les cas particuliers $s = 2$ et $s = 3$ sont appelés le polylogarithme d'ordre 2 ou dilogarithme et le polylogarithme d'ordre 3 ou trilogarithme respectivement ¹. Figure. 3.3 montre la capacité thermique

¹Le polylogarithme apparaît également dans la forme fermée de l'intégrale de la distribution de Fermi-Dirac et la distribution de Bose-Einstein. Il est parfois connu sous le nom d'intégrale de Fermi-Dirac ou d'intégrale de Bose-Einstein.

q-déformée pour différentes valeurs de q

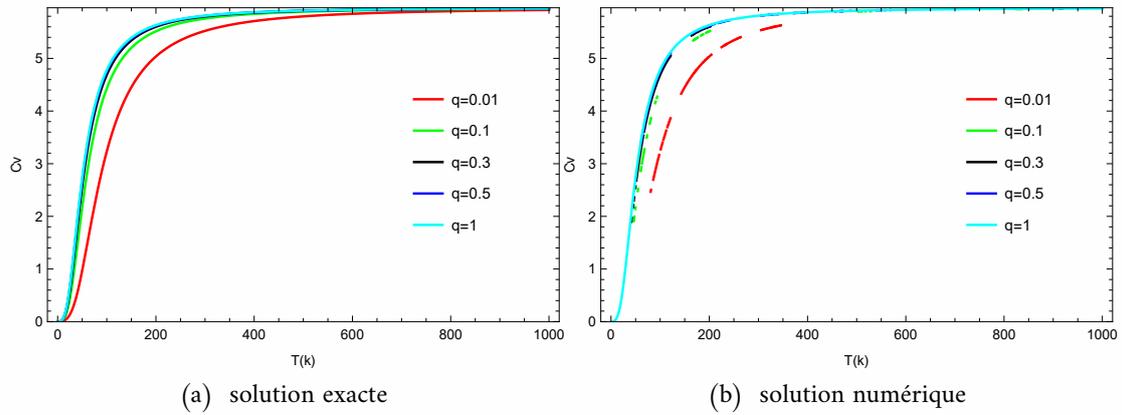


Fig. 3.3 : La capacité thermique de Debye q-déformée (en cal/mol.K) en fonction de température pour différents valeurs de q

Pour le cas asymptotiques, on distingue deux régions :

- **À haute température**, $T \gg \Theta_{Dq}$, c'est à dire $\alpha_{0q} \ll 1$, on a

$$C_{Vq} = 3Nk_B D(\alpha_0)_q = 9Nk_B \frac{T}{\Theta_{Dq}} \int_0^{\alpha_{0q}} \frac{\alpha^4 e^\alpha}{(e^\alpha - 1)^2} d\alpha. \quad (3.41)$$

Sachant que $e^x \simeq 1 + x$ alors

$$\begin{aligned} C_{Vq} &= 9Nk_B \frac{T}{\Theta_{Dq}} \int_0^{\alpha_{0q}} \alpha^2 e^\alpha d\alpha \\ &= 9Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_{Dq}} \right)^3 \int_0^{\alpha_{0q}} (\alpha^3 + \alpha^2) d\alpha, \end{aligned} \quad (3.42)$$

comme α est trop faible, on trouve

$$C_{Vq} = 3Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_{Dq}} \right)^3 \alpha_{0q}^3, \quad (3.43)$$

ainsi, on retrouve la loi de Dulong et Petit

$$C_{Vq} = 3Nk_B. \quad (3.44)$$

- **À basse température**, $T \ll \Theta_{Dq}$, c'est à dire $\alpha_{0q} \gg 1$, En ce cas l'intégrale est une constante numérique, On démontre [33]

$$C_{Vq} = 9Nk_B \frac{4\pi^4}{15\alpha_{0q}^3}, \quad (3.45)$$

dont

$$\int_0^{\infty} \frac{\alpha^4 e^{\alpha}}{(e^{\alpha} - 1)^2} d\alpha = \frac{4\pi^4}{15}. \quad (3.46)$$

Ainsi, on trouve [14, 44]

$$C_{Vq} = 233Nk_B \left(\frac{T}{\Theta_{Dq}} \right)^3. \quad (3.47)$$

Selon la figure (3.3), la capacité thermique dans un solide de Debye q-déformée est en bon accord avec les résultats expérimentaux. Les changements de capacité thermique et la température de Debye peuvent également être observés par l'effet de q-déformée.

La courbe 3.4 représente l'évaluation de la température de Debye en fonction de la variable q pour différents matériaux (Argent, Cuivre, Plomb, Aluminium). On remarque que la courbe représente une augmentation de la température pour les valeurs de q inférieures à 0,1. Cette augmentation implique l'influence de q-déformée sur le comportement de la capacité thermique, et cet effet est seulement important aux faibles valeurs de q. Par contre, pour les valeurs de q supérieures à 0,1 lorsque q tend vers 1, on note une stabilité dans les courbes. Cette stabilité indique l'absence de l'influence de la déformation.

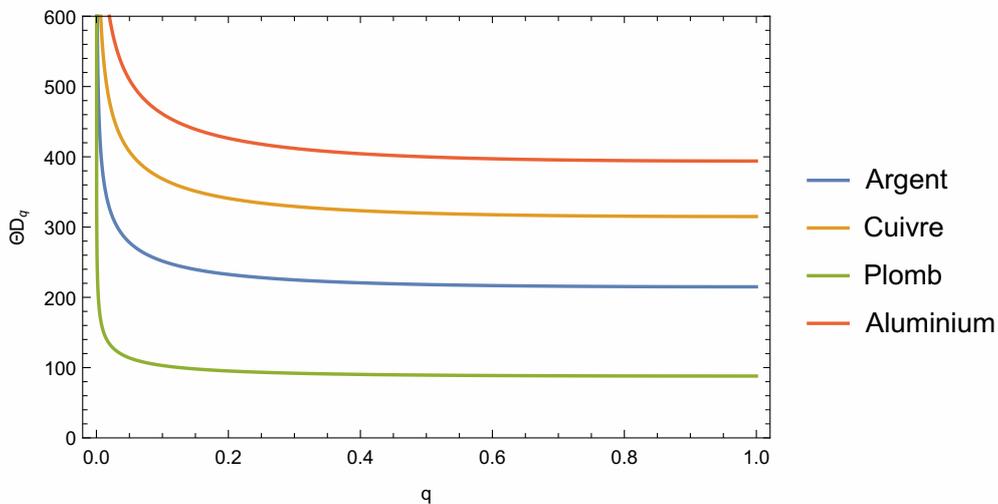


Fig. 3.4 : Température de Debye en fonction de q-déformée

Les figures 3.5, 3.6, 3.7 et 3.8 montrent les valeurs expérimentales et l'influence de q-déformée sur l'évaluation de la capacité thermique qui ont été mesurées dans cette étude à partir de l'approximation de Debye pour quatre matériaux (Argent, Plomb, Aluminium, Cuivre).

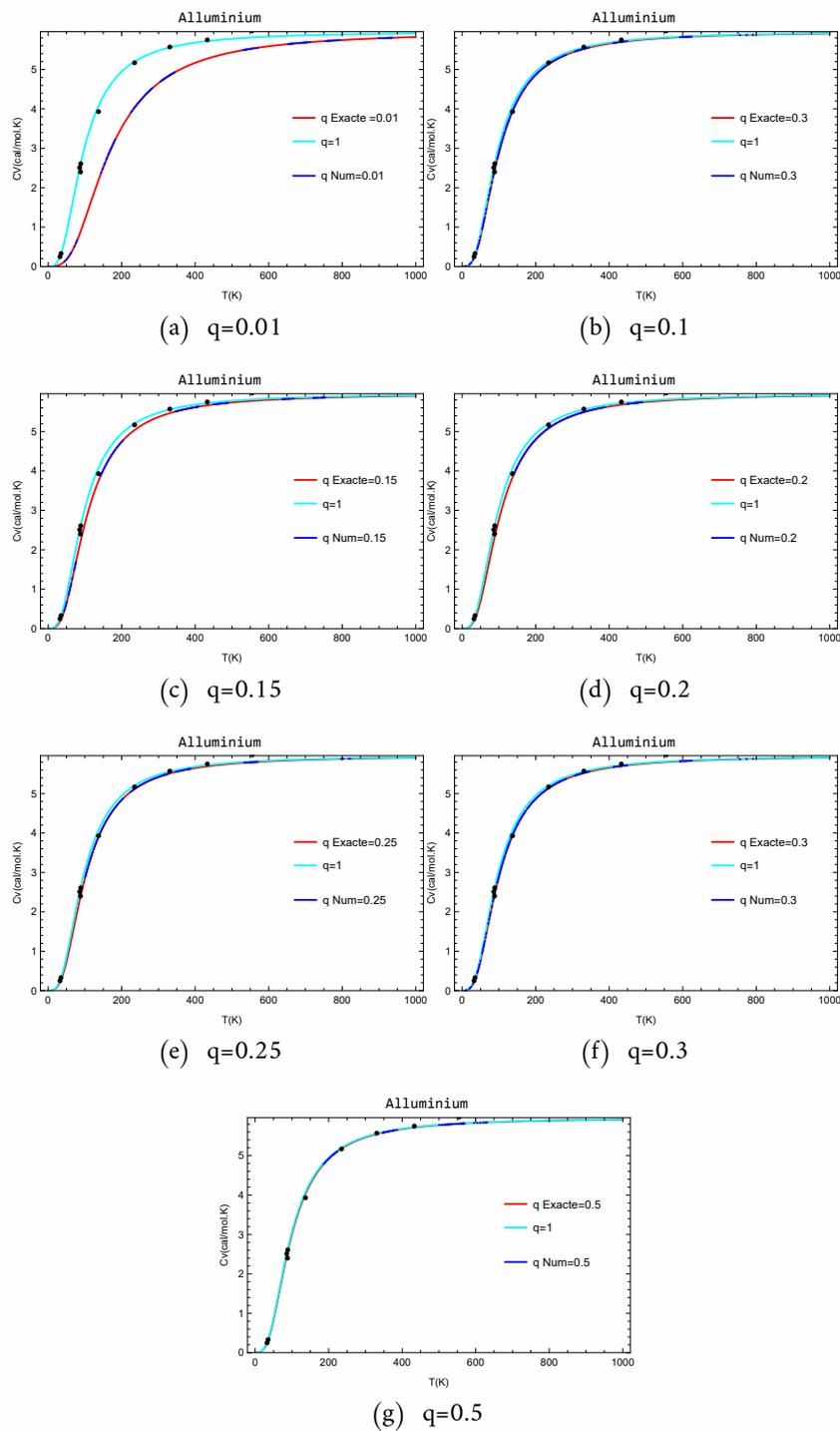


Fig. 3.5 : Capacité thermique de l'Alluminium (en cal/mol.k) en fonction de la température pour différents valeurs de q ($\Theta_D = 394K$)

