

ÉLECTRONS, PHONONS ET DIFFUSION DE LA CHALEUR

La loi de Fourier est une relation empirique et quantitative qui stipule qu'en tout point d'un solide, le flux de chaleur est proportionnel au gradient de température. Mais par quels mécanismes la chaleur se transmet-elle d'un endroit à un autre? Dans la plupart des solides cristallins, où les atomes et les molécules ne font que s'agiter autour de leurs positions d'équilibre, sans pouvoir se déplacer, deux véhicules de chaleur sont en jeu à l'échelle microscopique: les électrons libres du matériau et ses phonons.

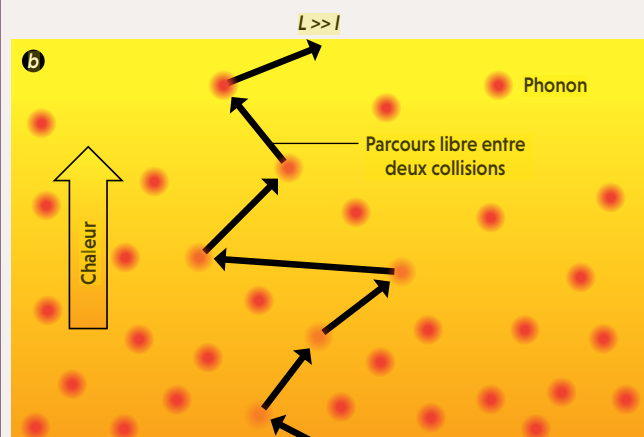
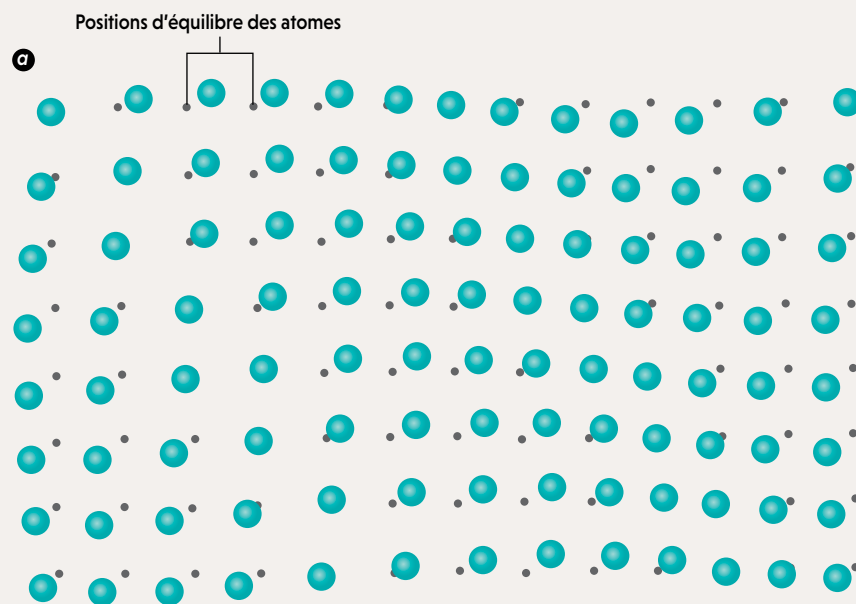
Commençons par les électrons. Ils véhiculent bien sûr le courant électrique dans les matériaux conducteurs, mais, par leurs mouvements et les collisions qui s'ensuivent, ils transmettent aussi de l'énergie sous forme de chaleur. Les électrons libres sont même les principaux porteurs de chaleur dans les métaux à température ambiante. Toutefois, leur contribution ne suffit

pas à rendre compte pleinement de la conduction thermique, en particulier aux basses températures.

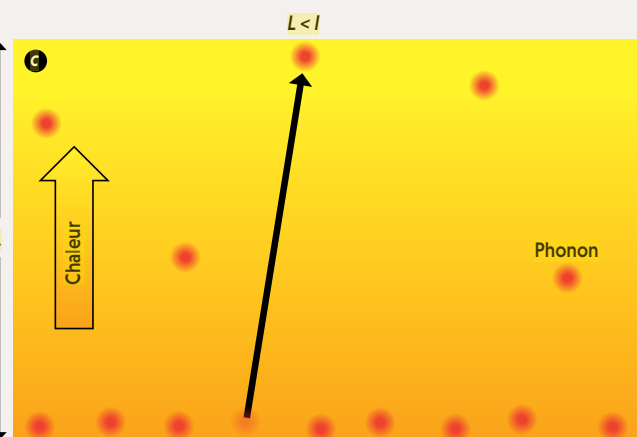
D'autres porteurs de chaleur interviennent: les phonons. Au sein d'un isolant électrique (un matériau «diélectrique»), qui est dépourvu d'électrons libres, les phonons sont même les seuls porteurs de chaleur. De quoi s'agit-il? La matière solide est constituée d'atomes qui, à température absolue non nulle, sont en continuelle vibration autour de leurs positions d'équilibre. C'est ce qui constitue l'agitation thermique. Ces vibrations se couplent d'un atome à l'autre du réseau et donnent ainsi lieu à des ondes de vibration qui se propagent au sein du réseau cristallin (voir la figure a). Or les lois de la physique

quantique montrent que l'énergie et la quantité de mouvement portées par les vibrations du réseau cristallin ne peuvent pas prendre n'importe quelles valeurs: ces grandeurs sont «quantifiées». Au sein du réseau cristallin, les échanges d'énergie et de quantité de mouvement dus aux vibrations se font donc comme si ces grandeurs étaient véhiculées par des particules d'énergie et de quantité de mouvement bien déterminées. On leur associe par conséquent des «quasiparticules» nommées phonons (ce nom provient du grec *φωνη* qui signifie «voix», car les phonons sont aussi responsables de la propagation du son dans les solides).

