



Quand les grandeurs thermiques sont les enfants de l'incertitude

Karl Joulain

Institut P' • UPR CNRS 3346
ENSIP • Bâtiment de mécanique B25
B.P 633
2, rue Pierre Brousse
F86022 POITIERS Cedex



Collaborateurs

- NanoEquipe nanothermique Poitiers

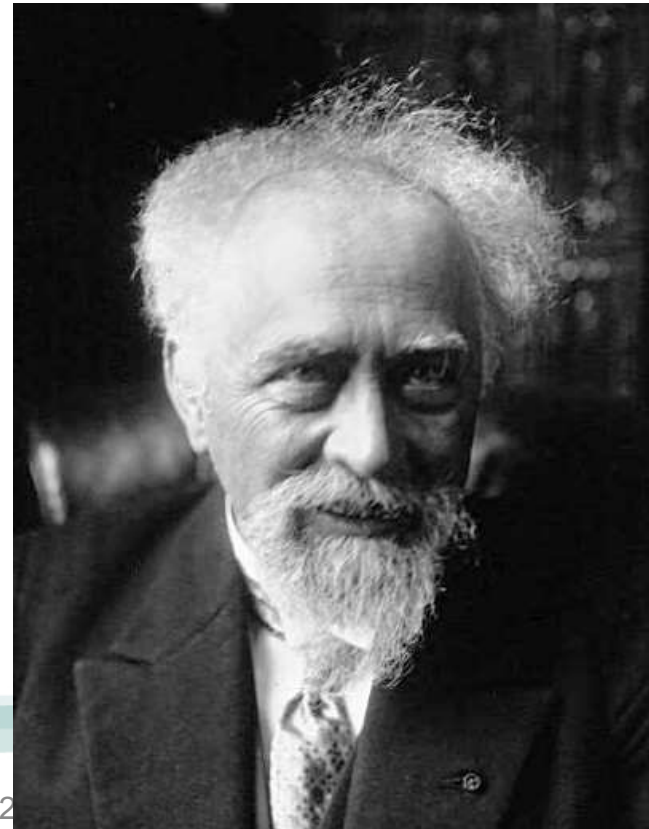


Collaborateurs

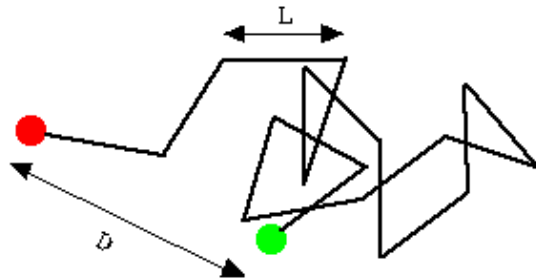
- Jean-Jacques Greffet Institut d'optique
- Philippe Ben-Abdallah Institut d'optique
- Yannick De Wilde ESPCI
- Joël Chevrier Institut Néel
- Pierre-Olivier Chapuis CETHIL
- Carsten Henkel Université de Potsdam

Origine microscopique de la diffusion et mouvement Brownien

- Einstein (1905) Langevin (1908) Perrin (1908)



Origine microscopique de l'équation de la diffusion



Einstein 1905

Marche au hasard => équation de diffusion

Equation de la chaleur

$$\frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = a \Delta T(\mathbf{r}, t)$$

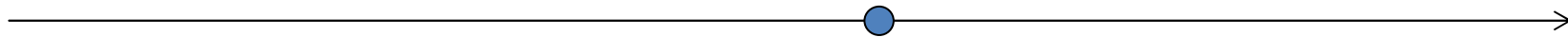
Loi de Fourier

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = -k \nabla T(\mathbf{r}, t)$$

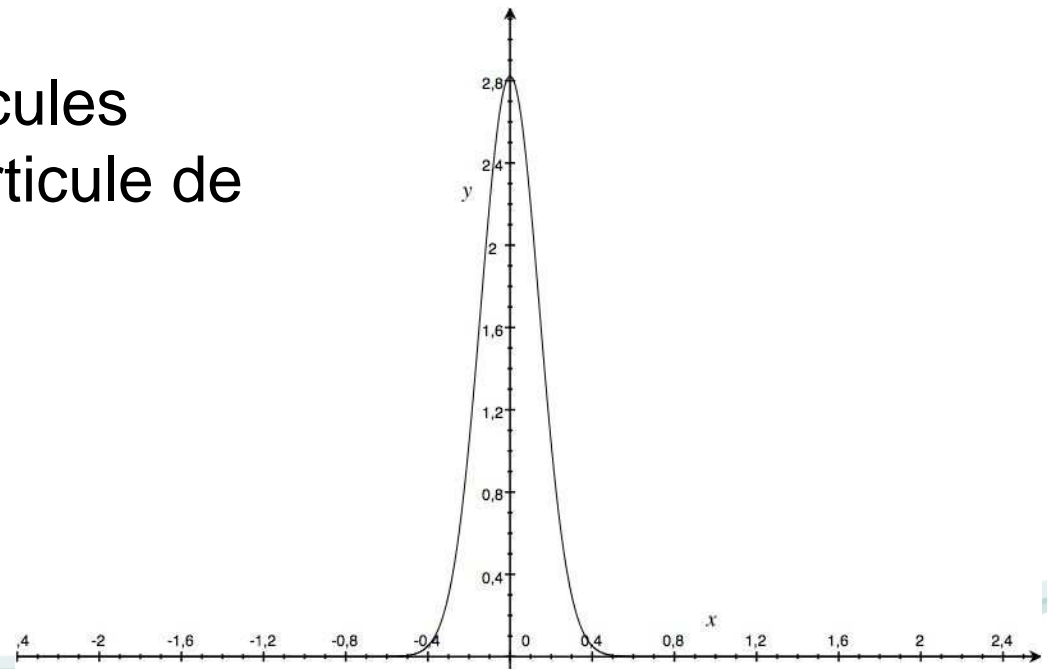
$$10^{-2} < k < 10^2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

Mouvement Brownien : Evolution concentration à 1D

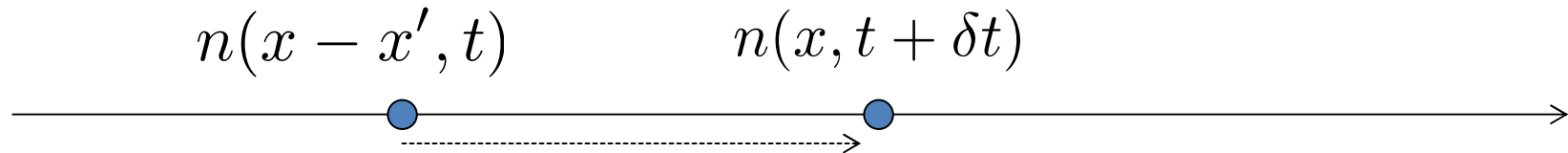
$$n(x, t)$$



n : concentration en particules
 f : probabilité pour une particule de
parcourir x pendant δt



Equation de la diffusion



$$n(x, t + \delta t) = \int_{-\infty}^{+\infty} n(x - x', t) f(x') dx'$$

Développement de n aux ordres dominants

$$n(x, t + \delta t) = n(x, t) + \delta t \frac{\partial n}{\partial t}$$

$$n(x - x', t) = n(x, t) - x' \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{x'^2}{2} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$

Equation de la diffusion

- Propriétés de f

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 f(x) dx = \Delta^2$$

- Equation de la diffusion

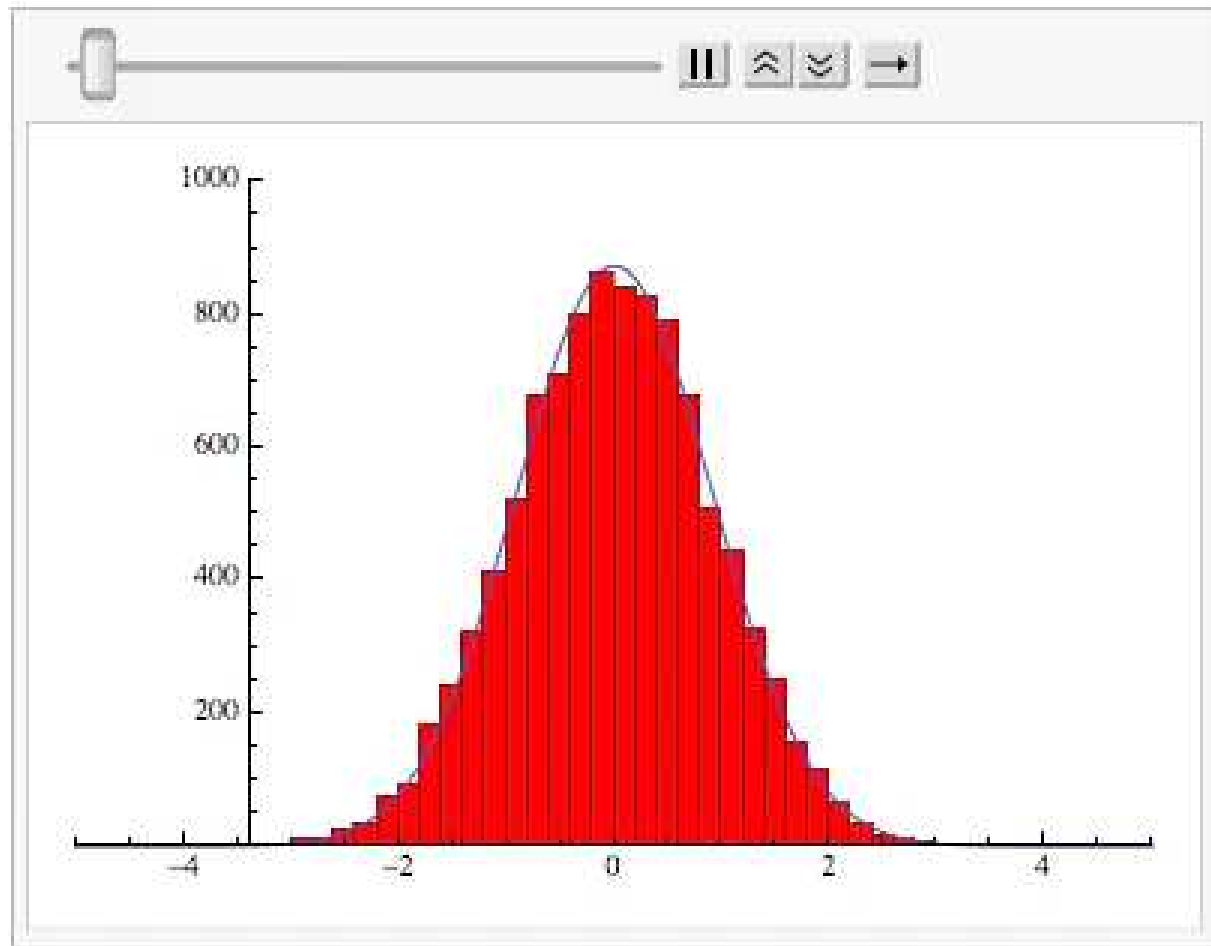
$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = \frac{\Delta^2}{2\delta t} \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2}$$

- Coefficient de diffusion (enfant des collisions!)

$$D = \frac{l^2}{2\tau}$$

Diffusion et marche au hasard : Comparaison simulation et théorie

$$n(x, T) = \frac{N}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/(4Dt)}$$



Loi de Fourier (régime de diffusion)

Porteurs de chaleur: ondes acoustiques (phonons)

Théorie cinétique $l_{mfp} \ll l_{size}$

$$\dot{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = - \sum_{\mathbf{k}, p} \hbar \omega(\mathbf{k}) \tau_{\mathbf{k}} \frac{\partial f^0}{\partial T} (\mathbf{v} \cdot \nabla T) \mathbf{v} = - \frac{1}{6\pi^2} \sum_p \int_0^{K_{Max}} C v_{k,p} v_{g,p}^2(k) \tau_p(k) dk \nabla T$$

Deux paramètres clés : vitesse et temps de relaxation

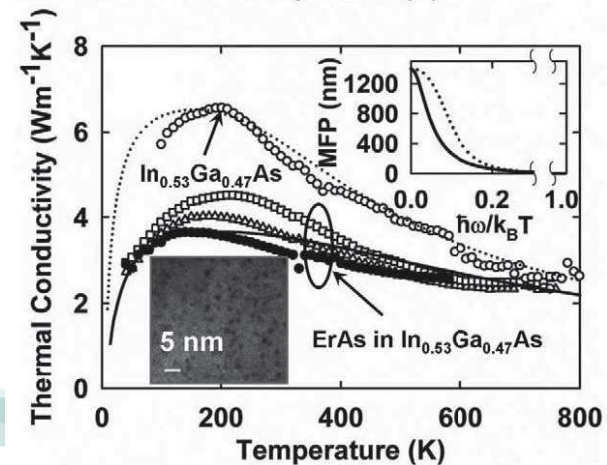
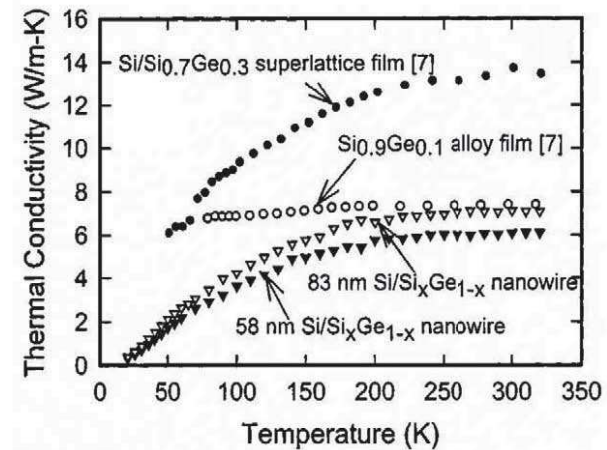
Réduire la conductivité thermique