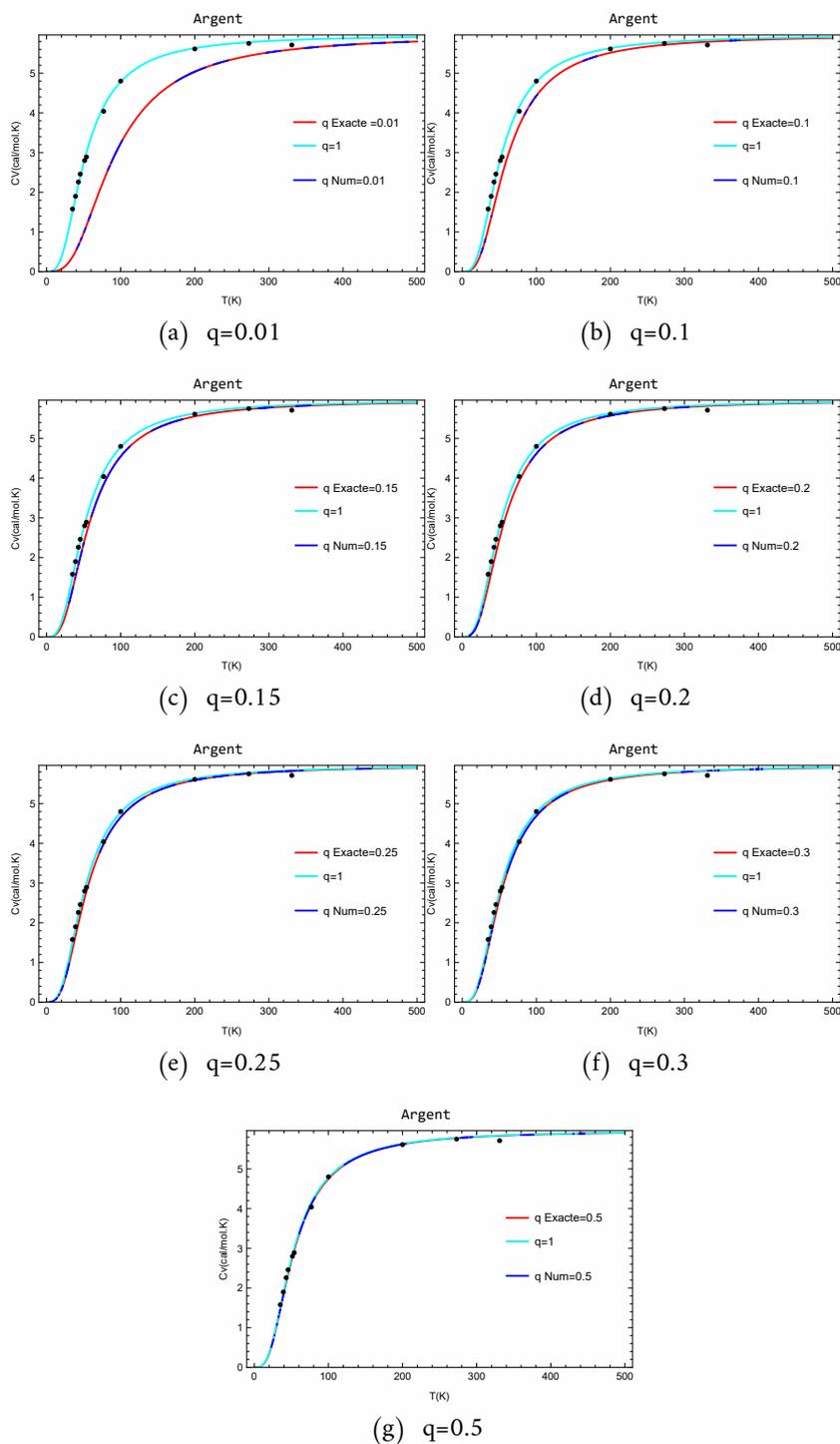


Fig. 3.6 : Capacité thermique de l'Argent (en cal/mol.k) en fonction de la température pour différents valeurs de q ($\Theta_D = 215K$)

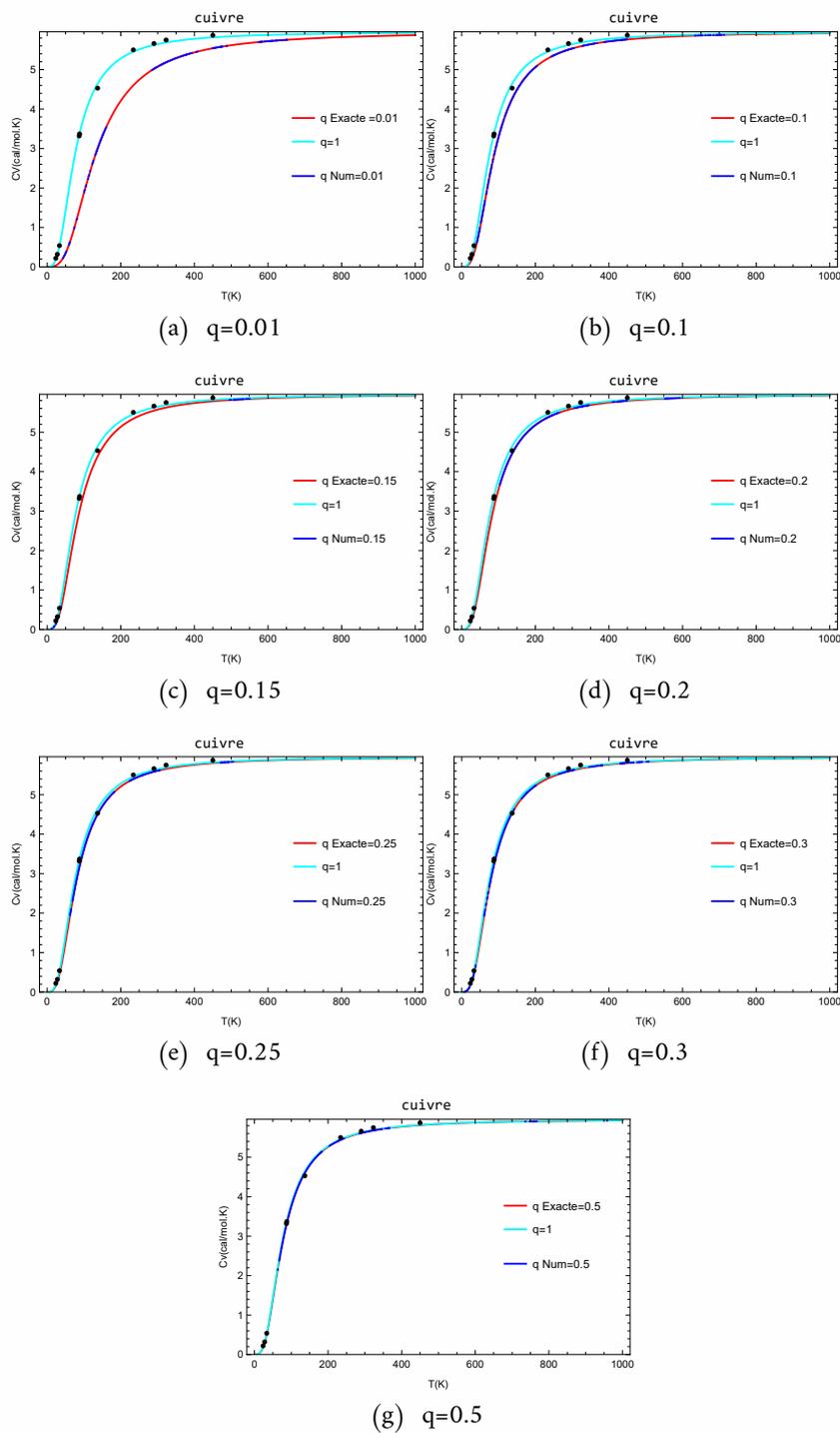


Fig. 3.7 : Capacité thermique de la cuivre (en cal/mol.k) en fonction de la température pour différents valeurs de q ($\Theta_D = 315K$)

