ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Exercices de Physique du Solide — Prof. H. Brune

Série No. 5 — **18 Mars 2025**

But de cette série : comprehension du modèle de Debye

1. Distribution de Planck ou de Bose-Einstein

La distribution de Planck ou de Bose-Einstein donne le nombre moyen de phonons dans le mode défini par $\mathbf{k}, s$:

$$\langle n_{\mathbf{k},s} \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_s(\mathbf{k})}{\mathrm{k}_B T}\right) - 1} \tag{1}$$

(a) Déterminer le comportement de la fonction $\langle n_{\mathbf{k},s} \rangle + \frac{1}{2}$ à haute température.

Indications :
- définir $x = \dfrac{\hbar\omega_s}{\mathrm{k}_B T}$; à haute température $x \ll 1$;
- faire un développement limité et montrer que $\langle n(x) \rangle \approx \dfrac{1}{x} \dfrac{1}{(1 + \frac{1}{2}x + \frac{1}{6}x^2 + \cdots)}$
- faire un développement limité de la fonction $f(x) = \dfrac{1}{(1 + \frac{1}{2}x + \frac{1}{6}x^2)}$

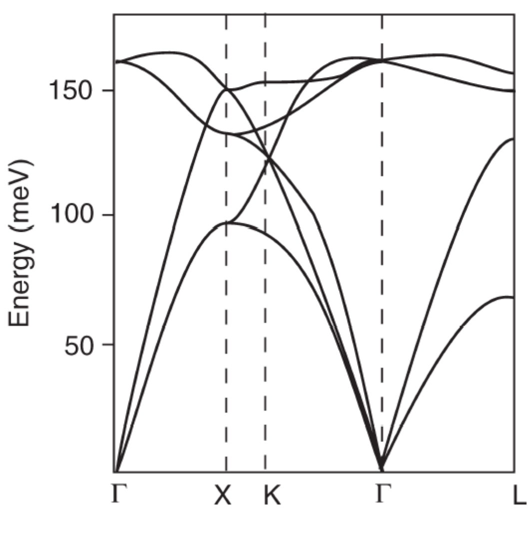
pour trouver que $\langle n(x) \rangle \approx \dfrac{1}{x} - \dfrac{1}{2} + \dfrac{x}{12}$

(b) En calculant quelques valeurs point par point ou à l'aide d'un logiciel, dessiner $\langle n_{\mathbf{k},s} \rangle + \frac{1}{2}$ (expression exacte donnée par l'eq. 1) en fonction de $y = \dfrac{\mathrm{k}_B T}{\hbar\omega_s}$.

2. Nombre d'occupation moyen, nombre de phonons

Nous avons vu au cours que $\langle n_{\mathbf{k},s} \rangle$ représente le nombre d'occupation moyen des phonons dans le mode normal $\mathbf{k}, s$:

$$\langle n_{\mathbf{k},s} \rangle = \frac{1}{\exp\left[\hbar\omega_s(\mathbf{k})/\mathrm{k}_B T\right] - 1}$$



(a) A partir des courbes de dispersion pour le diamant montrées à la figure ci-contre, estimer le nombre d'occupation $\langle n \rangle$ pour tous les modes au point L, à 300 K, à 1000 K et à 3000 K. ($\mathrm{k}_B \approx 0.08617$ meV K^{-1}).

(b) Comment ces résultats expliquent qualitativement les valeurs de la chaleur spécifique du diamant en fonction de la température ? (voir pdf sur Moodle)

3. Vecteur d'onde de Debye

On considère successivement les réseaux suivants : un réseau unidimensionnel de maille a, un réseau bidimensionnel carré de côté a et un réseau cubique d'arête a. Chaque système est composé de N mailles primitives.

(a) Considérer le réseau 1D. Utiliser les conditions aux bords périodiques et trouver les valeurs de k permises pour des modes normaux de vibration. Combien de valeurs k y a-t-il dans une maille primitive du réseau réciproque ?

(b) Les réseaux ont une base mono-atomique. Donner les expressions du vecteur d'onde de Debye k_D pour les trois réseaux.

(c) Dans le cas des réseaux 1D et 2D, représenter la 1ère zone de Brillouin ainsi que l'ensemble des vecteurs k pris en compte dans le modèle de Debye.

(d) Considérer le système 2D avec maintenant une base di-atomique. Combien de mailles primitives et combien d'atomes y a-t-il ? Trouver l'expression de k_D, en sachant qu'on décrit toutes les branches dans ce modèle. Faire une représentation graphique analogue à celle du point (c).

4. Expression de c_v dans le modèle de Debye

Au cours nous avons trouvé l'expression pour la chaleur spécifique dans le modèle de Debye :

$$c_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{3\hbar c}{2\pi^2} \int_0^{k_D} \frac{k^3 dk}{\exp\left(\hbar c k / \mathrm{k}_B T\right) - 1}$$

En faisant le changement de variable $x = \dfrac{\hbar c k}{\mathrm{k}_B T}$ et en définissant la température de Debye θ_D telle que $\mathrm{k}_B \theta_D = \hbar c k_D$, montrer que

$$c_v = 9 n k_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{\left(e^x - 1\right)^2} dx$$

où n est la densité atomique.