- Limite « alliage ». Les impuretés réduisent le temps de collision des phonons

$$\sigma \propto a^6 / \lambda^4$$

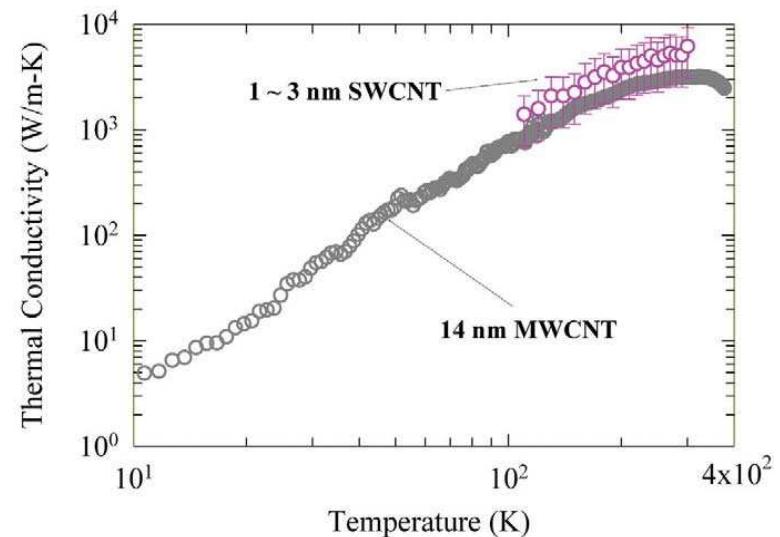
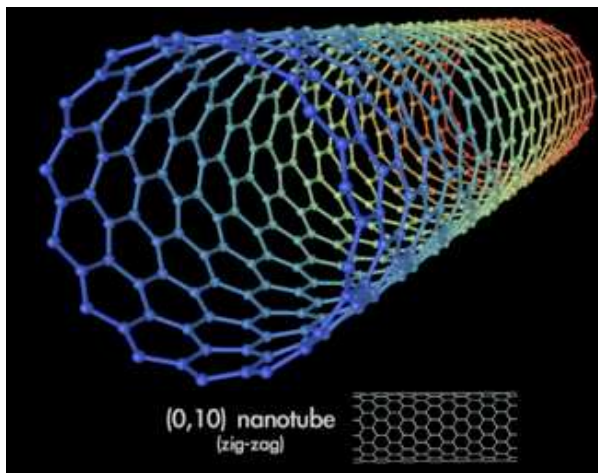
Li et al., *Appl. Phys. Lett.*, **88**, 3186 (2003)

Kim et al., *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 045901 (2006)



Augmenter la conductivité thermique

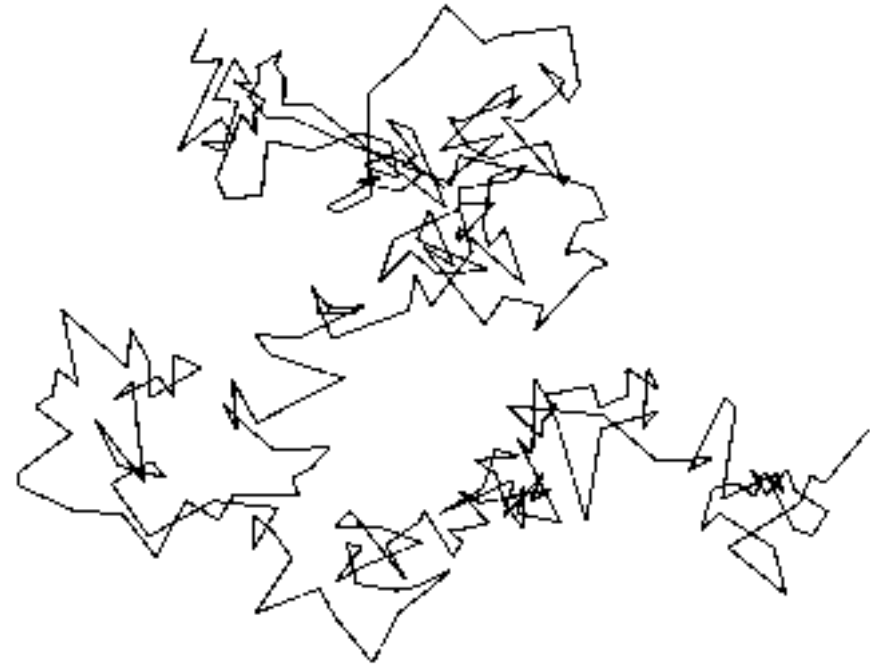
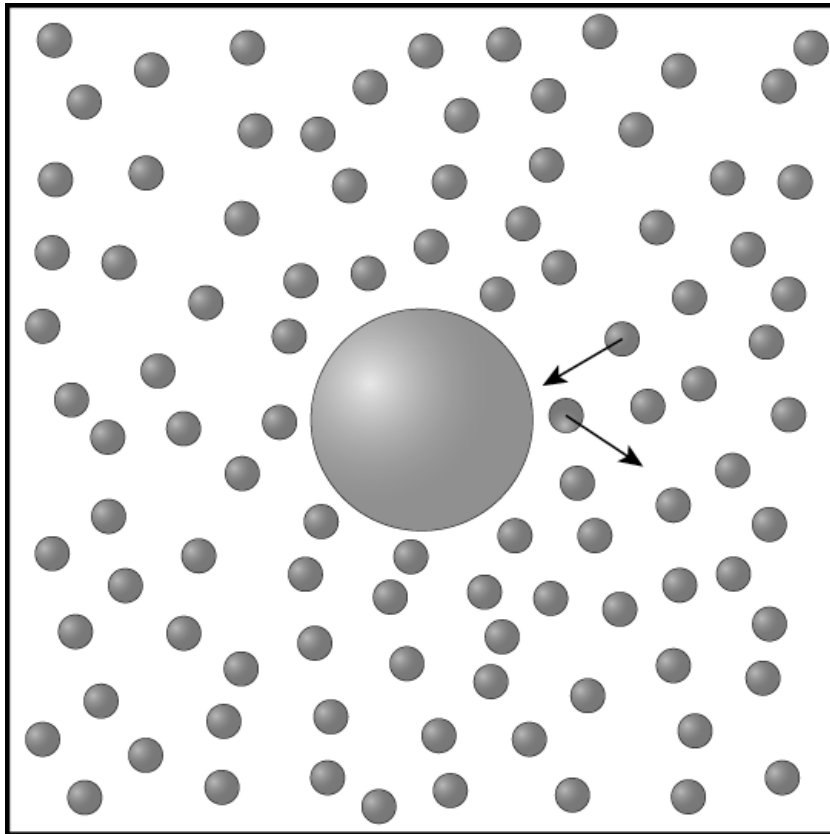
Nanotube de carbone: rigidité élevée et peu d'interaction de phonon



Kim et al., *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 215502 (2001)

Yu et al., *Nanoletters*, **5**, 1842 (2005)

Mouvement Brownien



Evolution de la position de la particule : équation de Langevin

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\alpha \mathbf{v} + \mathbf{F}$$

\mathbf{F} : Force de Langevin $\langle \mathbf{F} \rangle = 0$

Solution de l'équation de Langevin pour la vitesse

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 e^{-\alpha/mt} + \int_0^t \frac{\mathbf{F}(t')}{m} e^{\alpha/m(t'-t)} dt'$$

Fluctuation de vitesse lors d'une marche au hasard.

- Moyenne de la vitesse nulle aux temps longs.
- Fluctuation du carré de la vitesse $\langle \mathbf{v} \rangle = 0$

$$\langle \mathbf{v}^2(t) \rangle = v_0^2 e^{-2\alpha t/m} + \int_0^t \int_0^t \frac{\mathbf{F}(t') \cdot \mathbf{F}(t'')}{m^2} e^{\alpha/m(t'+t''-2t)} dt' dt''$$

- Fonction de corrélation de la force de Langevin

$$\mathbf{F}(t') \cdot \mathbf{F}(t'') = C(t' - t'')$$

Théorème de fluctuation dissipation

- Hyp : t infini. Equipartition énergie
 $1/2mv^2=3/2k_bT$
- Lien entre les fluctuations de la force et les pertes dans le système

$$\alpha = \frac{1}{6k_bT} \int_{-\infty}^{+\infty} C(\tau) d\tau$$

- Si bruit blanc : $C(\omega) = Cte$

$$\Rightarrow C(\tau) = 6k_bT\alpha\delta(\tau)$$

Mesure du Nombre d'Avogadro (ou de la viscosité!)

- Fluctuations de position d'une particule Brownienne. Viscosité : enfant des fluctuations de la force de Langevin

$$\langle r^2(t) \rangle = 2Dt = \frac{6k_b T t}{\alpha}$$

$$D = \frac{3RT}{6\pi\eta a\mathcal{N}}$$

Théorème de fluctuation-dissipation : cas général

- Système décrit par un hamiltonien H_0
- Perturbation décrite par un hamiltonien $H' = -aA$.
- Relation constitutive entre a et A

$$A(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(t - t') a(t') dt' \Rightarrow A(\omega) = \chi(\omega) a(\omega)$$

- Théorème de Fluctuation-dissipation

$$\chi''(\omega) \hbar \tanh^{-1} \left[\frac{\hbar \omega}{2k_b T} \right] = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle A(0) A(\tau) \rangle e^{i\omega \tau} d\tau$$

Exemple d'application du théorème de fluctuation dissipation

- Bruit de Nyquist

Energie $E = QU$

$$U(\omega) = Z(\omega)I(\omega) = Z(\omega)\dot{Q}(\omega) = -i\omega Z(\omega)Q(\omega)$$

Susceptibilité $\chi(\omega) = i\omega Z(\omega)$



$$Re[Z(\omega)] \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_b T)} - 1} \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle U(0)U(t) \rangle e^{i\omega t} dt$$

TF + $k_b T \gg \hbar\omega$: Formule de Nyquist

$$\langle V^2(0) \rangle = \frac{2k_b T}{\pi} \int_0^{\infty} R(\omega) d\omega$$

Fluctuation-dissipation appliqué à la conduction

- Formule de Kubo

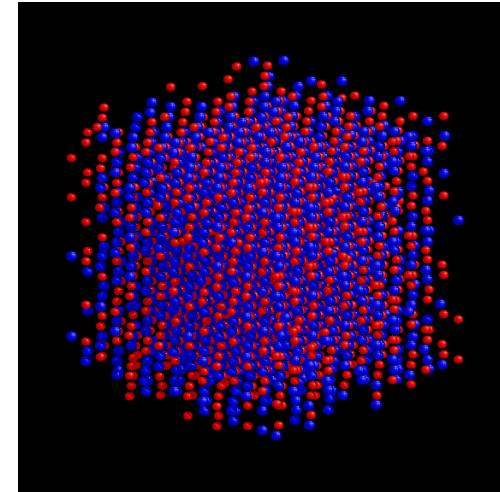
$$\dot{H}' = -T \int \mathbf{J}_Q \nabla \left(\frac{1}{T} \right) d^3 \mathbf{r}$$
$$\mathbf{J}_Q = -\kappa \nabla T$$



$$\kappa(\omega) = \frac{1}{k_b T^2 V} \int_0^\infty \langle \mathbf{J}_Q(0) \mathbf{J}_Q(t) \rangle e^{i\omega t} dt$$

Dynamique moléculaire

- Initialisation des positions
- Calcul des forces pour toutes les molécules
- Thermostats
- Calcul des nouvelles positions et vitesses
- Retour au calcul des forces jusqu'à une condition d'arrêt
- Calcul de la corrélation du flux de chaleur à chaque instant et détermination de la conductivité thermique



Fluctuation dissipation pour le rayonnement

S.M. Rytov



$$H' = - \int \mathbf{P}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 (\epsilon_r - 1) \mathbf{E}(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -i\omega \mathbf{P}$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -i\omega \mathbf{P} = -i\omega \epsilon_0 (\epsilon_r - 1) \mathbf{E}(\mathbf{r})$$

$$\langle j_n(\mathbf{r}) j_m(\mathbf{r}') \rangle = \frac{\omega \epsilon_0 \text{Im}(\epsilon)}{\pi} \Theta(\omega, T) \delta_{nm} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \text{Fluctuations des courants}$$

$$\Theta(\omega, T) = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_b T} - 1}$$

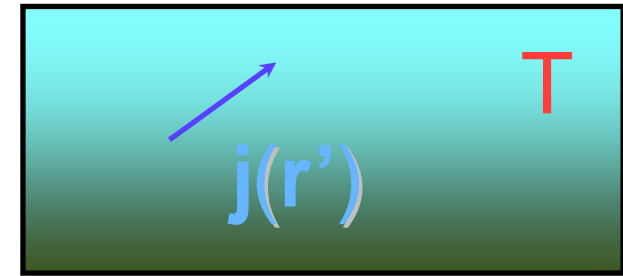
relées à la constante diélectrique du milieu

Electrodynamique Fluctuationnelle

Les courants thermiques rayonnent comme des antennes

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'$$

$\mathbf{E}(\mathbf{r})$

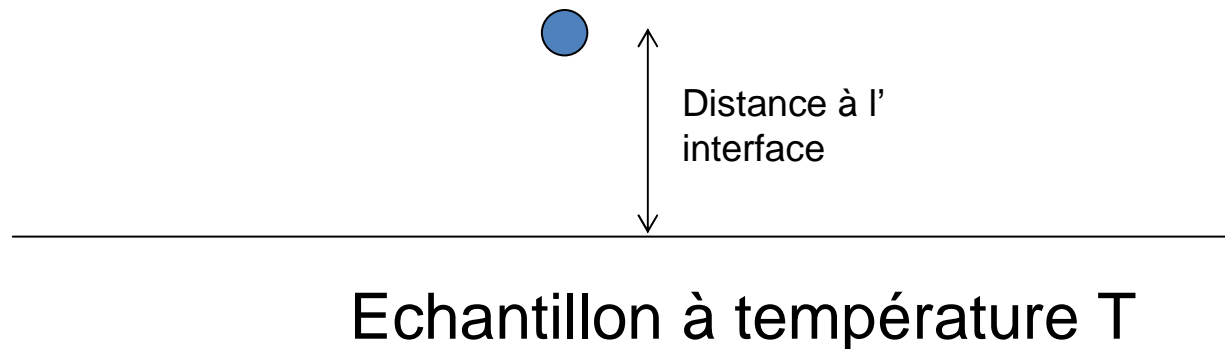


Théorème de Fluctuation-dissipation

$$\langle j_n(\mathbf{r}) j_m(\mathbf{r}') \rangle = \frac{\omega \epsilon_0 \text{Im}(\epsilon)}{\pi} \Theta(\omega, T) \delta_{nm} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$\Theta(\omega, T) = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / k_b T} - 1}$$