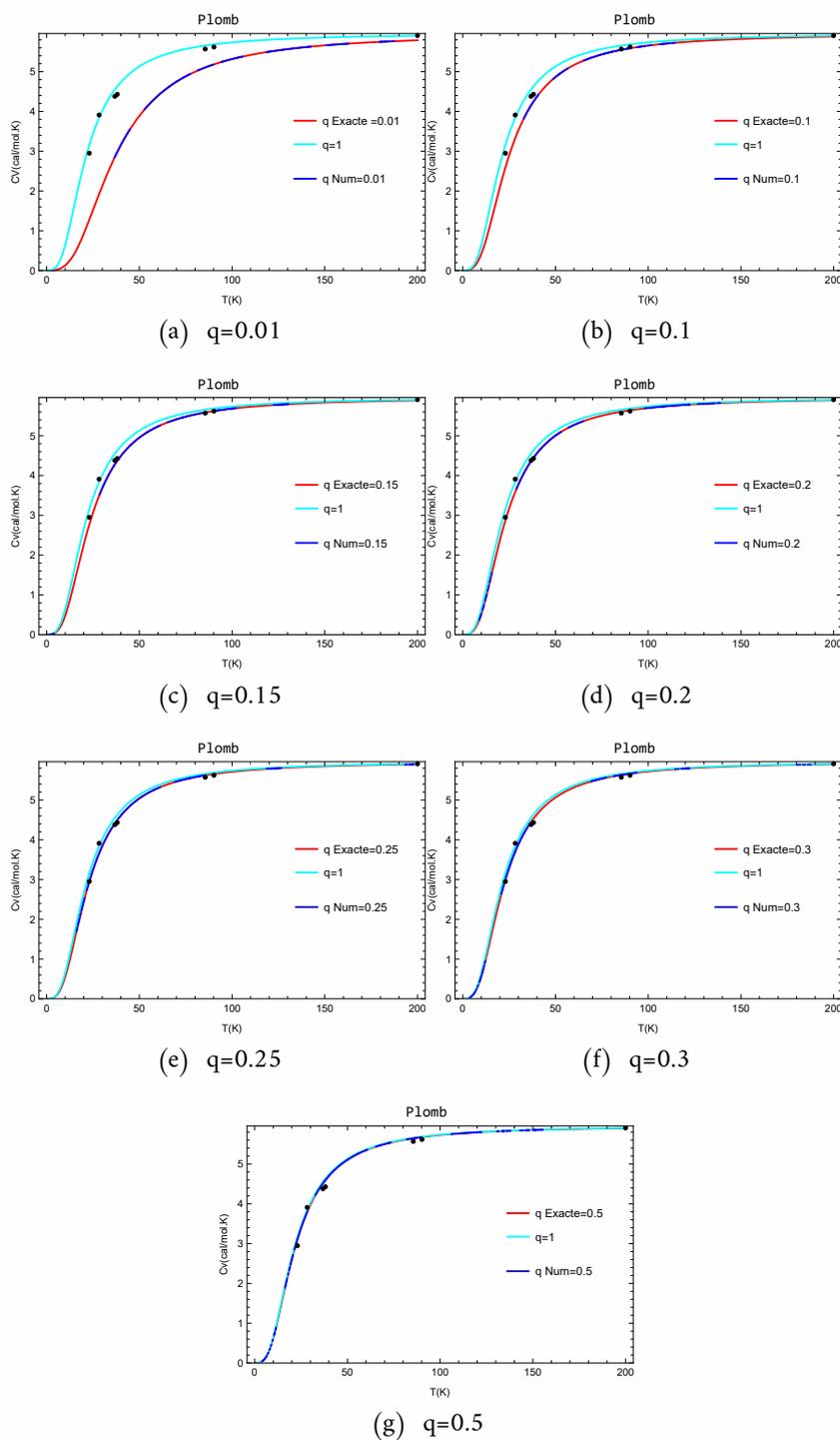


Fig. 3.8 : Capacité thermique de le Plomb (en cal/mol.k) en fonction de la température pour différents valeurs de q ($\Theta_D = 88K$)

3.3 La conductivité thermique et électrique

La conductivité thermique q -déformée suit l'expression [36, 37]

$$k_q = \frac{1}{3} C_{Vq} v \ell, \tag{3.48}$$

dont v est la vitesse des particules et l le libre parcours moyen entre ces particules

$$k_q = \frac{kC_V q}{c_v}. \quad (3.49)$$

Aussi, la conductivité électrique déformée est donnée par [44]

$$\sigma_q = \frac{k_q \sigma}{k}. \quad (3.50)$$

La relation entre la conductivité thermique et la conductivité électrique est indépendante de l'état déformé. Alors la loi de Widmann-Franz est constante, quels que soient la température et le mécanisme de diffusion. Elle est souvent très satisfaisante avec l'expérience et le nombre de Lorenz correcte est donné par

$$L = \frac{k_q}{\sigma_q} = \frac{k_q}{\frac{k_q \sigma}{k}} = \frac{k}{\sigma}. \quad (3.51)$$

La figure. (3.9) montre que les valeurs de la conductivité thermique et la conductivité électrique s'écartent de l'état normal. En particulier aux valeurs de q égale 0.01 et 0.1.

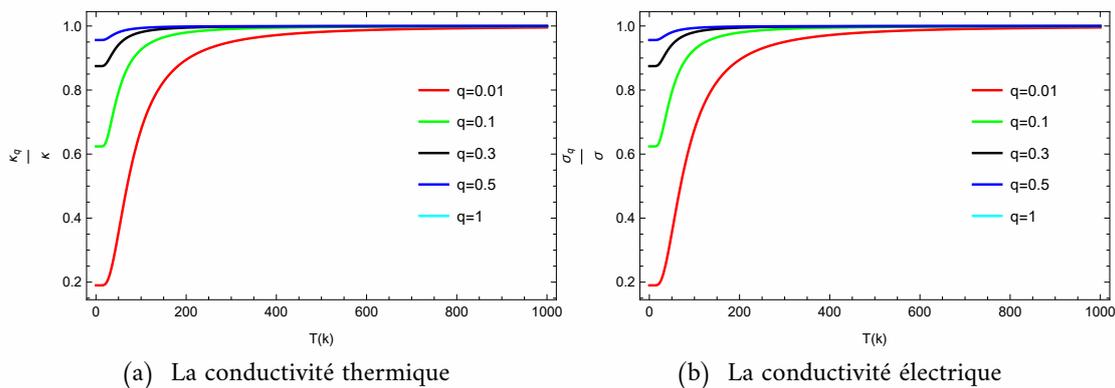


Fig. 3.9 : (a) Le rapport entre la conductivité thermique déformée et non déformée ,(b) le rapport entre la conductivité électrique déformée et non déformée, en fonction de la température

CHAPITRE 4

LE MODÈLE DE DEBYE Q-DÉFORMÉ D'UN SOLIDE CRISTALLIN : SOLUTIONS APPROXIMATIVES

4.1 L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique q-déformé

L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique q-déformée est

$$H_q = \frac{\hbar\omega}{2} ([N] + [N + 1]). \quad (4.1)$$

Soit $q = e^{i\gamma}$ dont

$$[N + 1] = \frac{\sin(N + 1)\gamma}{\sin \gamma}, \text{ et, } [N] = \frac{\sin N\gamma}{\sin \gamma}, \quad (4.2)$$

alors

$$H_q = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\sin N\gamma}{\sin \gamma} + \frac{\sin(N + 1)\gamma}{\sin \gamma} \right). \quad (4.3)$$

Comme $\sin x = x - \frac{x^3}{3!}$, (4.3) devient

$$\begin{aligned} H_q &\simeq \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{N\gamma - \frac{N^3}{3!}\gamma^3 + (N+1)\gamma - \frac{(N+1)^3}{3!}\gamma^3}{\gamma - \frac{\gamma^3}{3!}} \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{N - \frac{N^3}{3!}\gamma^2 + (N+1) - \frac{(N+1)^3}{3!}\gamma^2}{1 - \frac{\gamma^2}{3!}} \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left((2N+1) - \frac{\gamma^2}{3!} (N^3 + (N+1)^3) \right) \left(1 - \frac{\gamma^2}{3!} \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

lorsque $q \rightarrow 1$, $\gamma \rightarrow 0$.

On ne retient que les termes jusqu'à γ^2 , ainsi

$$\begin{aligned} H_q &\simeq \frac{\hbar\omega}{2} \left((2N+1) - \frac{\gamma^2}{3!} (N^3 + (N+1)^3) \right) \left(1 + \frac{\gamma^2}{3!} \right) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (2N+1) - \frac{\gamma^2 \hbar\omega}{3! \cdot 2} (N^3 + (N+1)^3 - (2N+1)). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Cette fonction se met sous une autre forme par

$$H_q = H_0 - \frac{\gamma^2}{3!} H_1. \quad (4.6)$$

L'Hamiltonien globale de l'oscillateur harmonique q-déformée contient deux parties ; partie non déformée, et partie déformée dépend du paramètre de déformation γ dont

$$H_0 = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right). \quad (4.7)$$

$$H_1 = \frac{\hbar\omega}{2} (N^3 + (N+1)^3 - (2N+1)). \quad (4.8)$$

4.2 La fonction de partition

Notre objectif principal est d'obtenir cette fonction de partition pour les petites déformation ; dans ce cas la sommation apparaissant en Z peut être facilement effectué ainsi que tous les potentiel thermodynamique tels que l'énergie totale U , la capacité thermique et la conductivité thermique [34].

