

# ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

---

Série No. 6

25 Mars 2025

---

*But de cette série : comprendre le concept de densité de modes*

## 1. Densité de modes normaux $g(\omega)$ à 1D

Considérer la relation de dispersion d'une chaîne unidimensionnelle, formée par  $N$  atomes de masse  $m$  distants de  $a$  (réseau monoatomique), avec  $C$  la constante de rappel entre premiers voisins :

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$

Dans l'approximation de Debye la relation de dispersion devient :

$$\omega = c|k|$$

avec  $c$  un paramètre qui permet de décrire au mieux l'ensemble de la relation de dispersion et que ne correspond pas nécessairement à la pente à l'origine.

- Faire un raisonnement basé sur les représentations graphiques de  $\omega(k)$  pour trouver l'allure qualitative de la densité de modes  $g(\omega)$  dans les deux descriptions.
- Trouver l'expression pour  $g(\omega)$  dans le cas du modèle de Debye et dans le cas de la relation de dispersion exacte. (Les deux expressions sont données au début de l'exercice 2).

*Indications* : plusieurs façons de procéder sont possibles :

- utiliser une des relations données au cours ;
- faire un raisonnement basé sur la relation entre densité de modes dans l'espace des  $k$  et densité de modes dans l'espace des  $\omega$ .

## 2. Chaleur spécifique d'un réseau monoatomique unidimensionnel

Nous avons trouvé à l'exercice 1 que la densité de modes  $g(\omega)$  pour un réseau monoatomique unidimensionnel ( $N$  atomes de masse  $m$  distants de  $a$ , constante de rappel  $C$ , interaction limitée aux premiers voisins) est donnée par

$$g(\omega) = \frac{2}{\pi a \sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}} = \frac{2n}{\pi \sqrt{\omega_{max}^2 - \omega^2}}$$

où  $\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{C}{m}}$  est la fréquence maximale dans la relation de dispersion et  $n = N/(Na) = 1/a$  est la densité atomique.

Dans l'approximation de Debye,  $\omega = c|k|$  ; pour la densité de modes on a trouvé

$$g(\omega) = \frac{1}{\pi c} = \frac{1}{a\omega_D} = \frac{n}{\omega_D}$$

où  $\omega_D = ck_D$  et  $n = 1/a$  est la densité atomique.

- Considérer le cas du modèle de Debye. Ecrire l'expression de la densité d'énergie interne  $u$  en fonction de la densité de modes. Ensuite, trouver la chaleur spécifique  $c_v$  pour les limites à haute température ( $k_B T \gg \hbar\omega_D$ ) et à basse température ( $k_B T \ll \hbar\omega_D$ ).

*Indication* : lors du calcul de  $c_v$ , procéder à la dérivation par rapport à  $T$  après avoir choisi la limite de température haute ou basse.

$$\int \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 - x^2}} dx = \arcsin\left(\frac{x}{\alpha}\right) ; \quad \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}} \approx 1 + \frac{1}{2}x^2 \quad (x \ll 1)$$

$$\int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6} ; \quad \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}$$

- (b) Considérer maintenant la description exacte. Ecrire l'expression de  $u$  et trouver la chaleur spécifique  $c_v$  pour les limites à haute température ( $k_B T \gg \hbar\omega_{max}$ ) et à basse température ( $k_B T \ll \hbar\omega_D$ ).

*Indication* : dans ce cas aussi, procéder à la dérivation par rapport à  $T$  après avoir choisi la limite de température haute ou basse.

- (c) Comparer les résultats trouvés aux points (a) et (b).

### 3. Densité de modes $g(\omega)$ d'un système bidimensionnel

Dans la série 4 nous avons considéré les modes de vibrations d'un système monoatomique bidimensionnel, où nous avons considéré seulement une branche (modes hors plan).

Nous avons vu que dans la direction  $[1, 0]$ ,  $k_y = 0$ ,  $k = k_x$ , et

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right|$$

et dans la direction  $[1, 1]$ , avec  $k_x = k_y = k/\sqrt{2}$  :

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{2C}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2\sqrt{2}} \right|$$

avec  $m$  la masse des atomes,  $a$  le paramètre de maille égal à la distance entre atomes, et  $C$  la constante de rappel entre premiers voisins.

La figure à la page suivante montre les courbes de dispersion dans deux directions à haute symétrie dans la première zone de Brillouin (à gauche) (équivalentes au résultat de l'exercice de la série 4), et des courbes d'isofréquence (à droite).

- (a) Comprendre la signification des courbes d'isofréquence, et interpréter leur forme dans la 1ère zone de Brillouin. Quels types de points sont les points  $\Gamma$ ,  $A$  et  $B$  (minima, maxima, ou autre) ? Que signifie la forme circulaire des courbes à proximité de  $\Gamma$  et  $B$  ?
- (b) La densité de modes pour un système tridimensionnel est donnée par :

$$g(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_s \int_{\text{surface } \omega_s(\mathbf{k})=\text{cte}} \frac{dS_\omega}{|\nabla \omega_s(\mathbf{k})|}$$

Ecrire l'expression équivalente pour le cas d'un système bidimensionnel.

- (c) Sans faire de calculs : en considérant la relation de dispersion, les courbes isofréquence, et l'expression de  $g(\omega)$ , pour quelles valeurs de  $\omega$  peut-on s'attendre à des points singuliers dans  $g(\omega)$  ? Que se passe-t-il pour  $\omega(\pi/a, 0)$  ? Et pour  $\omega(\pi/a, \pi/a)$  ?