Comme toute particule, les phonons ont une quantité de mouvement p , une



Dans un réseau cristallin, des ondes de vibration des atomes (ou des molécules) autour de leurs positions d'équilibre se propagent. Le schéma a représente un instantané d'une telle onde. L'énergie de ces ondes est quantifiée: elle est véhiculée par des «phonons», entités qui se comportent de façon analogue à une particule. Lorsque le libre parcours moyen (distance



moyenne entre deux collisions successives) des phonons, l , est très inférieur à la distance L sur laquelle ils se propagent, la conduction de la chaleur est de nature diffusive et suit la loi de Fourier (b). En revanche, quand le libre parcours moyen l est supérieur à L , le régime de conduction est dit balistique et n'obéit plus à la loi de Fourier (c).

longueur d'onde $\lambda = h/p$ (où h est la constante de Planck) et une énergie qui dépend de cette longueur d'onde. Comme les électrons, les phonons présents au voisinage du point chaud ont des énergies relativement élevées et se propagent le long du solide en rencontrant des obstacles (surfaces, dislocations et macles du réseau cristallin,

Le libre parcours moyen et la longueur d'onde des phonons sont deux paramètres essentiels

impuretés, électrons ou d'autres phonons). Au cours de ces chocs, les phonons changent à chaque fois de direction et cèdent une part de leur énergie. C'est par ce processus que la chaleur diffuse du point chaud vers le point froid.

La distance moyenne entre deux chocs successifs d'un phonon est appelée libre parcours moyen. Cette distance et la longueur d'onde des phonons sont les deux longueurs les plus importantes pour caractériser le transport de chaleur. La compétition entre ces deux grandeurs caractéristiques (qui vont, *grosso modo*, du nanomètre au micromètre) et les dimensions des solides considérés est à l'origine d'effets thermiques très particuliers et de la non-validité de la loi de Fourier aux courtes distances.

Ainsi, la loi de Fourier n'est valable que lorsque le solide a des dimensions bien supérieures à ces deux longueurs. Cela revient à dire que le transport thermique, caractérisé par la conductivité thermique, doit être observé à suffisamment grande échelle pour que cette conductivité ne dépende pas de la taille du système considéré. En revanche, pour des objets de faibles dimensions, en particulier quand l'une d'elles est plus petite que le libre parcours moyen des phonons, alors la taille de l'objet est déterminante pour le transport thermique.

> éléments de base de nombreux processeurs et circuits microélectroniques), etc.

En 2014, David Cahill, de l'université de l'Illinois à Urbana, aux États-Unis, et des collègues ont publié une synthèse donnant quelques chiffres concrets relatifs à ces enjeux. Par exemple, augmenter l'efficacité thermique des nouvelles mémoires à changement de phase (mémoires PCM) pour le stockage des données pourrait conduire à une commutation plus rapide, des tailles plus petites et un fonctionnement plus efficace; l'énergie requise pour changer la valeur d'un bit serait alors inférieure à 1 femtojoule (10^{-15} joule), soit de l'ordre de 1000 à 10000 fois moins que les énergies de commutation d'un bit dans les mémoires actuelles. Autre exemple: réduire de 50% la conductivité thermique des revêtements actuels de turbine conduirait à un gain d'efficacité qui équivaut à 20 ans de développement de superalliages de turbine résistant à de hautes températures.

Malheureusement, l'équation de la chaleur de Fourier cesse d'être utile pour relever les défis thermiques posés par ces nouvelles technologies. Quand les dispositifs sont réduits à des dimensions inférieures au micromètre, les matériaux dont ils sont faits ne se comportent plus comme des conducteurs thermiques macroscopiques (*voir la figure page 64*). Par exemple, en 2003, l'équipe d'Arun Majumdar, de l'université de Californie à Berkeley, a mesuré pour la première fois la conductivité thermique d'un nanofil en silicium cristallin, dont le diamètre était de 100 nanomètres (soit 0,1 micromètre). Ces physiciens ont trouvé une conductivité thermique inférieure de moitié à celle d'un cristal de silicium macroscopique! Et la réduction devient plus importante encore pour des nanofils de diamètre inférieur.

QUAND LES PHONONS ENTRENT EN JEU

À quoi de tels effets sont-ils dus? Aux petites échelles, les phénomènes liés à la physique quantique se manifestent davantage. En particulier, l'énergie thermique ne se transmet pas en n'importe quelles quantités, mais par petits paquets, ou «quanta», d'énergie. Pour l'énergie vibratoire, qui est l'une des principales contributions à la chaleur, ces paquets sont nommés phonons (*voir l'encadré ci-contre*).

En 1929, le physicien allemand puis britannique Rudolf Peierls a pu obtenir une équation décrivant comment les phonons se propagent à l'échelle microscopique. L'équation de Peierls considère les phonons, c'est-à-dire les quanta de vibration du réseau cristallin, comme des particules qui voyagent librement jusqu'à ce qu'elles entrent en collision, soit avec des obstacles externes tels que des imperfections du réseau cristallin, soit entre elles, en se séparant >