Ainsi,

$$\begin{aligned}
 Z_q &= \text{Tr} \exp(-\beta H_q) & (4.9) \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | \exp(-\beta H_q) | n \rangle \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta H_0} \cdot e^{\frac{\gamma^2}{3!} \beta H_1} | n \rangle \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta H_0} \left(1 + \frac{\gamma^2}{3!} \beta H_1 \right) | n \rangle \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta H_0} | n \rangle + \frac{\gamma^2}{3!} \beta \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | H_1 e^{-\beta H_0} | n \rangle \\
 &= Z_0 + \frac{\gamma^2}{3!} \beta \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | H_1 e^{-\beta H_0} | n \rangle,
 \end{aligned}$$

enfin

$$Z_q = Z_0 \left[1 + \frac{\frac{\gamma^2}{3!} \beta \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | H_1 e^{-\beta H_0} | n \rangle}{\sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta H_0} | n \rangle} \right]. \quad (4.10)$$

L'évaluation du terme $\sum_{n=0}^{\infty} \langle n | H_1 e^{-\beta H_0} | n \rangle$ se calcul comme suit :

$$\begin{aligned}
 \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | H_1 e^{-\beta H_0} | n \rangle &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | (N+1)^3 e^{-\beta\hbar\omega(N+\frac{1}{2})} | n \rangle + \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | N^3 e^{-\beta\hbar\omega(N+\frac{1}{2})} | n \rangle \right\} \\
 & \quad (4.11) \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | (2N+1) e^{-\beta\hbar\omega(N+\frac{1}{2})} | n \rangle \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\hbar\omega}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | (2N+1) e^{-\beta\hbar\omega(N+\frac{1}{2})} | n \rangle \right. \\
 & \quad \left. = \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)^3 e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} + \sum_{n=0}^{\infty} n^3 e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} - \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} \right\} \right.
 \end{aligned}$$

Posons $x = \beta\hbar\omega$, (4.11) devient

$$\begin{aligned}
 \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | H_1 e^{-\beta H_0} | n \rangle &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ e^{\frac{x}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)^3 e^{-x(n+1)} + e^{-\frac{x}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} n^3 e^{-xn} \right\} \\
 &- \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ 2e^{-\frac{x}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-xn} + e^{-\frac{x}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-xn} \right\} \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -e^{\frac{x}{2}} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-x(n+1)} - e^{-\frac{x}{2}} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-xn} + 2e^{-\frac{x}{2}} \frac{\partial}{\partial x} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-xn} - e^{-\frac{x}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-xn} \right\} \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -e^{\frac{x}{2}} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \left(\frac{1}{e^x - 1} \right) - e^{-\frac{x}{2}} \frac{\partial^3}{\partial x^3} \left(\frac{e^x}{e^x - 1} \right) + 2e^{-\frac{x}{2}} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{e^x}{e^x - 1} \right) - \frac{e^{\frac{x}{2}}}{e^x - 1} \right\} \\
 &= \frac{\hbar\omega}{2} \left\{ -\frac{e^{\frac{x}{2}}}{e^x - 1} - \frac{2e^{\frac{x}{2}}}{(e^x - 1)^2} + \frac{e^{\frac{x}{2}} (e^x + 1) (1 + 4e^x + e^{2x})}{(e^x - 1)^4} \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Enfin

$$\begin{aligned}
 Z_q &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \langle n | H_1 e^{-\beta H_0} | n \rangle}{\sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\beta H_0} | n \rangle} \\
 &= -\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \hbar\omega \sinh \left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) f(\beta\hbar\omega),
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

dont

$$f(\beta\hbar\omega) = \frac{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}} (e^{\beta\hbar\omega} + 1) (1 + 4e^{\beta\hbar\omega} + e^{2\beta\hbar\omega})}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^4}. \tag{4.14}$$

Finalement

$$Z_q = Z_0 \left[1 - \frac{\gamma^2}{3!} (U_1)_i \right], \tag{4.15}$$

avec

$$(U_1)_i = \frac{x_i}{2} + \frac{x_i}{e^{x_i} - 1} - x_i \sinh \left(\frac{x_i}{2} \right) f(x_i),$$

et

$$(U_1)_i = -3! \frac{x_i e^{x_i} (e^{x_i} + 1)}{2 (e^{x_i} + 1)^3}, \tag{4.16}$$

avec $x_i = \beta\hbar\omega_i$ pour chaque atome. Pour N atome, on trouve

$$\bar{Z}_q = \prod_i Z_{q_i} = \prod_i Z_0 \left[1 - \frac{\gamma^2}{3!} (U_1)_i \right]. \tag{4.17}$$

4.3 L'énergie totale

La détermination de l'énergie thermique \bar{U}_q de l'oscillateur harmonique en q-déformé obtenue par la fonction de partition \bar{Z}_q en utilisant la relation suivant :

$$\begin{aligned}
 \bar{U}_q &= k_B T^2 \frac{\partial \ln \bar{Z}_q}{\partial T} \\
 &= k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln \left\{ \prod_i Z_0 \left(1 - \frac{\gamma^2}{3!} (U_1)_i \right) \right\} \\
 &= k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \sum_i \left[\ln Z_0 + \ln \left(1 - \frac{\gamma^2}{3!} (U_1)_i \right) \right] \right\} \\
 &= k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z_0 + k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \sum_i \ln \left(1 - \frac{\gamma^2}{3!} (U_1)_i \right) \\
 &= k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z_0 + k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \sum_i - \frac{\gamma^2}{3!} (U_1)_i,
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

enfin

$$\bar{U}_q = U_0 - k_B T^2 \frac{\gamma^2}{3!} \sum_i \frac{\partial}{\partial T} (U_1)_i, \tag{4.19}$$

dont

$$\frac{\partial U_1}{\partial T} = - \frac{\hbar \omega}{k_B T^2} \frac{3!}{2} \frac{e^x}{(e^x - 1)^4} \{ 1 + x + 4x e^x + e^{2x} (x - 1) \}. \tag{4.20}$$

La forme finale de q-énergie totale est donc

$$\bar{U}_q = U_0 + \frac{\gamma^2}{2} \sum_i \hbar \omega_i \frac{e^{x_i}}{(e^{x_i} - 1)^4} \{ 1 + x_i + 4x_i e^{x_i} + e^{2x_i} (x_i - 1) \}. \tag{4.21}$$

Donc à partir du l'approximation de Debye, l'énergie thermique pour un cristal est représentée par :

$$\bar{U}_q = U_0 + 3\gamma^2 \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega}{2} \frac{e^x}{(e^{x_i} - 1)^4} \{ 1 + x + 4x e^x + e^{2x} (x - 1) \} D(\omega) d\omega \tag{4.22}$$

dont

$$D(\omega) d\omega = \frac{V^2 \omega^2}{2\pi^2 c^3} d\omega = \frac{V^2 x^2}{2\pi^2 c^3 \beta^3 \hbar^3} dx. \tag{4.23}$$

Ainsi

$$\begin{aligned}
 \bar{U}_q &= U_0 + 3\gamma^2 \int_0^{x_D} \frac{V^2 x^3}{4\pi^2 c^3 \beta^4 \hbar^3} \frac{e^x}{(e^x - 1)^4} \{1 + x + 4xe^x + e^{2x}(x - 1)\} dx & (4.24) \\
 &= U_0 + 3\gamma^2 \frac{V^2 k_B^4 T^4}{4\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^{x_D} \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^4} \{1 + x + 4xe^x + e^{2x}(x - 1)\} dx \\
 &= U_0 + \frac{9}{2} \frac{N k_B \gamma^2}{\omega_D^3} \left(\frac{k_B T}{\hbar} \right)^3 T \int_0^{x_D} \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^4} \{1 + x + 4xe^x + e^{2x}(x - 1)\} dx.
 \end{aligned}$$

Enfin l'expression de l'énergie totale de Debye en q-déformée pour les très petites déformation en fonction de la température a la forme suivante :

$$\bar{U}_q = U_0 + \frac{9}{2} N k_B \gamma^2 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 T \int_0^{x_D} \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^4} \{1 + x + 4xe^x + e^{2x}(x - 1)\} dx. \quad (4.25)$$

4.4 Discussion des résultats

4.4.1 La chaleur spécifique

Selon la figure (4.1), on remarque que les résultats sont identiques avec l'expérimentale.

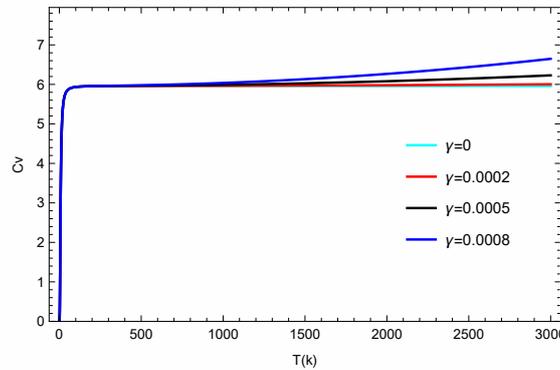


Fig. 4.1 : La chaleur spécifique de Debye (en cal/mol.K) en fonction de température pour différentes valeurs de γ

Le modèle de Debye pour la capacité calorifique du réseau est modifié en conservant toutes les hypothèses de base, sauf que chaque mode est ici traité comme un oscillateur harmonique déformé q . Les deux faits expérimentaux de base sur la capacité calorifique des solides que toute théorie doit expliquer sont (i) à température ambiante, la capacité calorifique de la plupart des solides est proche de $3k_B$ de sorte que pour les molécules composées de N atomes, la capacité calorifique molaire est proche de $3NR$ où R est la constante universelle des gaz (loi de Dulong et Petit). Des mesures précises indiquent une dépendance de la température de la capacité calorifique dans cette région. (ii) À basses

températures, les capacités calorifiques diminuent et disparaissent à $T = 0K$. La diminution suit une loi comme T^3 . Le modèle de Debye a réussi à décrire les observations expérimentales à basses températures dans de nombreux solides cristallins purs.

