

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 ω .

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 Γ , A et B (minima, maxima, ou autre) ? Que signifie la forme circulaire des courbes à proximité de Γ et B ?
- (b) La densité de modes pour un système tridimensionnel est donnée par :

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

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 ω peut-on s'attendre à des points singuliers dans $g(\omega)$? Que se passe-t-il pour $\omega(\pi/a, 0)$? Et pour $\omega(\pi/a, \pi/a)$?