Densité d'énergie au dessus d'une interface



A l'équilibre thermique

$$U(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\epsilon_0}{2} |\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)|^2 + \frac{\mu_0}{2} |\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)|^2 = \rho(\mathbf{r}, \omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_b T} - 1}$$

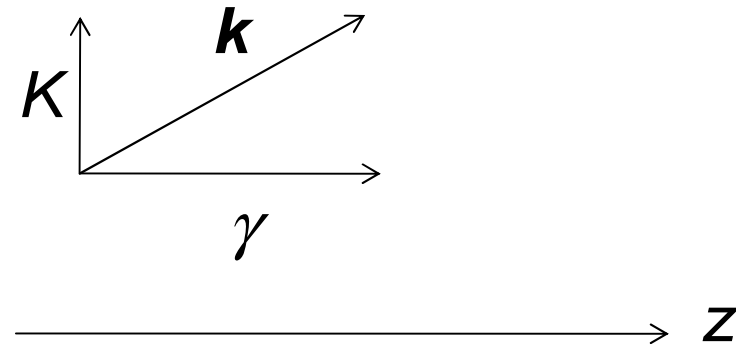
$\rho(\mathbf{r}, \omega)$: LDOS (densité locale d'états)

Modes Electromagnetiques

- Ondes Propagatives

$$K^2 + \gamma^2 = \omega^2 / c^2$$

$$\gamma \in R$$



- Ondes Evanescentes

$$\gamma \in iR$$

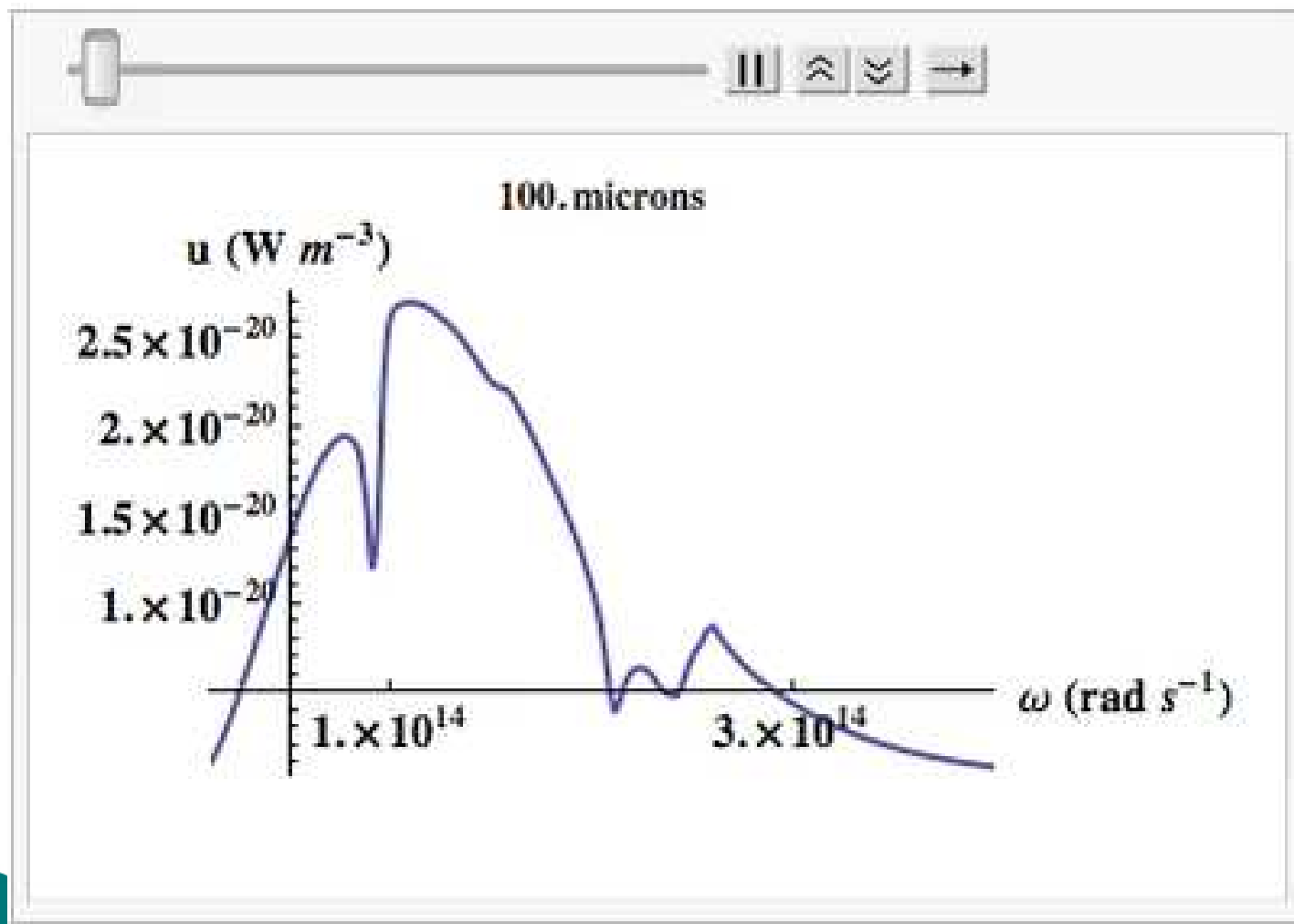


Densité d'énergie au-dessus d'une interface

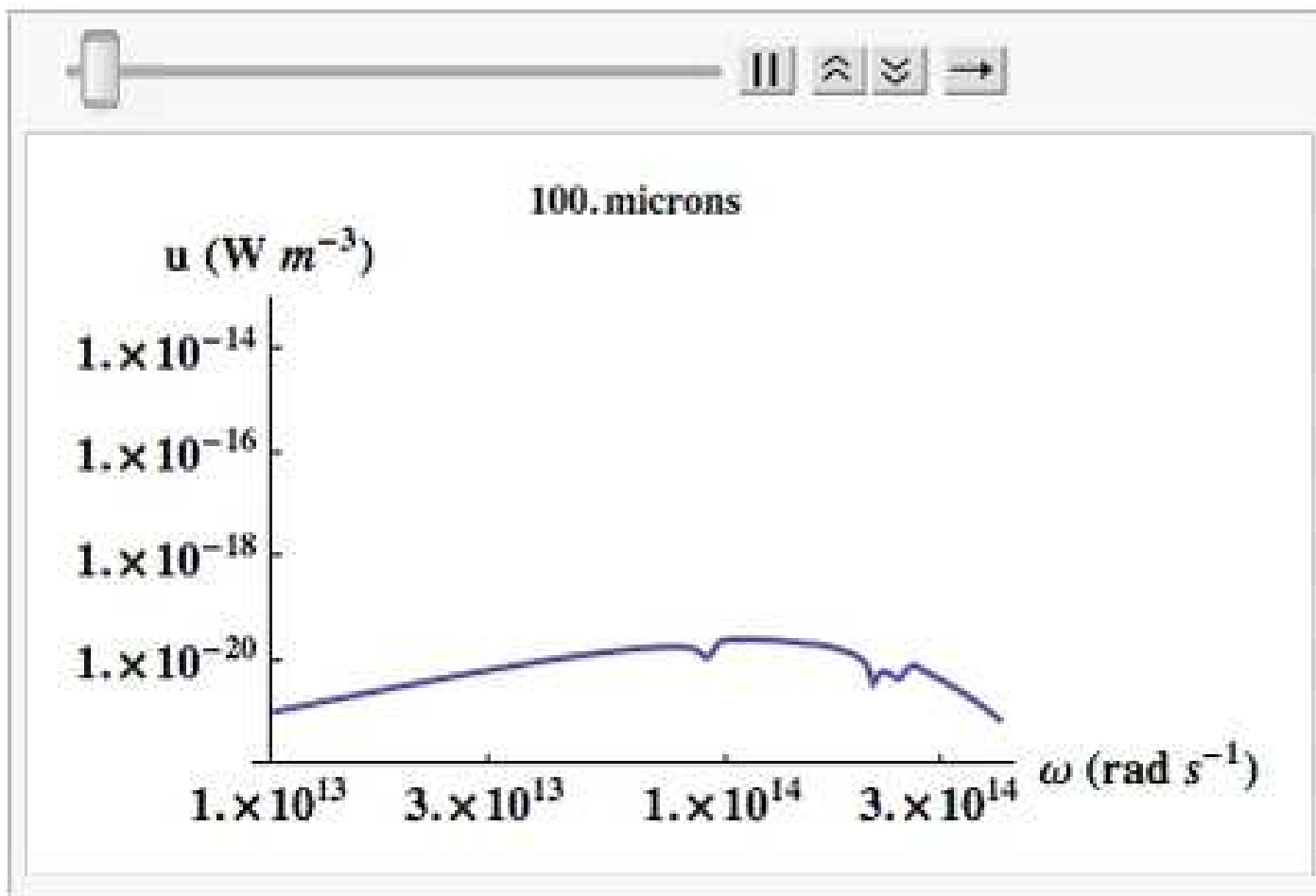
$$U(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^2}{2\pi^2c^2(e^{\hbar\omega/k_bT} - 1)} \left\{ \int_0^{\omega/c} \frac{KdK}{\gamma} \left(\frac{1 - |r_{12}^s|^2}{2} + \frac{1 - |r_{12}^p|^2}{2} \right) + \int_{\omega/c}^{\infty} \frac{K^3dK}{k_0^2|\gamma|} [\Im(r_{12}^s) + \Im(r_{12}^p)] e^{-2|\gamma|z} \right\}$$

En classique l'émissivité s'identifie avec $1-|r|^2$.
Terme supplémentaire lié aux ondes évanescentes

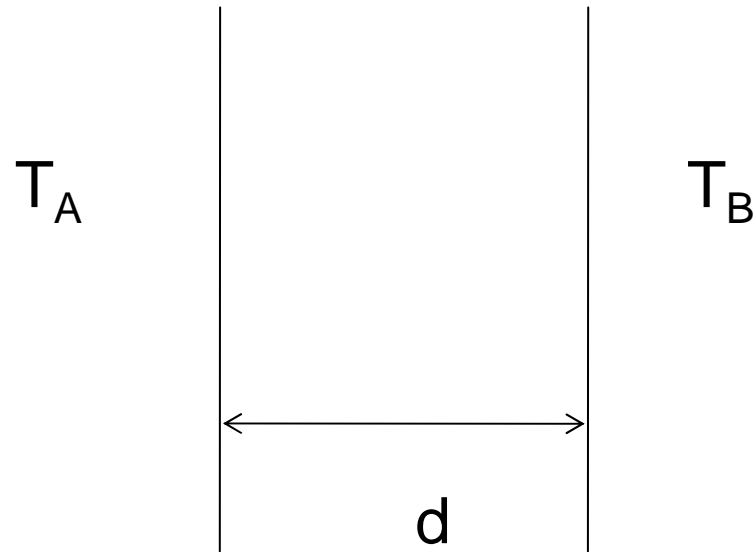
Densité d'énergie au-dessus de SiO2



Densité d'énergie au dessus de SiO2



Transfert d'énergie entre deux interfaces



Mode Electromagnetique: onde plane (ω , \mathbf{K})

Transfert entre deux interfaces

- Ondes Propagatives

$$\varphi_{A \leftrightarrow B}^{prop,s,p} = \int_0^\infty \frac{[\Theta(\omega, T_A) - \Theta(\omega, T_B)]}{4\pi^2} d\omega \int_0^{\omega/c} K dK \frac{(1 - |r_{vA}^{s,p}|^2)(1 - |r_{vB}^{s,p}|^2)}{|1 - r_{vA}^{s,p} r_{vB}^{s,p} e^{2i\gamma_v d}|^2}$$

- Ondes Evanescentes

$$\varphi_{A \leftrightarrow B}^{evan,s,p} = \int_0^\infty \frac{[\Theta(\omega, T_A) - \Theta(\omega, T_B)]}{\pi^2} d\omega \int_{\omega/c}^\infty K dK \frac{Im(r_{vA}^{s,p})Im(r_{vB}^{s,p})}{|1 - r_{vA}^{s,p} r_{vB}^{s,p} e^{2i\gamma_v d}|^2} e^{-2|\gamma_v|d}$$

Densité de flux échangée

- Densité de flux

$$\varphi_{A \leftrightarrow B} = \int_0^{\infty} [\Theta(\omega, T_A) - \Theta(\omega, T_B)] d\omega \int_0^{\infty} \frac{K dK}{4\pi^2} \tau(\omega, K)$$

- Coef trans ondes propagatives

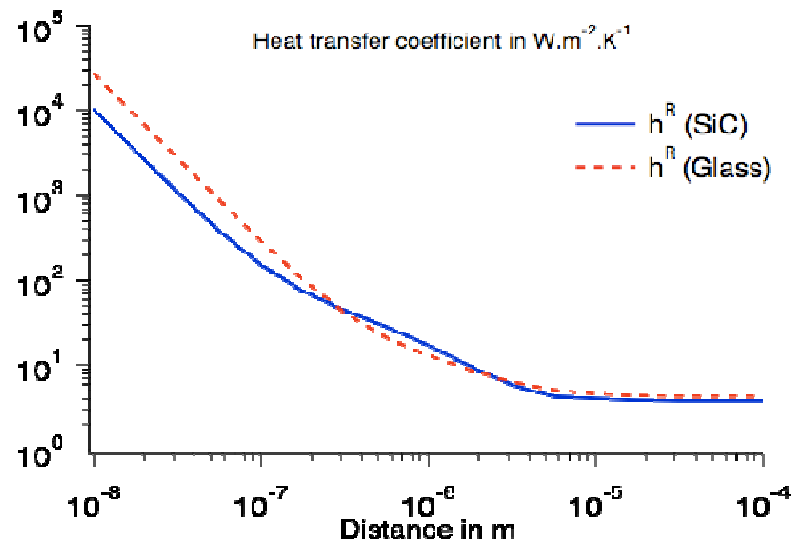
$$\tau(\omega, K) = \frac{(1 - |r_{vA}^{s,p}|^2)(1 - |r_{vB}^{s,p}|^2)}{|1 - r_{vA}^{s,p} r_{vB}^{s,p} e^{2i\gamma_v d}|^2}$$