Dans les deux régions de températures, on peut récapituler les résultats suivants :

- **À haute température** : on a (voir figure. 4.2)

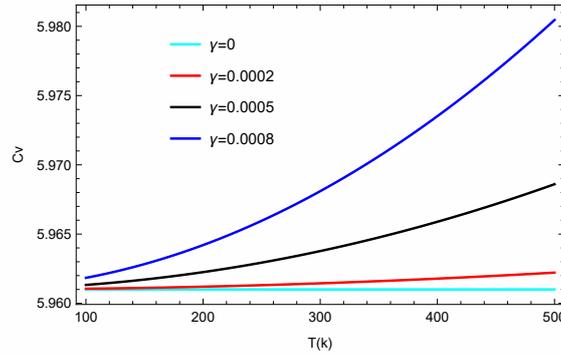


Fig. 4.2 : La capacité thermique de Debye q-déformée (en cal/mol.K) à haute température pour différents valeurs de γ

$$C_{Vq} = 3k_B \left[1 + 3\gamma^2 \left(6 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^2 + 2 \frac{T}{\Theta_D} \right) \right]. \quad (4.26)$$

- **À basse température** : on trouve (voir figure. 4.3)

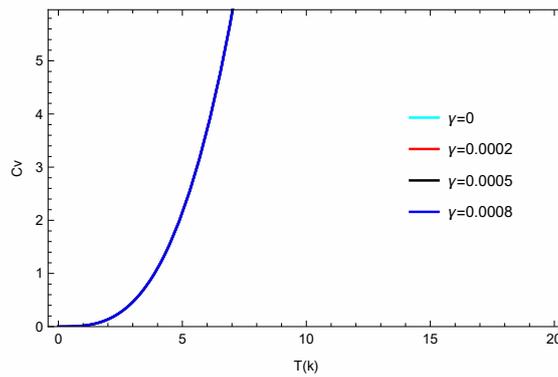


Fig. 4.3 : La capacité thermique de Debye q-déformée (en cal/mol.K) à basse température différents valeurs de γ

$$C_{Vq} = 233k_B \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3 + 532.95k_b\gamma^2 \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^3. \quad (4.27)$$

Cette expression présente une dépendance en T^2 contrairement au cas ordinaire. La capacité calorifique du réseau par g.atome est calculée selon l'expression ci-dessus pour les trois éléments Rubidium, Césium

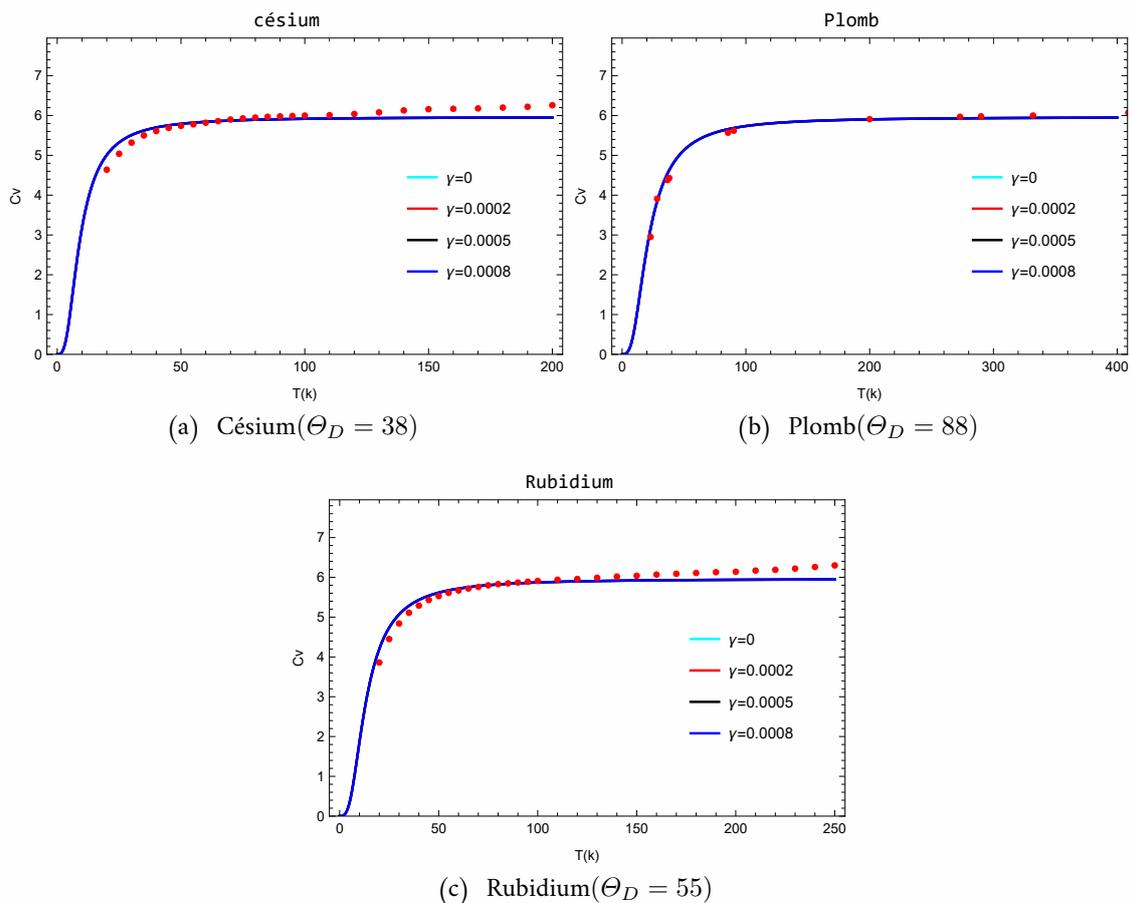


Fig. 4.4 : La comparaison entre Les valeurs expérimentales et les valeurs théoriques de la capacité thermique

et Plomb pour lesquels les températures de Debye sont relativement faibles. γ est assigné des valeurs $\sim 10^{-5}$. Les résultats sont tracés dans la figure. 4.4 pour la plage de température 100-300 K avec les valeurs expérimentales [4, 5]. On observe qu’il y a une très bonne concordance pour des valeurs de T pas trop élevées. À mesure que la température devient plus élevée, des écarts apparaissent, la capacité calorifique augmente beaucoup plus rapidement que ce qui est prédit par la théorie. Les investigations ci-dessus soutiennent l’idée que les phonons dans les cristaux peuvent être des excitations q-quantifiées. Les écarts observés à des températures plus élevées peuvent être expliqués en prenant en compte des interactions quartiques et d’ordre supérieur, éventuellement dans le cadre d’un modèle d’oscillateur q-anharmonique (voir aussi Tableau. 4.1) .

Tab. 4.1 : Les résultats théorique et expérimentales de la capacité thermique pour Césium, Rubidium et le Plomb

	rubidium $\Theta_D = 55$ [46]		césium $\Theta_D = 38$ [46]			plomb $\Theta_D = 88$ [37]	
T(K)	C_V exp [46]	C_V théo	C_V exp [46]	C_V théo	T(K)	C_V exp [39]	C_V théo
20	3.86	4.19	4.64	5.00978	23.0	2.95	3.15
25	4.45	4.73	5.04	5.32544	23.3	3.91	3.20
30	4.84	5.06	5.32	5.50894	36.8	4.38	4.55
35	5.11	5.28	5.50	5.62399	38.1	4.43	4.63
40	5.29	5.43	5.61	5.70052	85.5	5.57	5.65
45	5.43	5.53	5.69	5.75	90.2	5.62	5.68
50	5.53	5.61	5.74	5.79	200	5.91	5.90
55	5.61	5.67	5.78	5.82	273	5.97	5.93
60	5.67	5.71	5.82	5.84	290	5.98	5.934
65	5.72	5.75	5.86	5.86	332	6.00	5.941
70	5.76	5.78	5.90	5.87	409	6.07	5.948
75	5.80	5.80	5.93	5.88			
80	5.83	5.82	5.95	5.89			
85	5.85	5.83	5.97	5.90			
90	5.87	5.85	5.98	5.908			
95	5.89	5.86	5.99	5.914			
100	5.91	5.87	6.00	5.918			
110	5.94	5.88	6.01	5.92			
120	5.96	5.89	6.04	5.931			
130	5.99	5.90	6.08	5.936			
140	6.02	5.91	6.13	5.940			
150	6.04	5.921	6.16	5.942			
160	6.07	5.926	6.17	5.945			
170	6.09	5.93	6.18	5.947			
180	6.11	5.934	6.20	5.949			
190	6.13	5.934	6.22	5.950			
200	6.14	5.936	6.26	5.952			
210	6.17	5.939	6.30	5.953			
220	6.19	5.941	6.33	5.954			
230	6.22	5.943	6.35	5.955			
240	6.26	5.945	6.38	5.956			
250	6.30	5.946	6.46	5.957			
260	6.35	5.948	6.55	5.9585			
270	6.40	5.9503	6.61	5.9587			
273.15	6.42	5.9506	6.64	5.9592			
280	6.47	5.9513	6.71	5.9598			
290	6.56	5.9522	6.84	5.9603			
298.15	6.67	5.9528	6.97	5.9605			
300	6.69	5.953	7.00	5.9610			
310	6.85	5.9538	7.02	5.9612			
312.64	6.89	5.954					

4.4.2 La conductivité thermique

En appliquant les relations de la conductivité thermiques qui traité au chapitre 3 à cette étude, nous pouvons tracer la courbe suivante :

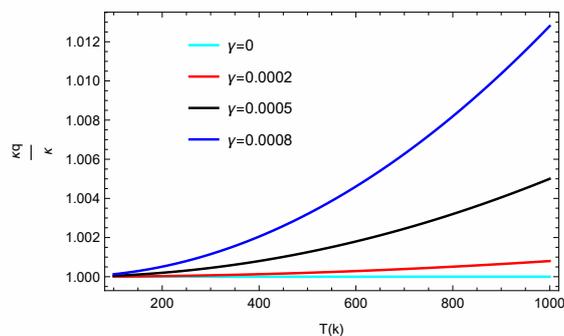


Fig. 4.5 : Le rapport entre la conductivité thermique déformée et non déformée en fonction de la température pour différents valeurs de γ

La figure (4.5) montre que le q-déformé joue un rôle important dans l'influence sur les propriétés thermiques des matériaux, car l'on constate que le comportement de ces grandeurs est différent de l'état déformé à l'état normal ($\gamma = 0$) à des températures très élevées, où on observe une augmentation des valeurs de la conductivité thermique avec une augmentation des valeurs de γ , ce qui indique que la déformation modifie la structure cristalline ce qui permet de donner des nouvelles informations sur cette élément, et ce dans le cas où ces matériaux résistent à ces températures.

