



UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

TD1

Bernard Doudin

Transcrit par
PIERRE GUICHARD

L3 Semestre 6 2021

1.1 Chaîne d'atomes mono-atomiques, calcul des densités de modes et d'états

Une déformation élastique d'une chaîne faite d'atomes séparés par une distance a peut s'écrire sous la forme d'une onde de vecteur d'onde k . Nous supposons que le système est fait de N atomes, et donc d'une longueur $L = Na$, sur laquelle nous imposons des conditions périodiques.

- a) Montrer que la périodicité des atomes implique une périodicité en k ; calculer la périodicité. k peut-il être négatif? Si oui, quelle est l'interprétation physique. On spécifiera les limites k_{\min} , k_{\max} des valeurs "pertinentes" (non équivalentes par translation) de k .

Soit u la fonction représentant la variation par rapport à l'équilibre,

$$u(x) = A \exp(i\omega t - ikx)$$

où $x = na$ une variable discrète puisque $n \in \mathbb{Z}$.

Une invariance par translation a se traduit alors par

$$u(x) = u(x + a)$$

Et donc,

$$\frac{u(x + a)}{u(x)} = \frac{A \exp(i\omega t - ik(x + a))}{A \exp(i\omega t - ikx)} = \exp(-ika) = 1$$

Ce qui impose une condition sur k ,

$$ka = 2\pi m$$

où $m \in \mathbb{Z}$, alors

$$k = m \frac{2\pi}{a}$$

Et alors, on remarque que k a des valeurs discrètes.

k est lui aussi invariant par translation, mais cette fois ci une translation $2\pi/a$, alors on dit que k appartient à l'espace réciproque (qui est un analogue de l'espace de Fourier). La dimension de k est l'inverse d'une distance.

Cette invariance par translation définit k dans une fenêtre $[0, 2\pi/a]$, mais plus communément, on définit k dans la zone de Brillouin qui est l'intervalle $[-\pi/a, \pi/a]$.

- b) Déterminer quelles sont les valeurs "possibles" de k , et montrer que le nombre total de ces valeurs est N dans l'intervalle k_{\min} , k_{\max} .

Par les conditions périodiques du cristal,

$$u(x = 0) = u(x + L)$$

Alors,

$$\exp(ikL) = 1$$

Et alors,

$$k = \frac{2\pi}{L}m'$$

où $m' \in \mathbb{Z}$.

Remarque :

- pour $m < 0$ et $k < 0$ on obtient une onde qui se propage selon $-x$ on parle alors d'onde *rétrograde*.
- pour $m > 0$ et $k > 0$ on obtient une onde qui se propage selon x on parle alors d'onde *progressive*.

Le nombre de valeurs possible de la zone de Brillouin (abrégée BZ) c'est alors,

$$\frac{\text{étendue de l'intervalle}}{\Delta k} = \frac{2\pi/a}{2\pi/L} = \frac{L}{a} = N$$

Et en général, N est proportionnelle à $\sqrt[3]{\mathcal{N}_A}$, où \mathcal{N}_A est le nombre d'Avogadro, et c'est une racine troisième car nous sommes en 1D ici.

A un vecteur d'onde k , on associe un oscillateur harmonique quantique, d'énergies $E_n = \hbar\omega(k)(n + 1/2)$. (remarquez que le nombre d'états par vecteur d'onde est 3, si l'on autorise les atomes à se déplacer dans les trois directions de l'espace).

- c) exprimer l'énergie moyenne E_k pour un vecteur d'onde k donné, qui peut s'exprimer comme un nombre de particules (phonons) à cette énergie, à température T .

On sait que

$$\langle E_k \rangle = \hbar\omega \left[n_B(\beta\hbar\omega + \frac{1}{2}) \right]$$

où n_B , le taux d'occupation de Bose,

$$n_B = \frac{1}{\exp(x) - 1}$$

Remarque : Pour montré cela on démarre avec la fonction de partition Z_{1D} a une dimension,

$$Z_{1D} = \sum_{n>0} \exp(-\beta \hbar \omega (n + 1/2))$$

On connaît aussi le développement,

$$\sum_{n \geq 0} x^{Sn} = \frac{1}{1 - x^S}$$

Et la valeur moyenne de l'énergie $\langle E \rangle$,

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}$$

- d) calculer l'énergie élastique totale du système, sous forme de somme, puis d'une généralisation à une intégrale, d'abord sur un incrément dk , puis sur un incrément $d\omega$ en supposant un modèle de Debye. Introduisez la densité d'état $g(\omega)$, définie par le nombre d'états d'énergies entre $\hbar\omega$ et $\hbar(\omega + d\omega)$ et donner son expression.