- Coef trans ondes évanescentes

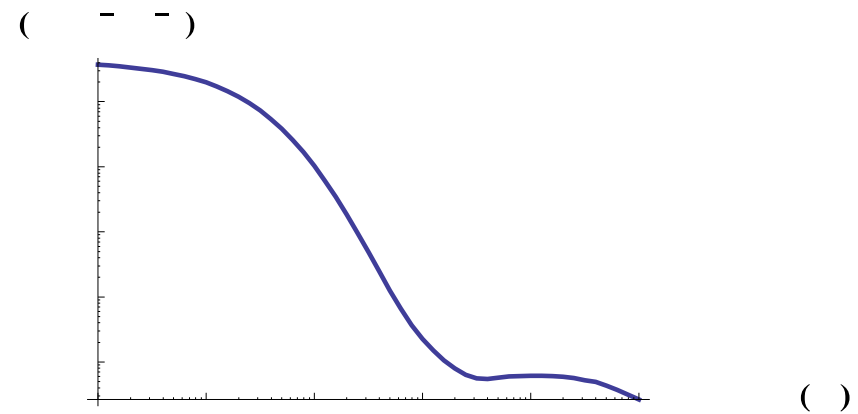
$$\tau(\omega, K) = \frac{4\text{Im}(r_{vA}^{s,p})\text{Im}(r_{vB}^{s,p})}{|1 - r_{vA}^{s,p} r_{vB}^{s,p} e^{2i\gamma_v d}|^2} e^{-2|\gamma_v|d}$$

Densité de flux échangée

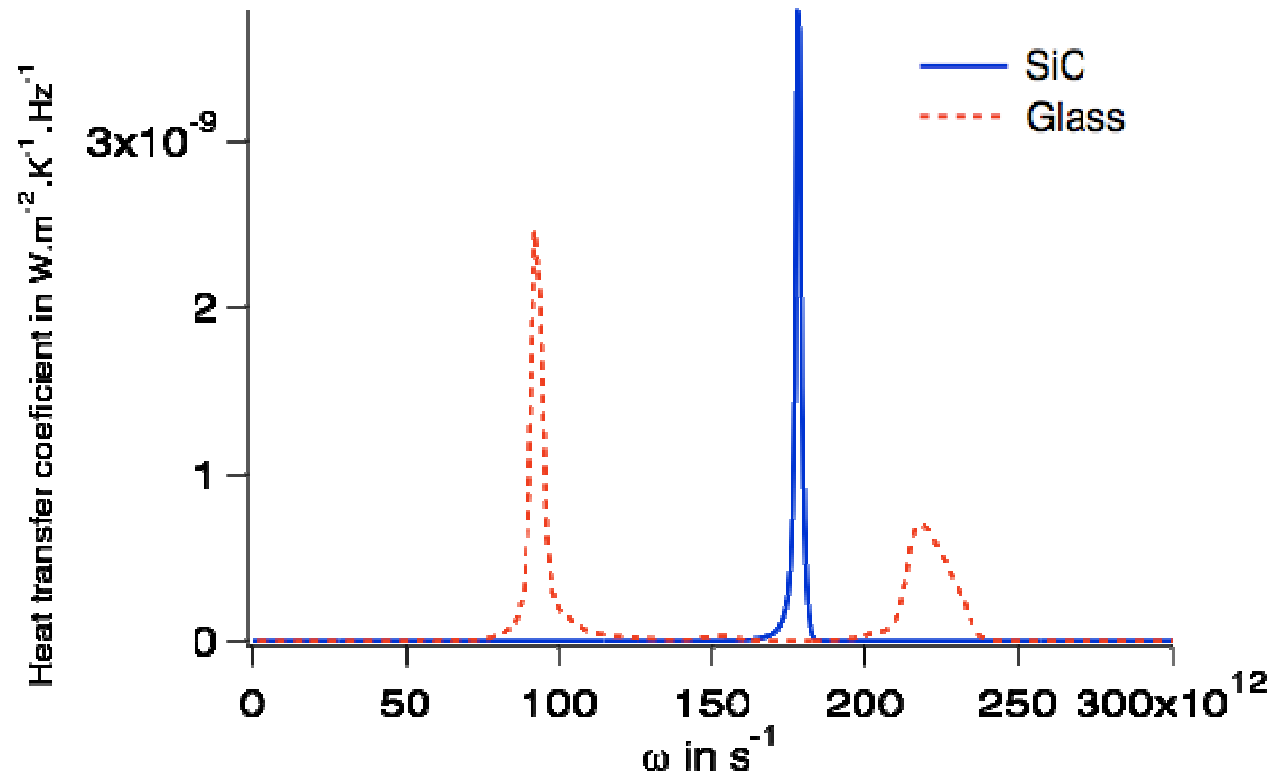
Verre et SiC



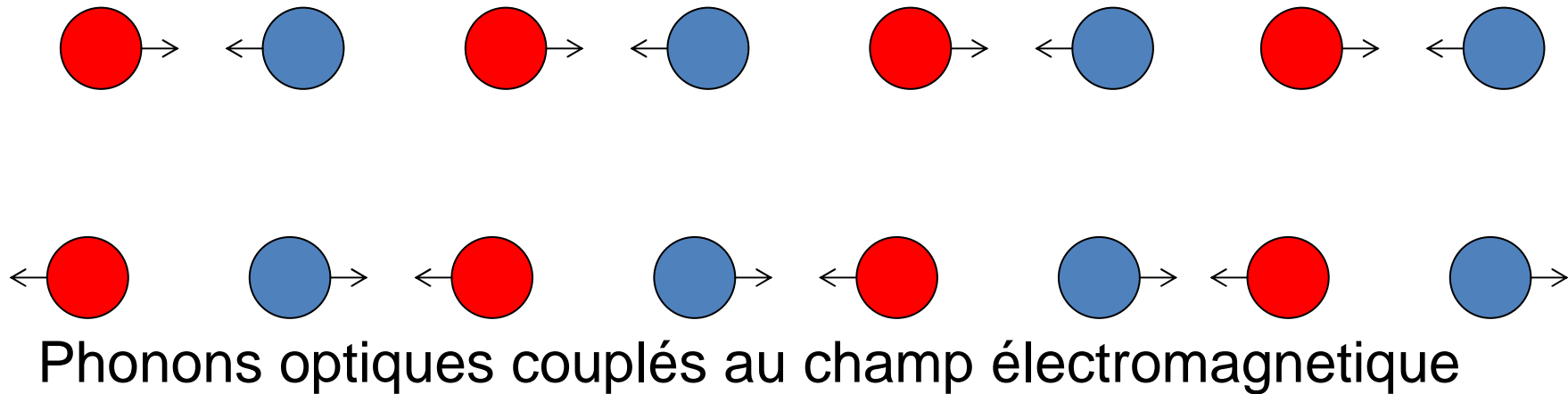
Or



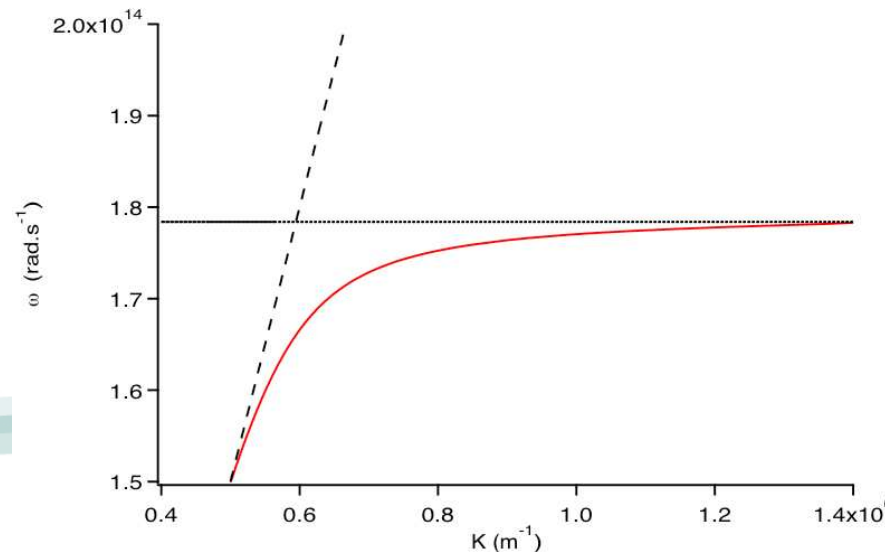
Densité de flux échangée monochromatique



Le SiC : un matériau polaire



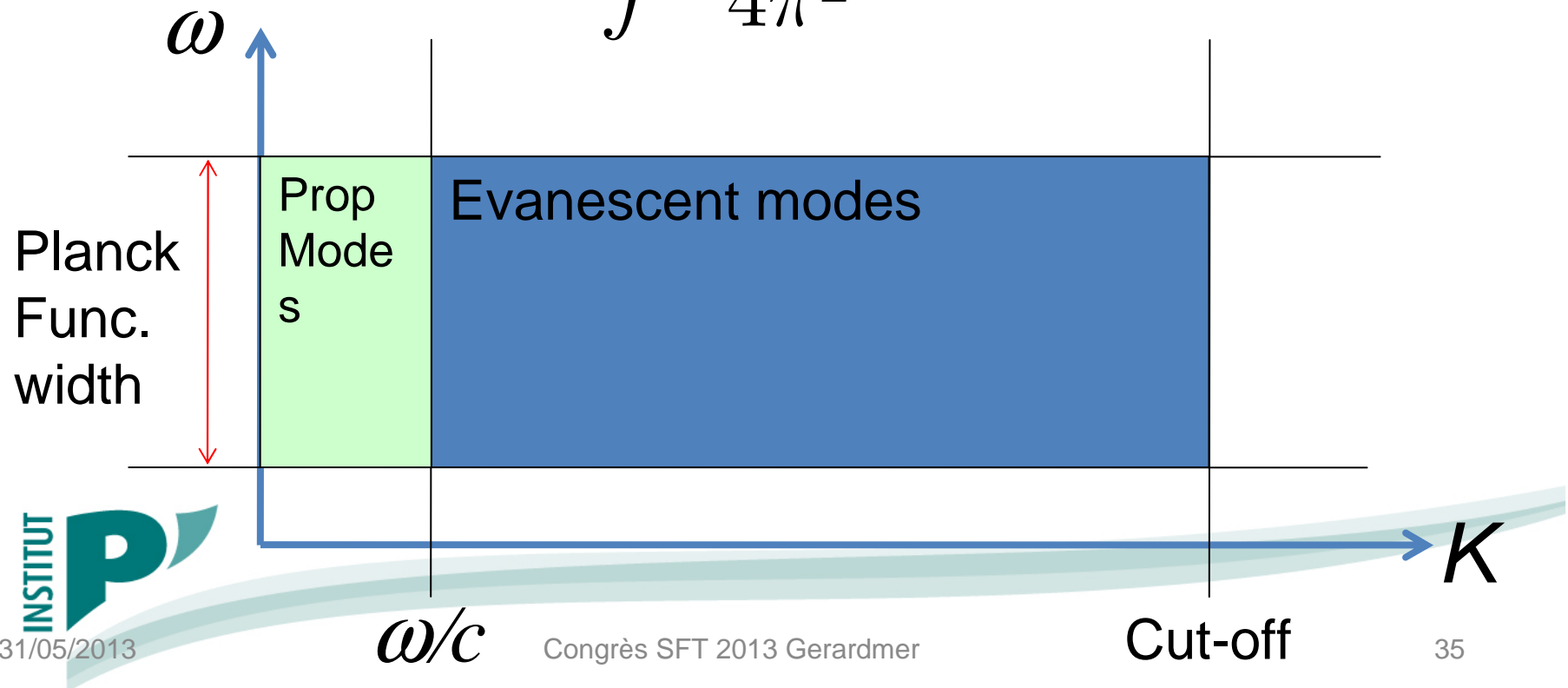
Relation de
Dispersion SiC



Transfert optimal

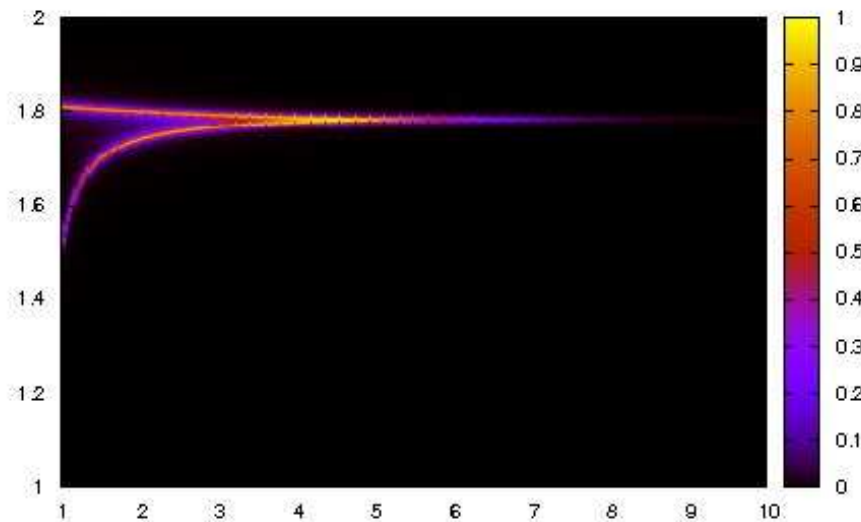
$$\varphi_{A \leftrightarrow B} = \int_0^{\infty} [\Theta(\omega, T_A) - \Theta(\omega, T_B)] N(\omega) d\omega$$

$$N(\omega) = \int \frac{K dK}{4\pi^2} \tau(\omega, K)$$

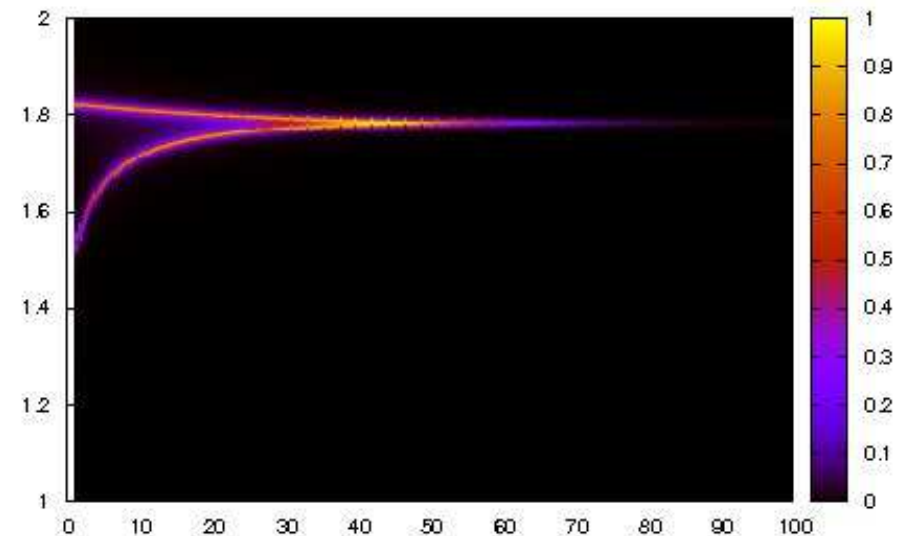


Polaritons couplés augmentent le transfert en champ proche

Transmission coefficient p polarisation in $(K/k_0, \omega/10^{14} \text{ rad s}^{-1})$