CONCLUSION ET PERSPECTIVE

La théorie des solides a été l'objet de nombreuses recherches ces dernières années. La connaissance des paramètres thermo-physiques de la matière est essentielle dans les processus industriels et la recherche académique, car de nombreux contemporains nécessitent des matériaux toujours plus innovants. Dans notre mémoire, nous avons rappelé les deux modèles d'Einstein et de Debye pour étudier les propriétés thermodynamiques telles que l'énergie libre, l'énergie interne et la capacité thermique d'un solide cristallin. Nous avons ensuite élargi cette étude pour y inclure notre intérêt sur les systèmes physique avec q -déformée. À travers cette étude, nous avons clarifié la différence entre l'état normal non déformé et l'état déformé. Nous avons vu que le facteur q -déformé n'est pas seulement un outil mathématique, mais aussi un concept qui est lié à l'étude de la mécanique quantique des solides. Les effets de la déformation via q peuvent être utilisés pour décrire la dynamique de l'interaction du réseau cristallin dans les solides. Cela est important pour comprendre les propriétés de transport thermique des matériaux. Nous avons également observé que la q -déformation agit directement sur la température de Debye, ce qui signifie que la fréquence de Debye est modifiée. Nos principaux résultats indiquent la possibilité d'ajuster la déformation q pour obtenir des effets physiques souhaitables, tels que le changement de la conductivité thermique d'un certain élément, qui pourrait devenir équivalent à un matériau plus facile à manipuler en insérant une impureté dans un échantillon de l'élément d'origine. Cependant, nous avons besoin d'études et de preuves supplémentaires pour étayer une telle hypothèse complexe. Par exemple, nous cherchons à établir un lien entre cette théorie et les expériences par la croissance de films minces, une question qui sera abordée ailleurs.

Voici une reformulation du texte :

Bien que l'intérêt pour les groupes quantiques et la q -déformation ait commencé dès 1989, ils restent des domaines de recherche très actifs en mathématiques et en physique. Étant donné que deux grandes théories du siècle dernier, à savoir la relativité et la mécanique quantique, impliquaient une sorte de déformation, nous nous attendons à ce que cette nouvelle structure mathématique conduise

également à une nouvelle physique. Les oscillateurs q-déformés trouvent des applications phénoménologiques dans des domaines tels que la physique moléculaire, la physique de la matière condensée et la physique nucléaire [5, 9]. Enfin, l'étude de la mécanique quantique q-déformée améliorera notre connaissance de la mécanique quantique standard.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] M. L. Brilloun, Ph.D. thesis, La faculté des sciences de paris., **1921**.
- [2] C. C. Tannoudji, B. Diu, *Mécanique quantique*, C. C. edp Sciences (Ed.), **2018**.
- [3] W. Greiner, *Quantum mechanics : an introduction*, Springer; 4th edición., **2001**.
- [4] K. K. Leelamma, Ph.D. thesis, Department of physics, Cochin University of science and Technology, Kochi-22, Kerala, India., **1997**.
- [5] K. K. Leelamma, *Modern Perspectivesin Theoretical Physics*, K. S. Sreelatha, V. Jacob (Eds.), Springer NatureSingapore Pte Ltd., **2021**.
- [6] V. C. Kuriakose, K. K. Leelamm, K. B. Joseph, *Pramana. J. Phys.* **1992**, 39, 521.
- [7] G. Vinod, K. B. Joseph, V. C. Kuriakose, *Pramana. J. Phys.* **1994**, 42, 299.
- [8] G. Vinod, Ph.D. thesis, Department of physics, Cochin University of science and Technology, Kochi-22, Kerala, India., **1997**.
- [9] G. Vinod, *Modern Perspectivesin Theoretical Physics*, K. S. Sreelatha, V. Jacob (Eds.), Springer NatureSingapore Pte Ltd., **2021**.
- [10] L. C. Biedenharn, *J.Phys.A.Math.Gen.* **1989**, 22, 873.
- [11] C. D. D. Bonatsos, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **1999**, 43, 537–618.
- [12] D. Bonatsost, L. Britot, D. Menezes, *J. Phys. A : Math. Gen.* **1993**, 26, 895.
- [13] L. C. Biedenharn, M. A. Lohe, *Quantum group symmetry and q-tensor algebras*, World Scientific Pub Co Inc., **1995**.

- [14] A. A. Marinho, *Phys. A.* **2012**, 391, 3424–3434.
- [15] M. S. Abdalla, H. Eleuch, *J. Appl. Phys.* **2014**, 115, 234906.
- [16] A. J. Macfarlane, *Phys. A.* **1989**, 22, 4581–4588.
- [17] P. P. Kulish, E. V. Damaskinsky, *J. Phys. A : Math. Gen.* **1990**, 23, 415.
- [18] R. W. Grayt, C. A. Nelson, *phys. A.* **1990**, 945–950.
- [19] Y. J. Ng, *Phys. A.* **1990**, 23, 1023–1027.
- [20] A. Lorek, A. Ruffing, J. Wess, *Z. Phys. C.* **1997**, 74, 369–377.
- [21] I. L. Cooper, R. K. Gupta, *Phys. Rev. A.* **1995**, 52, 941.
- [22] A. Lavagno, A. M. Scarfone, P. N. Swamy, *Eur. Phys. J. C.* **2006**, 47, 253.
- [23] J. C. Rnugelj, M. Martinis, V. Mikuta-Martinis, *Phys. Lett. A.* **1994**, 188, 347.
- [24] A. M. Gavrilik, I. I. Kachurik, A. V. Lukash, *Ukr. J. Phys.* **2013**, 58, 1025.
- [25] S. Cai, G. Su, J. Chen, *J. Phys. A : Math. Theor.* **2007**, 40, 11245.
- [26] W. S. Chung, *Int. J. Mod. Phys. B.* **2015**, 29, 1550177.
- [27] M. Angelova, A. Frank, *Phys. At. Nucl.* **2005**, 68, 1625.
- [28] A. Algin, M. Senay, *Phys. A.* **2016**, 447, 232.
- [29] A. Boumali, H. Hassanabadi, *Adv. High Energy Phys.* **2017**, 2017, 1–12.
- [30] F. Serdouk, A. Boumali, A. Makhlof, M. L. benkhedir, *Rev. Mex. Fis.* **2020**, 66, 643–655.
- [31] B. Abdelmalek, Master's thesis, Université de Elchahid Larbi Tébessi -Tébessa-, **2016**.
- [32] A. Boumali, *Mécanique quantique (en arabe)*, open source (researchgate; academia) (Ed.), Boumali., **2019**.
- [33] M. Brousseau, *Physique du solide, propriété électronique*, Dunod (Ed.), Masson., **1992**.
- [34] Pathria, R. Kumar, *Statistical mechanics*, Elsevier., **2016**.
- [35] A. Bouzenada, A. Boumali, *Ann. Physics.* **2023**, 452, 169302.
- [36] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, John Wiley Sons, IDE., **2004**.

- [37] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Physique du solide*, EDP SCIENCES., **2002**.
- [38] A. Einstein, *Ann. d. Phys.* **1906**, 327, 180–190.
- [39] P. Debye, *Ann. Phys.* **1912**, 344, 789–839.
- [40] J. M. Ziman, *Electrons and phonons, the theory of transport phenomena in solids*, Oxford University Press., **1960**.
- [41] M. Andriana, *Parafermionic behavior in bose-eistein condensates*, Athens, March., **2012**.
- [42] H. Ui, N. Aizawa, *phys. A.* **1990**, 5, 237–242.
- [43] V. V. Eremin, A. A. Meldianov, *Math-ph.* **2008**, 147, 709–715.
- [44] A. A. Marinho, *Phys : Conf. Ser.* **2014**.
- [45] G. Andrews, R. Askey, R. Roy, *Special Functions*, Cambridge University Press, Cambridge., **1999**.
- [46] J. D. Filby, D. L. Martin, *Proc. R. Soc.* **1964**, 284, 83–107.
- [47] J. Ramaswamy, S. Sudeshna, *Pramana.* **2005**, 64, 411–421.
- [48] C. Tsallis, *Introduction to nonextensive statistical mechanics approaching a complex world*, Springer., **2009**.
- [49] Y. Chargui, A. Dhahbi, *Ann. Physics.* **2021**, 168430.
- [50] C. Kassel, *Quantum group*, Springer, Coll., **1995**.
- [51] V. Chari, A. Pressley, *A Guide to Quantum Groups*, Cambridge (Ed.), Cambridge University Press., **1994**.

ANNEXE **A**

LE FORMALISME Q-DÉFORMÉ

A.1 q-Produit (q-product)

La définition du produit q entre deux nombres est

$$x \otimes_q y = (x^{1-q} + y^{1-q} - 1)_+^{\frac{1}{1-q}}, \quad (x >, y > 0), \quad (\text{A.1})$$

ou, de manière équivalente,

$$x \otimes_q y \equiv e_q^{\ln_q x + \ln_q y}. \quad (\text{A.2})$$

Maintenant, énumérons certaines de ses principales propriétés :

- nous récupérons la somme standard en tant qu'instance particulière ($q = 1$), c'est-à-dire

$$x \otimes_1 y = xy. \quad (\text{A.3})$$

- commutatif :

$$x \otimes_q y = y \otimes_q x. \quad (\text{A.4})$$

- additif sous le logarithme q (désormais appelé extensif), c'est-à-dire

$$\ln_q (x \otimes_q y) = \ln_q x + \ln_q y. \quad (\text{A.5})$$

- associatif :

$$x \otimes_q (y \otimes_q z) = (x \otimes_q y) \otimes_q z = x \otimes_q y \otimes_q z = (x^{1-q} + y^{1-q} + z^{1-q} - 2)^{\frac{1}{1-q}}. \quad (\text{A.6})$$

- le nombre un est l'élément neutre du produit $x \otimes_q 1 = x$.
- Il a une propriété de dualité/inverse $(2 - q)$, c'est-à-dire

$$\frac{1}{(x \otimes_q y)} = \left(\frac{1}{x}\right) \otimes_{2-q} \left(\frac{1}{y}\right). \quad (\text{A.7})$$

- Il admet zéro dans certaines conditions, plus précisément,

$$x \otimes_q 0 = \begin{cases} 0 & \text{si } (q \geq 1 \text{ et } x \geq 0) \text{ ou si } (q < 1 \text{ et } 0 \leq x \leq 1), \\ (x^{1-q} - 1)^{\frac{1}{1-q}} & \text{si } q < 1 \text{ et } x > 1 \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

- Il satisfait

$$x \otimes_{\frac{1}{q}} y = \left(x^{\frac{1}{q}} \otimes_{2-q} y^{\frac{1}{q}}\right)^q. \quad (\text{A.9})$$

- En multipliant q fois n facteurs égaux, nous pouvons définir la n -ième puissance q comme suit :

$$x^{\otimes_q n} = x \otimes_q x \otimes_q \dots \otimes_q x = [nx^{1-q} - (1 - q)]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (\text{A.10})$$

A.2 **q-Somme (q-sum)**

De manière analogue au produit de q , nous pouvons définir la somme de q comme

$$x \oplus_q y = x + y + (1 - q)xy. \quad (\text{A.11})$$

Cette somme de q possède les propriétés principales suivantes :

- nous récupérons la somme standard en tant qu'instance particulière ($q = 1$), c'est-à-dire que

$$x \oplus_1 y = x + y. \quad (\text{A.12})$$

- Elle est multiplicatif sous q -exponentielle, c'est-à-dire que

$$e^{x \oplus_q y} = e_q^x e_q^y. \quad (\text{A.13})$$

- commutatif

$$x \oplus_q y = y \oplus_q x. \quad (\text{A.14})$$

- associatif

$$\begin{aligned} x \oplus_q (y \oplus_q z) &= (x \oplus_q y) \oplus_q z = x \oplus_q y \oplus_q z \\ &= x + y + z + (1 - q)(xy + yz + xz) + (1 - q)^2 xyz. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

- Elle satisfait la généralisation suivante de la propriété distributive de la somme et du produit standard $a(x + y) = ax + ay$, c'est-à-dire de

$$a(x \oplus_q y) = (ax) \oplus_{\frac{q+a-1}{a}} (ay). \quad (\text{A.16})$$

- L'élément neutre de la somme q est zéro,

$$x \oplus_q 0 = x. \quad (\text{A.17})$$

Nous pouvons définir l'opposé (ou l'inverse additif) de x (en l'appelant $\ominus_q x$) comme l'élément qui, lorsqu'il est sommé avec x , donne l'élément neutre :

$$x \oplus_q (\ominus_q x) = 0. \quad (\text{A.18})$$

Ainsi, nous avons

$$\ominus_q x = \frac{-x}{1 + (1 - q)x}, \quad x \neq -\frac{1}{1 - q}. \quad (\text{A.19})$$

Donc, à partir de la dernière relation, nous pouvons obtenir que

$$x \ominus_q y = x \oplus_q (\ominus_q y) = \frac{x - y}{1 + (1 - q)y}, \quad y \neq -\frac{1}{1 - q}. \quad (\text{A.20})$$

La différence q obéit à :

- $x \ominus_q y = \ominus_q y \oplus_q x$,
- $x \ominus_q (y \ominus_q z) = (x \ominus_q y) \ominus_q z$,
- mais $a(x \ominus_q y) \neq ax \ominus_q ay$.

Des propriétés croisées intéressantes émergent des généralisations q du produit et de la somme, par exemple

$$\ln_q(xy) = \ln_q x \oplus \ln_q y, \quad \ln_q(x \otimes_q y) = \ln_q x + \ln_q y. \quad (\text{A.21})$$

et, de manière cohérente

$$e_q^{x+y} = e_q^x \otimes e_q^y, \quad e_q^{x \oplus_q y} = e_q^x e_q^y. \quad (\text{A.22})$$

Le q -sum et le q -product sont des structures mathématiquement intéressantes qui jouent des rôles très différents dans la structure profonde de la théorie non extensive. Le q -product reflète une propriété essentielle, à savoir l'extensivité de l'entropie en présence de corrélations globales spéciales. Le q -sum ne reflète que la manière dont les entropies se composeraient si les sous-systèmes étaient indépendants, même si nous savons que dans un tel cas, nous n'avons réellement besoin que de $q = 1$. La physique statistique non extensive propose un nouvel exponentiel et logarithme lié à la physique statistique non extensive en utilisant le q -sum et le q -product qui satisfont la distributivité. L'entropie q définie par l'idée de la q -probabilité est montrée comme étant q -additive.

A.3 q -dérivée et q -intégrale

On a deux définitions pour la q -dérivée [11, 30, 48]

- **h-dérivée (classique)** : La dérivée h est donnée par :

$$D_h f(x) = \frac{d_h f}{d_h x} = \lim_{x \rightarrow h} \left(\frac{f(x+h) - f(x)}{h} \right). \quad (\text{A.23})$$

- **q-dérivée (quantique)** : La q -dérivée est définie par :

$$D_q f(x) = \frac{d_q f}{d_q x} = \frac{f(qx) - f(q^{-1}x)}{(q - q^{-1})x}. \quad (\text{A.24})$$

La dérivée q , dans le cadre du formalisme q -calculus de Jackson, est définie comme [11] :

$$\begin{aligned} D_q f(x) &= \frac{\partial_q f}{\partial_q x} \equiv \lim_{x \rightarrow y} \left(\frac{f(x) - f(y)}{x \ominus_q y} \right) \\ &= \{1 + (1 - q)x\} \frac{\partial f}{\partial x}. \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Le développement de ce cadre de déformations q a inspiré la définition d'expressions déformées pour les fonctions logarithme et exponentielle, à savoir le logarithme q et l'exponentielle q (exponentielle Tsallis [19]), d'abord proposées comme

$$\ln_q x = \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q}, \quad x > 0, \quad e_q(x) = \{1 + (1 - q)x\}_+^{\frac{1}{1-q}}, \quad (x, q) \in \mathbb{R}. \quad (\text{A.26})$$

dont $[A]_+ \equiv \max\{A; 0\}$ ($1 + (1 - q)x > 0$). Les deux équations peuvent être réécrites comme

$$\ln_q x = \begin{cases} \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q} & q \neq 1, \quad x > 0 \\ \ln x & q = 1, \end{cases} \quad e_q(x) = \begin{cases} \{1 + (1 - q)x\}_+^{\frac{1}{1-q}} & q \neq 1, \quad (x, q) \in \mathbb{R}, \\ e(x) & q = 1, \end{cases} \quad (\text{A.27})$$

où les deux équations sont restreintes à la condition suivante $1 + (1 - q)x \neq 0$. De plus, nous avons les relations bien connues suivantes :

$$\ln_q(xy) = \ln_q x + \ln_q y + (1 - q) \ln_q x \ln_q y, \quad (\text{A.28})$$

$$e_q(x) e_q(y) = e_q(x + y + (1 - q)xy) \equiv e_q(x \oplus y), \quad (\text{A.29})$$

avec

$$x \oplus y = x + y + (1 - q)xy. \quad (\text{A.30})$$

La q -dérivée obéit

- Règle de Leibniz

$$D_q \{f(x)g(x)\} = D_q \{f(x)\}g(x) + f(x)D_q \{g(x)\}, \quad (\text{A.31})$$

- la règle de la chaîne

$$D_q \{f(g(x))\} = \frac{df}{dg} D_q \{g\}. \quad (\text{A.32})$$

L'intégrale q correspondante est donnée par l'équation suivante

$$\int_q f(x) d_q x = \int \frac{f(x)}{1 + (1 - q)x} dx, \quad (\text{A.33})$$

avec

$$d_q x = \lim_{x \rightarrow y} x \ominus_q y = \frac{1}{1 + (1 - q)x} dx. \quad (\text{A.34})$$