$d=1 \mu\text{m}$



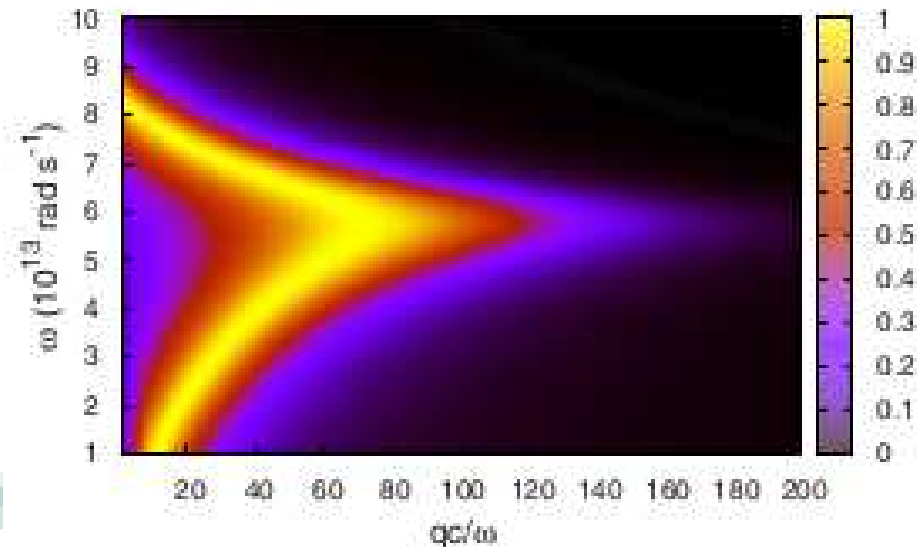
$d=100 \text{ nm}$

Transfert optimal

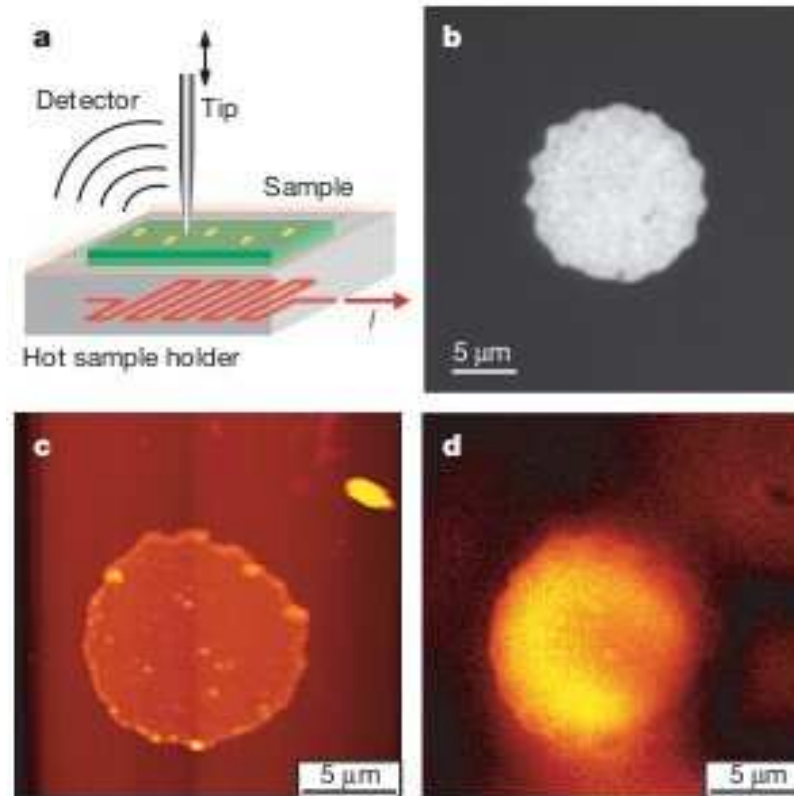
l : longueur de localité (maille du réseau cristallin)

$$\begin{aligned}\varphi_{A \leftrightarrow B} &= \frac{1}{4\pi^2 l^2} \int_0^\infty [\Theta(\omega, T_A) - \Theta(\omega, T_B)] d\omega \\ &= \frac{k_b^2 (T_A^2 - T_B^2)}{48\hbar l^2} \approx \frac{g_0 (T_A - T_B)}{8\pi l^2}\end{aligned}\quad g_0 = \frac{k_b^2 T}{3\hbar}$$

Exemple de transfert
Important entre deux
Corps supportant un
polariton « large »

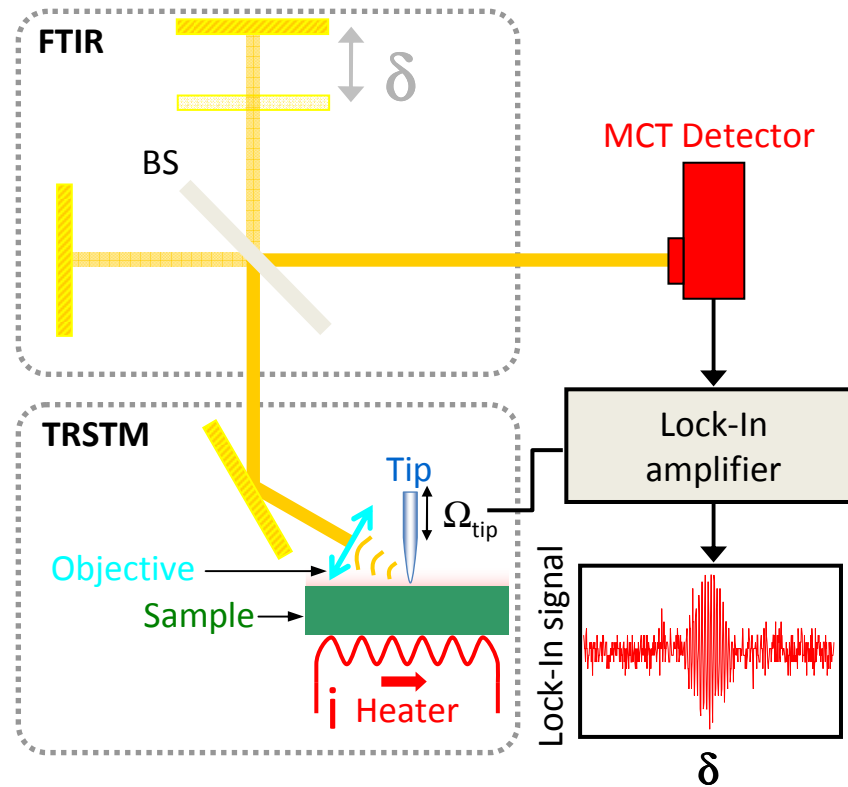


Thermal Radiation Scanning Tunneling Microscopy (TRSTM)



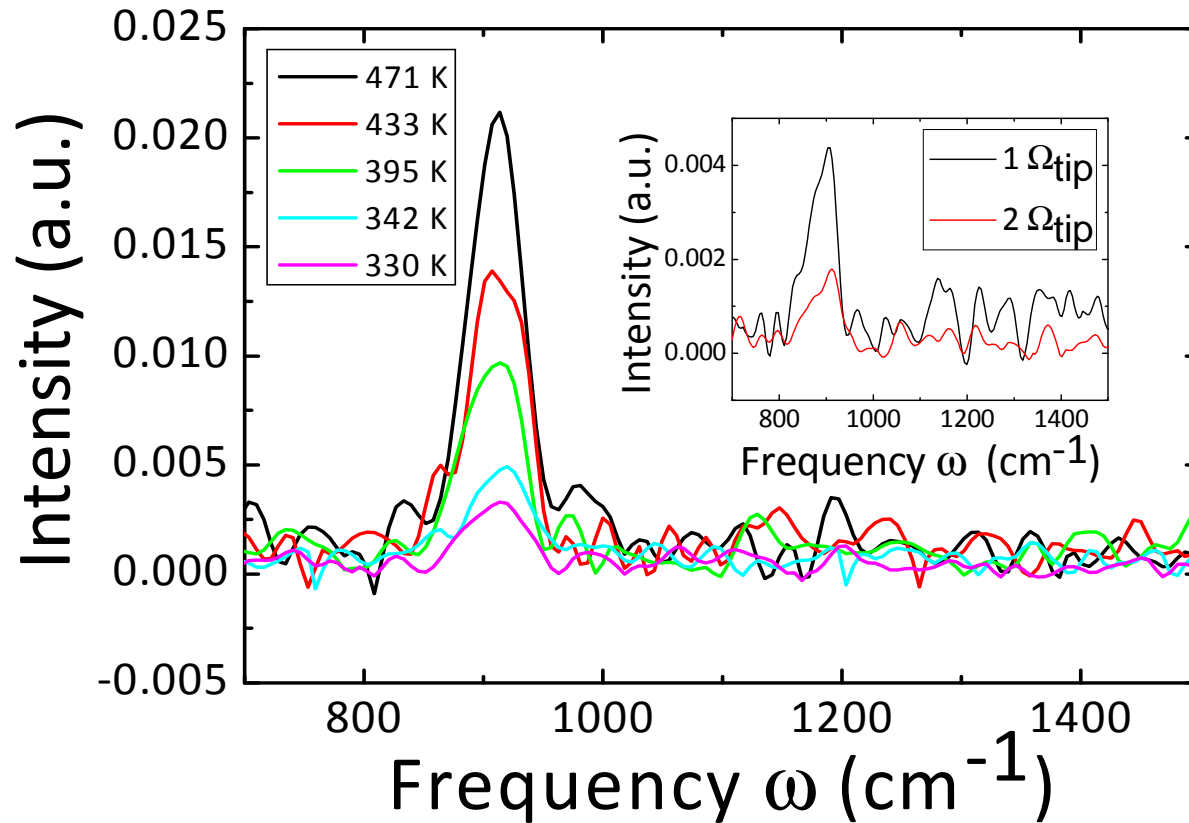
Y. De Wilde et al. Nature, 444, 740-743 (2006)

TRSTM Spectral



Babuty et al., PRL, 110,146103 (2013)

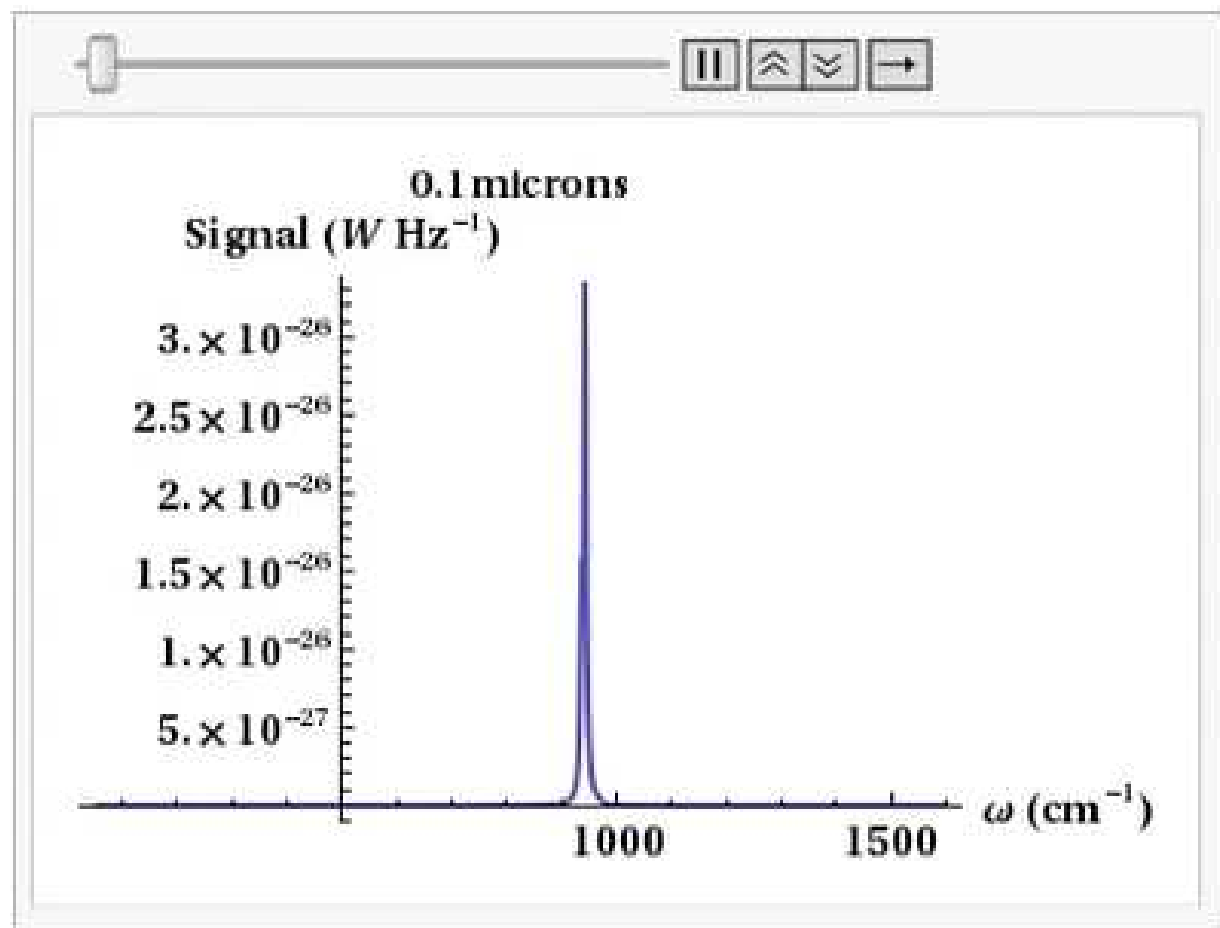
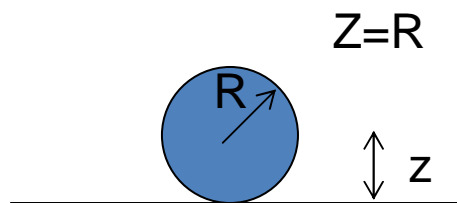
Spectre mesuré