A.3.1 Propriétés de la q -dérivée

La similitude entre la définition actuelle et celle des q -numbers $D_q f(x)$ est claire. En utilisant la définition de la q -dérivée on peut facilement voir que [11, 18]

$$D_x^q (ax^n) = a [n] x^{n-1}, \quad (\text{A.35})$$

$$D_x^q (e_q^{ax}) = ae_q^{ax}. \quad (\text{A.36})$$

De la définition de la q -dérivée, on peut dériver la règle de somme

$$D_x^q (f(x) + g(x)) = D_x^q f(x) + D_x^q g(x), \quad (\text{A.37})$$

ainsi que la règle

$$D_{x_2}^q [ax_1 \pm bx_2]_q^m = \pm [m]_q b [ax_1 \pm bx_2]_q^{m-1}, \quad (\text{A.38})$$

où a et b sont des constants et $[ax_1 \pm bx_2]_q^m$ est donné par l'expansion q -binomiale,

Donc

$$D_x^q (f(x) g(x)) = \frac{f(qx) g(qx) - f(q^{-1}x) g(q^{-1}x)}{(q - q^{-1})x}. \quad (\text{A.39})$$

On peut en déduire les deux formes suivantes de la règle de Leibnitz

$$D_x^q (f(x) g(x)) = (D_x^q f(x)) g(q^{-1}x) + f(qx) (D_x^q g(x)). \quad (\text{A.40})$$

$$D_x^q (g(x) f(x)) = (D_x^q g(x)) f(q^{-1}x) + g(qx) (D_x^q f(x)). \quad (\text{A.41})$$

En outre, on peut montrer la propriété

$$D_x^q f(qx) = q D_x^q f(x) |_{x=qx}, \quad (\text{A.42})$$

et les règles

$$D_{ax}^q f(x) = \frac{1}{a} D_x^q f(x), \quad (\text{A.43})$$

$$D_x^q f(x^n) = [n]_q x^{n-1} D_x^{q^n} f(x^n), \quad (\text{A.44})$$

où a est une constante. Un autre résultat utile est

$$D_x^{q^n} f(x) = \frac{1}{[n]_q} \sum_{k=0}^{n-1} D_x^q f(q^{2k-(n-1)}x). \quad (\text{A.45})$$

A.4 q -intégration

L'intégration q dans l'intervalle $[0, a]$ est définie par [11, 18]

$$\int_0^a f(x) d_q x = a (q^{-1} - q) \sum_{n=0}^{\infty} q^{2n+1} f(q^{2n+1}a), \quad (\text{A.46})$$

tandis que pour l'intervalle $[0, \infty]$ on a

$$\int_0^{\infty} f(x) d_q x = (q^{-1} - q) \sum_{n=-\infty}^{\infty} q^{2n+1} f(q^{2n+1}a). \quad (\text{A.47})$$

L'intégrale q indéfinie est définie comme

$$\int f(x) d_q x = (q^{-1} - q) \sum_{n=0}^{\infty} q^{2n+1} x f(q^{2n+1}x) + Constant, \quad (\text{A.48})$$

où $0 < q < 1$.

Pour des fonctions entières $f(x)$ on peut facilement voir que cette q -intégrale approche l'intégrale de Riemann comme $q \rightarrow 1$, et aussi que les opérateurs de q -différenciation et q -intégration sont inverses les uns aux autres

$$D_x^q \int f(x) d_q x = f(x) = \int D_x^q f(x) d_q x, \quad (\text{A.49})$$

Donc

$$\int ax^{n-1} d_q x = \frac{1}{[n]_q} ax^n + Constant, \quad (\text{A.50})$$

$$\int e_q^{ax} d_q x = \frac{1}{a} e_q^{ax} + Constant. \quad (\text{A.51})$$

A.5 Opération sur q -déformé algèbre

Quelques exemples de q -numbers sont donnés ici (q -Jackson déformé) :

$$[0]_q = 0, \quad (\text{A.52})$$

$$[1]_q = 1, \quad (\text{A.53})$$

$$[2]_q = q + q^{-1}, \quad (\text{A.54})$$

$$[3]_q = q^2 + 1 + q^{-2}. \quad (\text{A.55})$$

Les identités entre les q -numbers existent. Elles sont cependant différentes des identités familières entre nombres habituels. Comme un exercice on peut montrer (en utilisant la définition de q -numbers) que

$$[a]_q [b+1]_q - [b]_q [a+1]_q = [a-b]_q. \quad (\text{A.56})$$

Le q -factoriel d'un entier n est défini comme

$$[n]_q! = [n]_q [n-1]_q [n-2]_q \dots [2]_q [1]_q. \quad (\text{A.57})$$

Les coefficients q -binomiaux sont définis comme suit :

$$\left[\begin{matrix} m \\ n \end{matrix} \right]_q = \frac{[m]_q}{[n]_q [m-n]_q}, \quad (\text{A.58})$$

tandis que l'expansion q -binomiale est donnée par

$$[a \pm b]_q^m = \sum_{k=0}^m \left[\begin{matrix} m \\ k \end{matrix} \right]_q a^{m-k} (\pm b)^k. \quad (\text{A.59})$$

Dans la limite ($q \rightarrow 1$) nous avons évidemment

$$\left[\begin{matrix} m \\ n \end{matrix} \right]_q = \binom{m}{n}, \quad (\text{A.60})$$

et

$$[n]_q! = (n)!, \quad (\text{A.61})$$

où $(n)!$ et $\binom{m}{n}$ sont respectivement les coefficients factoriels et binomiaux standard. Il convient de noter que des nombres déformés à deux paramètres ont également été introduits

$$[x]_{p,q} = \frac{q^x - p^{-x}}{q - p^{-1}}. \quad (\text{A.62})$$

Dans le cas particulier $p = q$ ils se réduisent aux q -numbers habituels.

A.6 Les fonctions élémentaires q -déformées

En plus des nombres et opérateurs q -déformés, des fonctions élémentaires q -déformées peuvent être introduites. La fonction q -exponentielle est définie comme [11, 18]

$$e_q^{ax} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{[n]_q!} x^n, \quad (\text{A.63})$$

tandis que les fonctions q -trigonométriques sont définies comme [11]

$$\sin_q x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{[2n+1]_q!} x^{2n+1}, \quad (\text{A.64})$$

et

$$\cos_q x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{[2n]_q!} x^{2n}. \quad (\text{A.65})$$

ANNEXE **B**

QUELQUE DÉFINITIONS UTILES

B.1 Algèbre de Lie

Une algèbre de Lie est une structure algébrique qui permet de décrire les propriétés des groupes de Lie. Elle est munie d'une application bilinéaire appelée crochet de Lie qui vérifie certaines propriétés.

Soit K un corps commutatif de caractéristique différente de 2. Une algèbre de Lie $\{\mathfrak{g}\}$ sur K est un espace vectoriel muni d'une application bilinéaire $(x, y) \mapsto [x, y]$ de $\mathfrak{g} \times \mathfrak{g}$ dans \mathfrak{g} qui vérifie les propriétés suivantes :

- $\forall x \in \mathfrak{g}, [x, x] = 0$;
- $\forall x, y, z \in \mathfrak{g}, [x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0$.

Tout espace vectoriel V peut être muni d'une structure d'algèbre de Lie, en posant $\forall x, y \in V, [x, y] = 0$. Une telle algèbre de Lie, où le crochet de Lie est identiquement nul, est appelée abélienne.

B.2 Groupes quantique

En mathématiques et en physique théorique, les groupes quantiques sont des algèbres non-commutatives qui sont apparues d'abord dans la théorie des systèmes quantiques intégrables et qui ont été formalisées par Vladimir and Pressley . Il a été utilisé pour la première fois par Vladimir en référence à des algèbres de Hopf déformées suivant un paramètre h ou q , et qui deviennent des algèbres enveloppantes d'algèbres de Lie lorsque $q = 1$ ou $h = 0$ [51].

B.3 Algèbre de Hopf

Une algèbre de Hopf est une bialgèbre (associative et coassociative) H sur un corps K munie d'une application K -linéaire (appelée l'antipode) telle que le diagramme suivant soit commutatif : Dans ce diagramme, Δ est la comultiplication de la bialgèbre, ∇ sa multiplication, η son unité et ε sa counité.

Les algèbres de Hopf ont été introduites à l'origine pour étudier la cohomologie des groupes de Lie. Les algèbres de Hopf interviennent également en topologie algébrique, en théorie des groupes et dans bien d'autres domaines. Enfin, ce qu'on appelle les groupes quantiques sont souvent des algèbres de Hopf « déformées » et qui ne sont en général ni commutatives, ni cocommutatives. Ces objets sont ainsi au cœur de la géométrie non commutative [50].

Une algèbre de Hopf $(H, m, \Delta, \varepsilon, S)$ sur un corps K est une algèbre associative avec une multiplication m .

- une comultiplication coassociative $\Delta : H \rightarrow H \otimes H$ qui est un homomorphisme d'algèbres
- une counité $\varepsilon : H \rightarrow K$ telle que $\sum h(1)_i \varepsilon(h(2)_i) = \sum \varepsilon(h(1)_i) h(2)_i$, avec $\Delta(h) = \sum h(1)_i \otimes h(2)_i$.
- un antipode $S : H \rightarrow H$ qui est un antihomomorphisme tel que $\sum h(1)_i \cdot S(h(2)_i) = \sum S(h(1)_i) \cdot h(2)_i = \varepsilon(h) \cdot 1$.

B.4 Algèbre enveloppante

L'algèbre enveloppante est une algèbre associative unitaire qui permet de rendre compte de la plupart des propriétés d'une algèbre de Lie. Elle est contenue dans une algèbre associative appelée algèbre enveloppante. L'algèbre enveloppante est beaucoup plus grande que l'algèbre de départ. Comme exemple concret de la situation, on peut construire l'algèbre enveloppante U d'une algèbre de Lie $\{\mathfrak{g}\}$. Il s'agit d'une algèbre associative unitaire qui permet de rendre compte de la plupart des propriétés de $\{\mathfrak{g}\}$.