Babuty et al. PRL, 110,146103 (2013)

Signal au detecteur

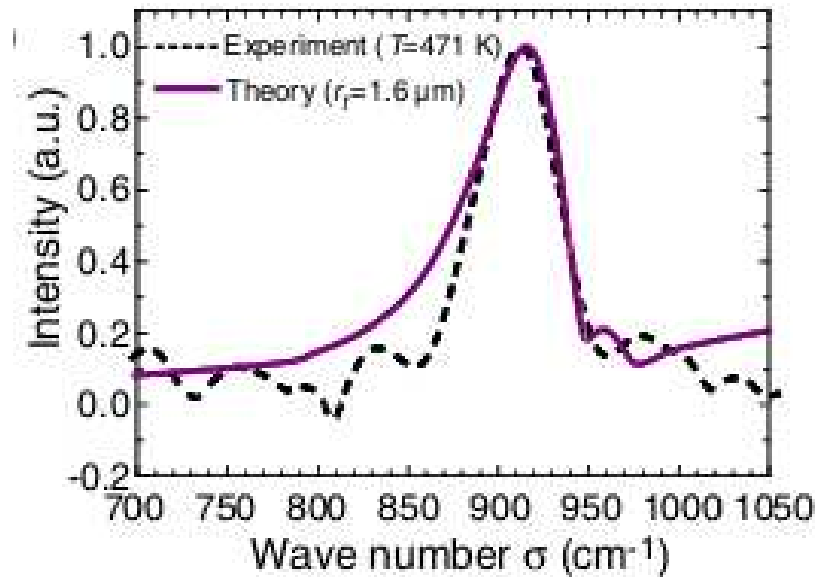
Pointe : W. Substrat SiC



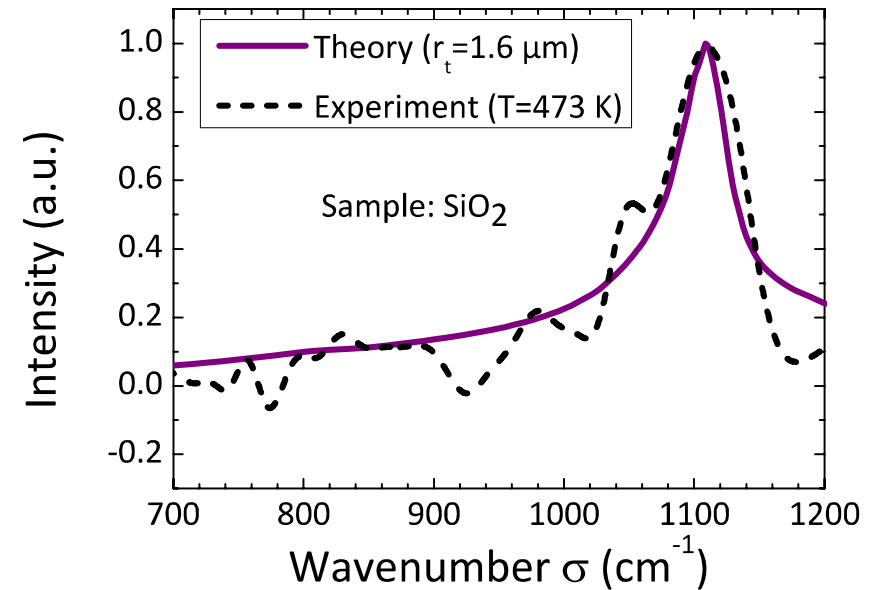
Joulain et al. In preparation arXiv:1201.4834

Signal au detecteur : comparaison théorie expérience

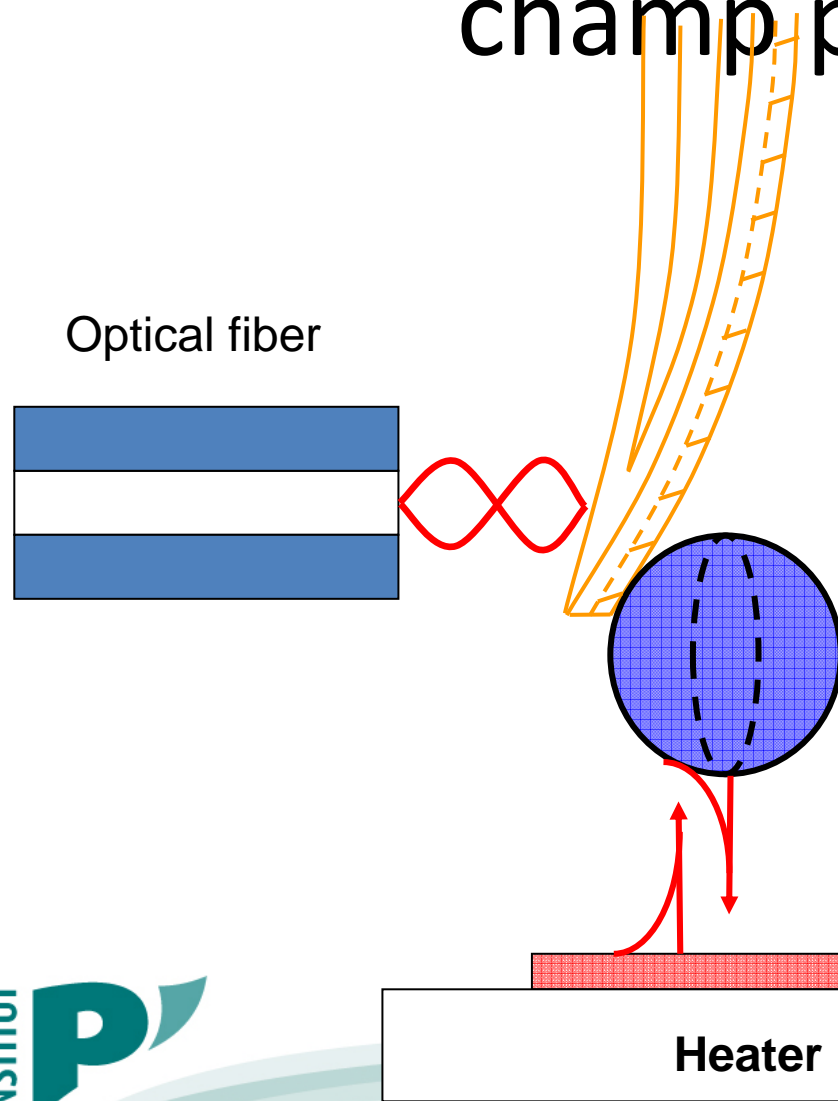
SiC



SiO₂



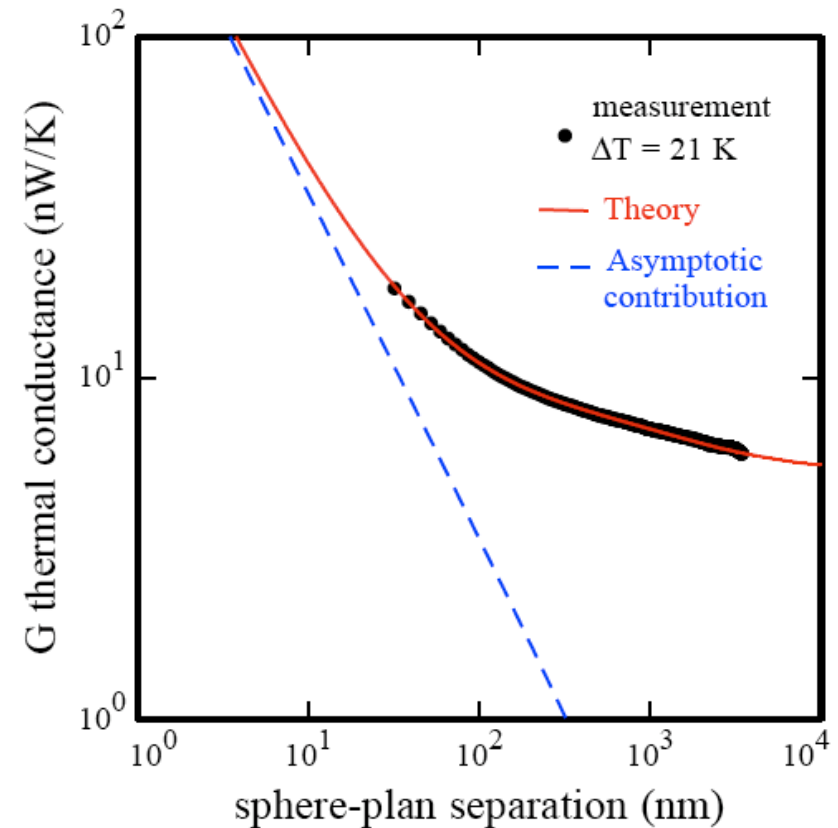
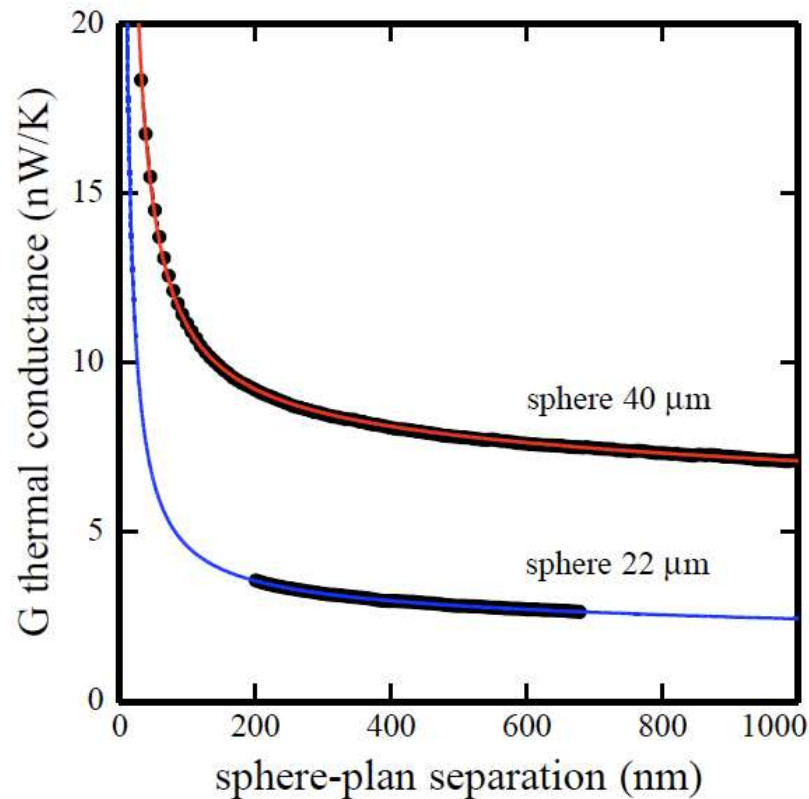
Détection transfert thermique en champ proche



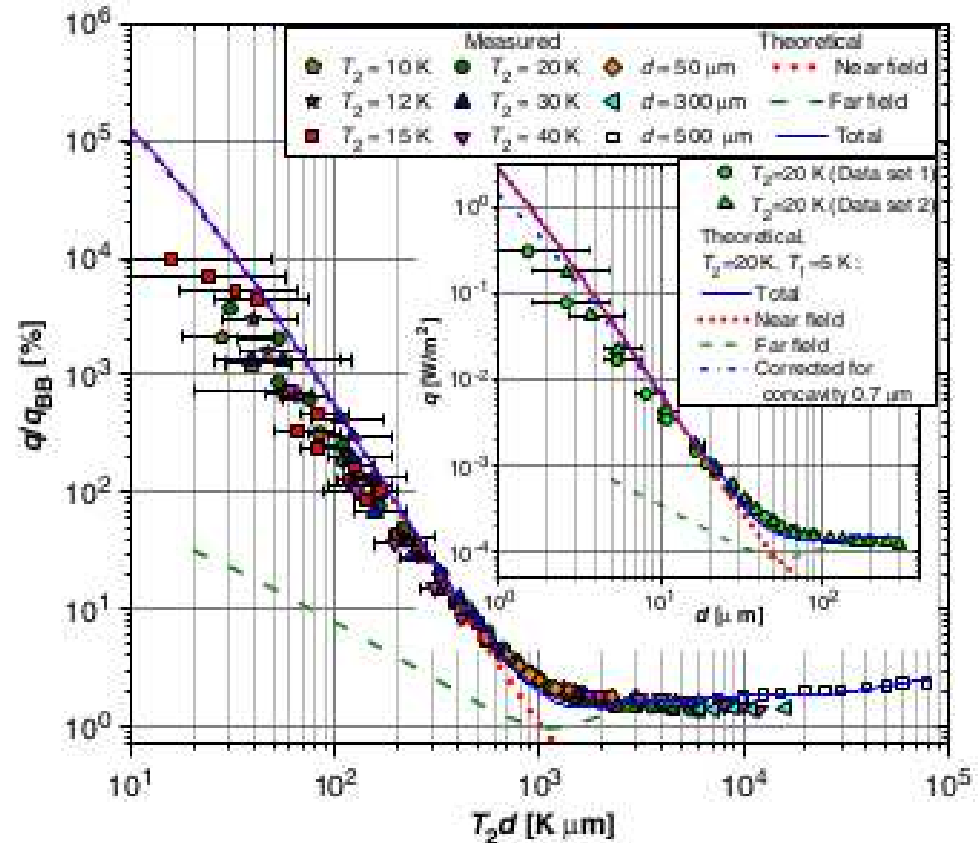
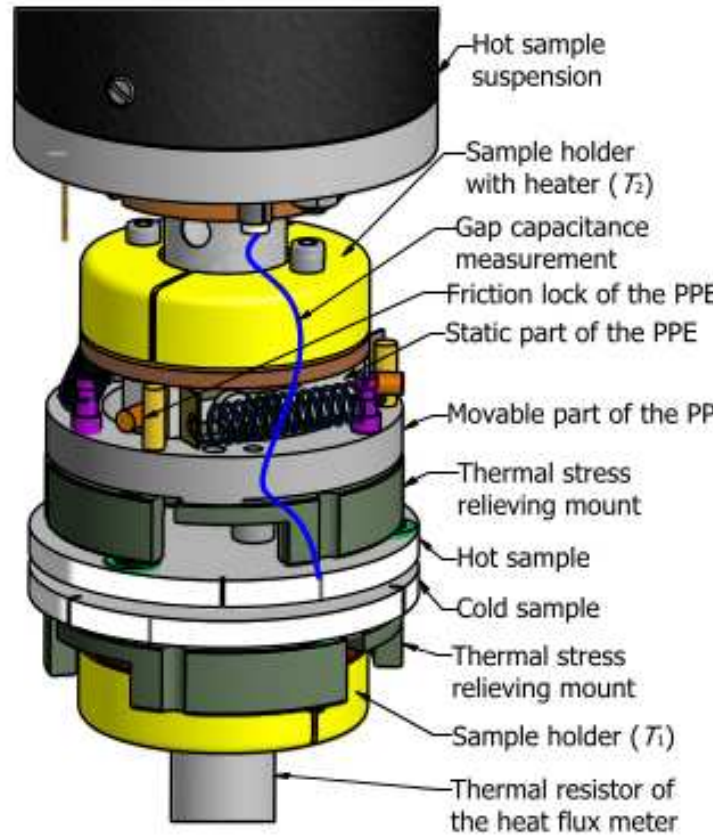
- Vertical configuration
- Heating of the sample
- Vacuum $P \sim 10^{-6}$ mbar

E. Rousseau
A. Siria, J. Chevrier

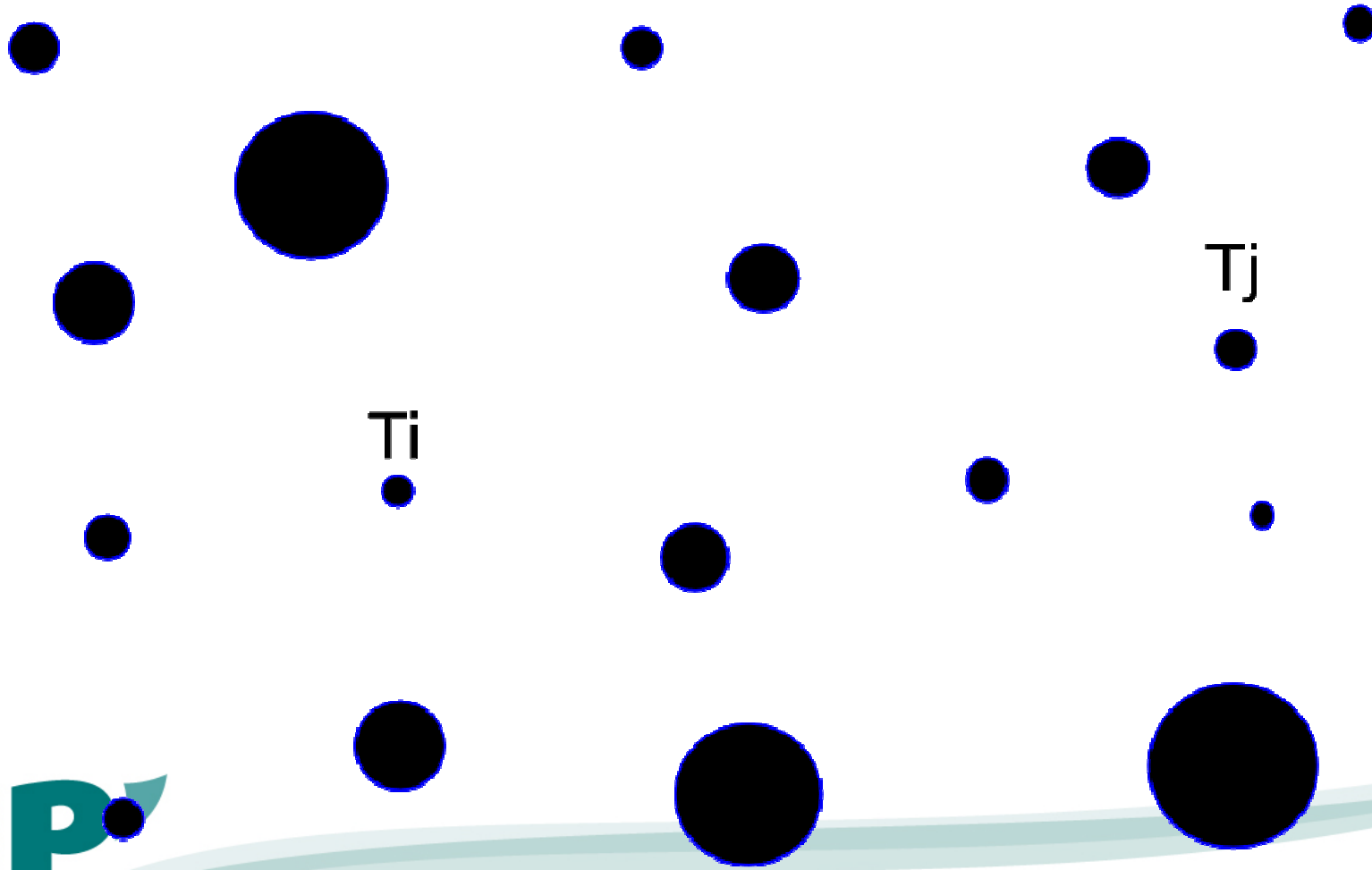
Détection transfert thermique en champ proche



Detection champ proche plan-plan



Transfert à N corps : position du problème



Transfert à N corps

- Equations du problème

$$\mathbf{E}_{ij} = \overset{\leftrightarrow}{\mathbf{G}}_{ij} \mathbf{p}_j$$

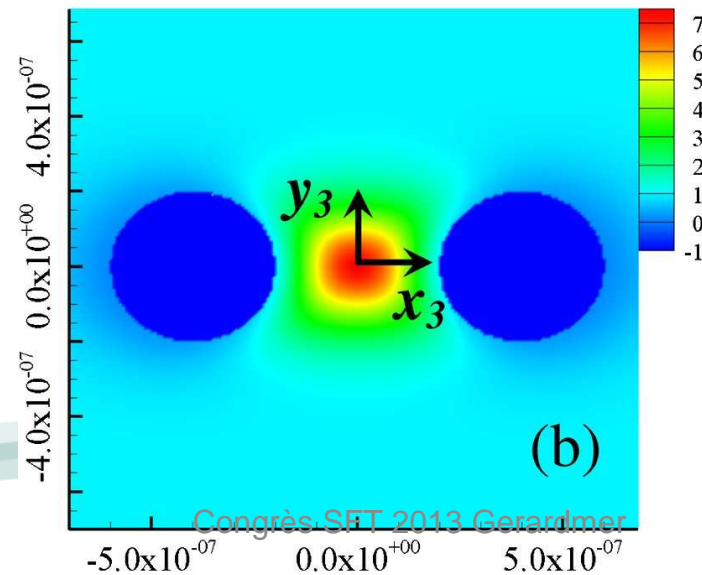
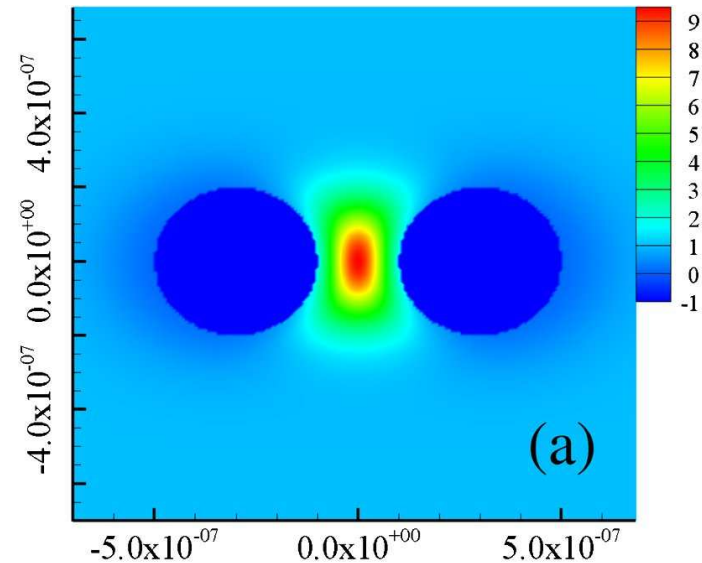
$$\mathbf{E}_{ij} = \overset{\leftrightarrow 0}{\mathbf{G}}_{ij} \mathbf{p}_{j \neq i} + \sum_{k \neq i} \overset{\leftrightarrow 0}{\mathbf{G}}_{ik} \alpha_k \mathbf{E}_{kj}$$

Calcul du flux échangé

$$P_{j \rightarrow i} = 3 \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \Theta(\omega, T_j) \tau_{i,j}(\omega)$$

$$\tau_{i,j}(\omega) = \frac{4}{3} \Im(\alpha_i) \Im(\alpha_j) \text{Tr}[\mathbf{G}_{ij}^{\leftrightarrow} \mathbf{G}_{ij}^{\leftrightarrow+}]$$

Transfert entre trois corps (SiC)



Conversion TPV

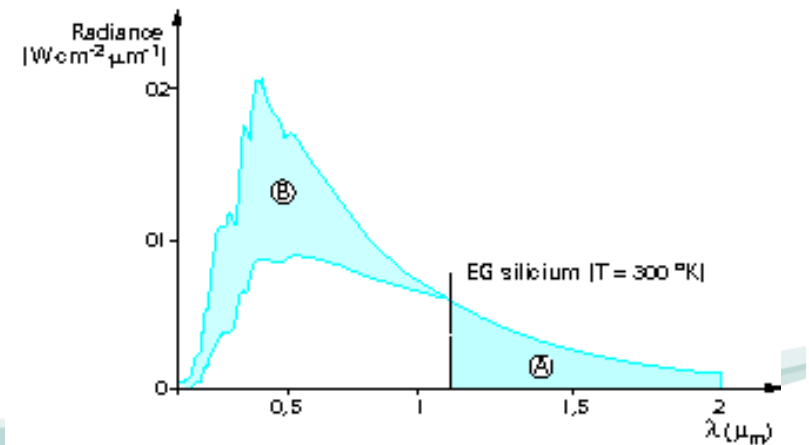
- Limitation flux incident

Source
 $T_s = 2000 \text{ K}$

Détecteur
 $T_d = 300 \text{ K}$

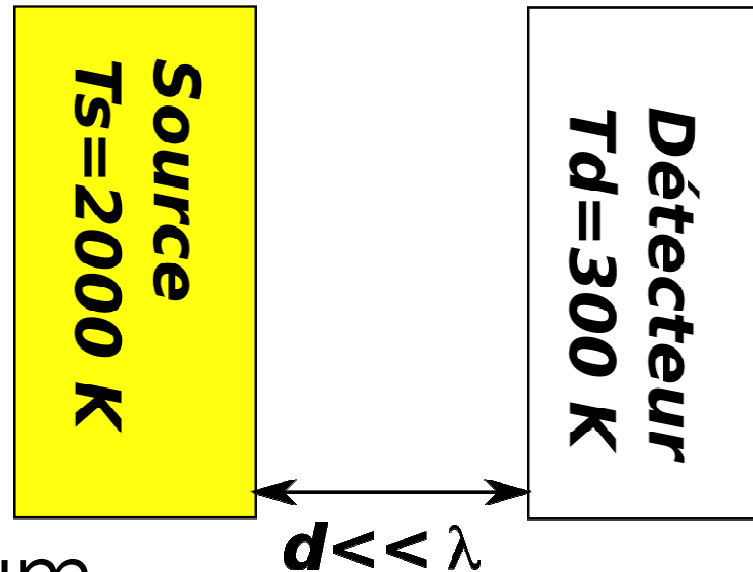
$$\varphi < \sigma (T_s^4 - T_d^4)$$

- Limitation rendement



Cellules TPV de champ proche

- Concept



- Transfert maximum

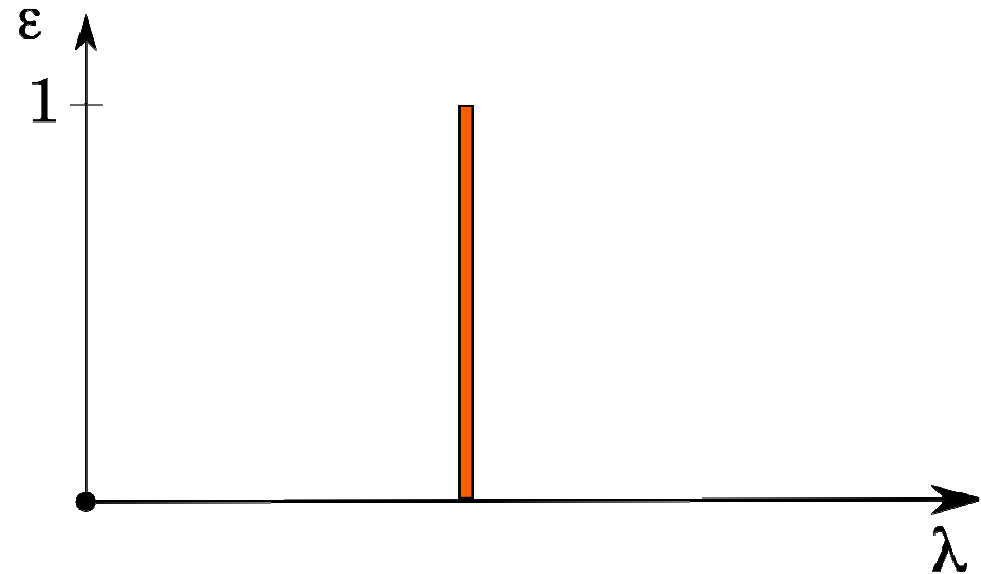
$$\varphi_{A \leftrightarrow B} = \frac{k_b^2 (T_S^2 - T_d^2)}{48\hbar l^2} \approx \frac{g_0 (T_S - T_d)}{8\pi l^2}$$

$$g_0 = \frac{\pi^2 k_b^2 T}{6h} \quad \text{PRB, 82, 121419 (2010)}$$

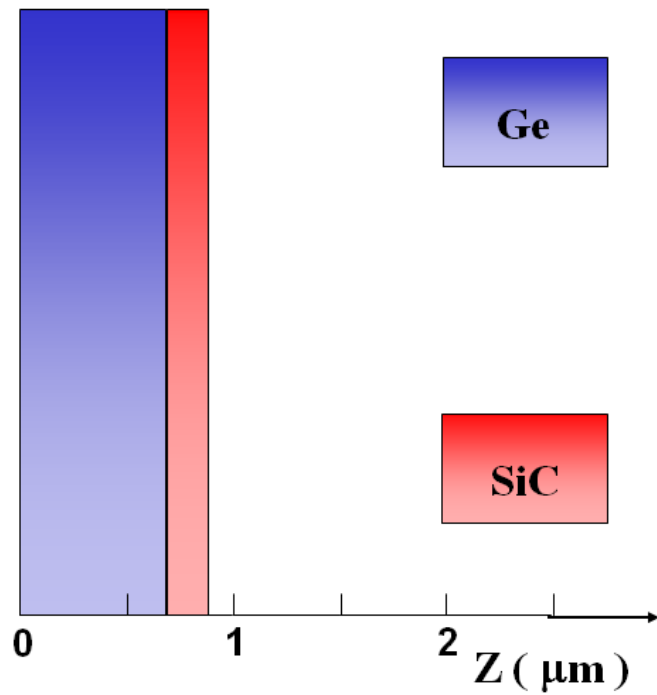
Vers des systèmes TPV haute performance

Source
 $T_s = 2000\text{ K}$

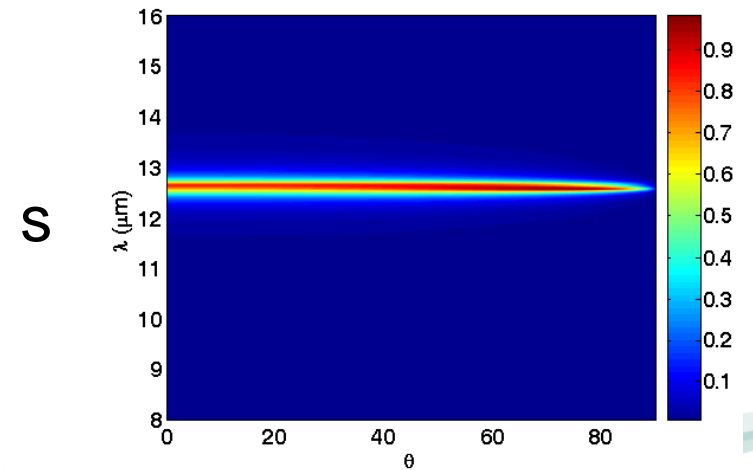
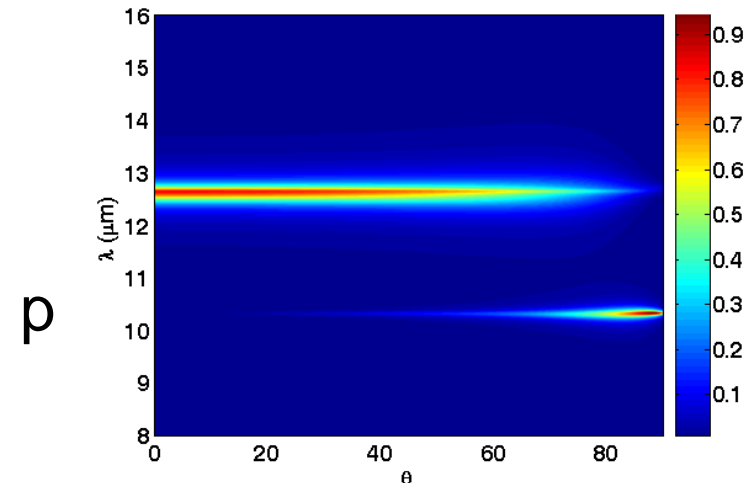
Détecteur
 $T_d = 300\text{ K}$



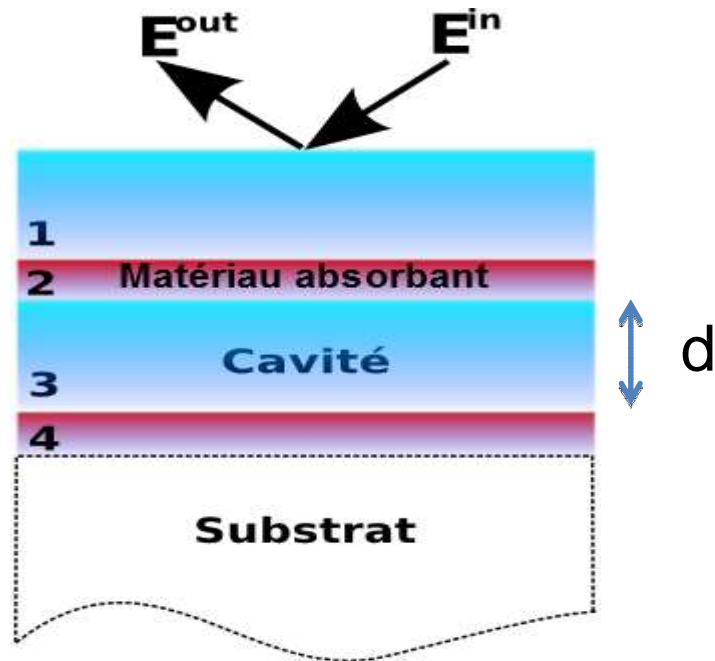
Sources à structure simplifiée



Drevillon et al, JAP (2011).



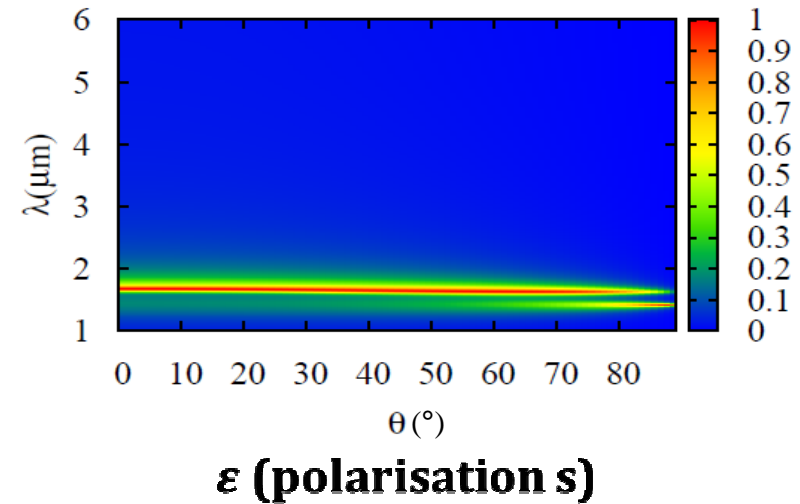
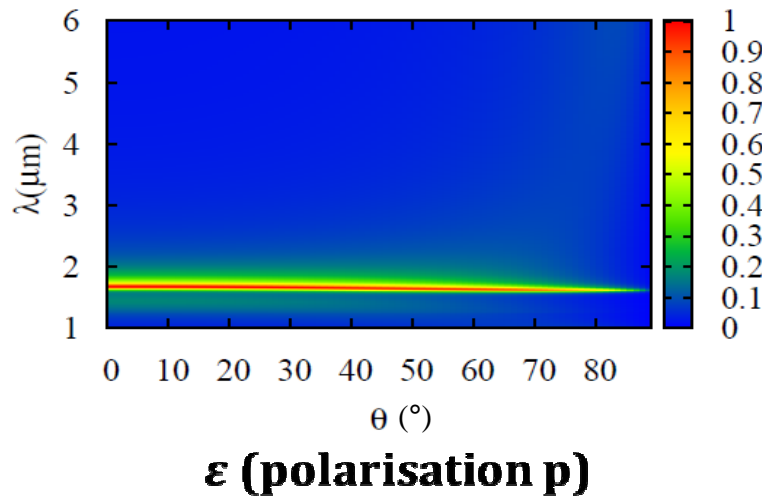
Emetteurs sélectifs à cavité



$$\lambda = \frac{2nd}{m}$$

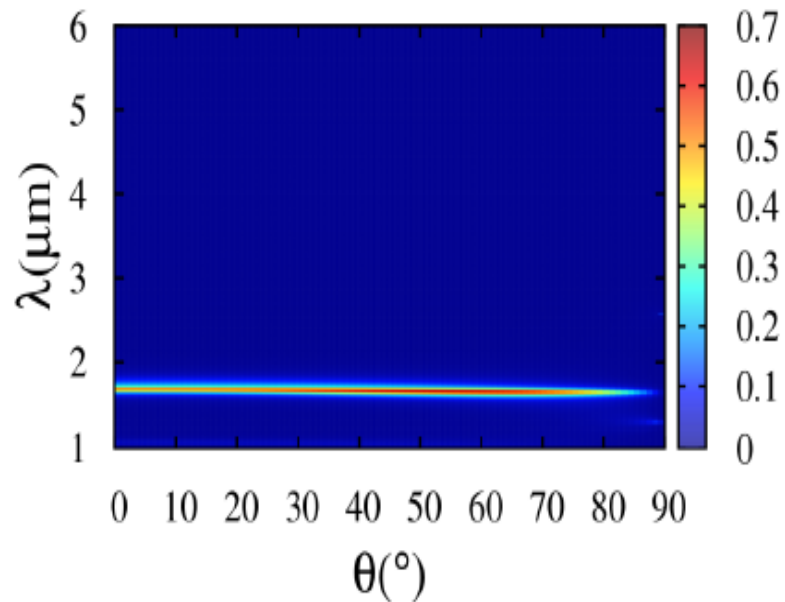
$$m \in \mathbb{N}$$

Emetteurs sélectifs à cavité (quadricouches Si/Au)

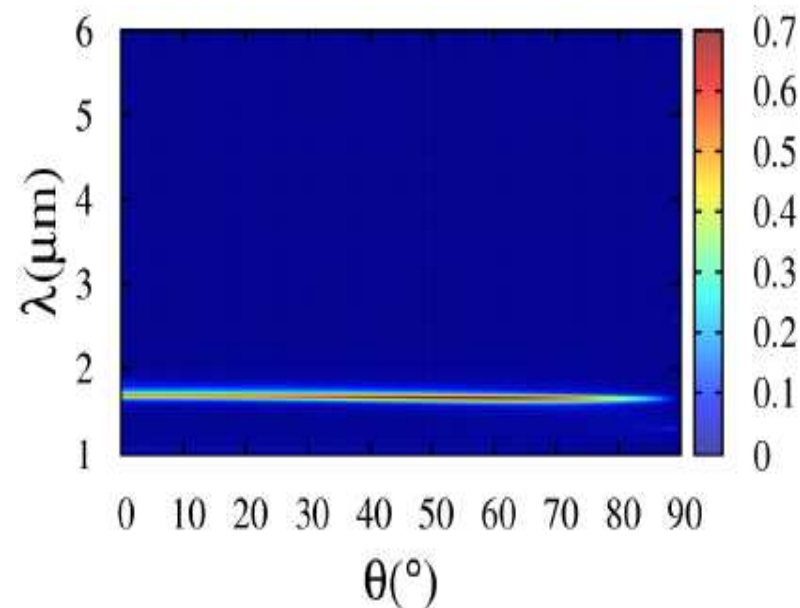


(Nefzaoui et al., JAP [2012])

Emetteurs sélectifs (Si/Si dopé)



(a) Émissivité en polarisation p .



(b) Émissivité en polarisation s .

(Nefzaoui et al., JAP [2012])

Conclusion

- Les fluctuations thermiques sont reliées au pertes dans le milieu
- Le rayonnement thermique est le résultats du rayonnement d'antennes élémentaires thermiques
- Contrôle du rayonnement : contrôle du rayonnement d'antennes en jouant sur leur propriétés => contrôle du rayonnement des fluctuations.

Rappel Mécanique quantique

- Etat du système décrit par une fonction d'onde
- Quantité physique décrites par des opérateurs (matrice).
- Résultats des mesures sont les valeurs propres des opérateurs.

Rappels mécanique quantique

- Les vecteurs propres de H_0 forment une base.