On sait que dans notre système, chaque particules à 3 degrés de libertés (induit par le fait que l'on soit en $3D$, alors

$$U = 3 \sum_{k \text{ possible}}^N \langle E_k \rangle$$

Alors en réutilisant la forme précédente pour $\langle E_k \rangle$,

$$\begin{aligned} U &= 3 \sum_k \hbar \omega(k) \left[n_B(\beta \hbar \omega(k)) + \frac{1}{2} \right] \\ &= \frac{3L}{2\pi} \int dk \hbar \omega(k) \left[n_B(\beta \hbar \omega(k)) + \frac{1}{2} \right] \end{aligned}$$

Remarque : On a utilisé,

$$\sum k = \frac{1}{\Delta k} \int dk = \frac{L}{2\pi} \int dk$$

Ici se décline alors deux situations,

- Dans le modèle de Einstein, ω est indépendant de k , alors

$$U = 3N \langle E \rangle$$

1.2 Fluctuations thermiques de l'oscillateur harmonique

Soit un oscillateur harmonique 1D avec des niveaux d'énergie

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

avec $n \in \mathbb{N}$.

Si l'oscillateur est en équilibre thermodynamique avec un bain à une température T , la probabilité d'occupation du niveau n est :

$$p_n = \frac{\exp(-\beta E_n)}{Z}$$

où $\beta = k_B T$ et le terme normalisant $Z = \sum_n \exp(-\beta E_n)$ est la fonction de partition.

a) En cours, nous avons vu que l'énergie moyenne peut s'écrire à partir de la fonction de partition comme

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}$$

Montrer que

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$$

On sait que,

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \sum_n E_n^2 p_n \\ &= \sum_n E_n^2 \frac{\exp(-\beta E_n)}{Z} \end{aligned}$$

Et,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} &= \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\sum_n \exp(-\beta E_n) \right) \\ &= \sum_n \left[\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \exp(-\beta E_n) \right] \\ &= \sum_n E_n^2 \exp(-\beta E_n) \\ &= Z \langle E^2 \rangle \end{aligned}$$

D'où,

$$\boxed{\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}}$$

b) En cours nous avons vu que :

$$Z = \frac{\exp(-\beta\hbar\omega/2)}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega)}$$

Trouver une expression approximative de $\langle E \rangle$ et sa fluctuation thermique $\sigma_E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}$ dans la limite des hautes températures.

Limite haute température veut dire que T tend vers $+\infty$, alors β tend vers 0,

$$Z = \frac{1}{2 \sinh(\beta\hbar\omega/2)}$$

On sait quand x tend vers 0, $\sinh(x)$ tend vers x , alors

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} Z = \frac{1}{\beta\hbar\omega}$$

Calculons $\langle E \rangle$,

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \\ &= \beta\hbar\omega \left(\frac{1}{\beta^2\hbar\omega} \right) \\ &= \frac{1}{\beta} \end{aligned}$$

Calculons $\langle E^2 \rangle$,

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \\ &= \beta\hbar\omega \left(\frac{2}{\beta^3\hbar\omega} \right) \\ &= \frac{2}{\beta^2} \end{aligned}$$

Alors,

$$\boxed{\langle E \rangle = \frac{1}{\beta}}$$

$$\boxed{\langle E^2 \rangle = \frac{2}{\beta^2}}$$

D'où,

$$\begin{aligned} \sigma_E &= \sqrt{\frac{2}{\beta^2} - \frac{1}{\beta^2}} \\ &= \frac{1}{\beta} \\ &= k_B T \end{aligned}$$

D'où,

$$\sigma_E = k_B T$$

- c) Généralisation à N oscillateurs : si nous avons N oscillateurs indépendants, la fonction de partition s'écrit $Z_N(\beta) = [Z_1(\beta)]^N$ où $Z_1(\beta)$ est la fonction de partition d'un oscillateur unique.

Montrer que l'énergie moyenne de N oscillateurs indépendants $\langle E_N \rangle$ peut s'exprimer comme $N\langle E_1 \rangle$ et que ses fluctuations vérifient : $\sigma_{E_N} = \sqrt{N}\sigma_{E_1}$.

Expliquez pourquoi nous ne discutons que la valeur de l'énergie moyenne, soit que nous négligeons les fluctuations, pour expliquer les propriétés de solides de tailles macroscopiques, fait d'un grand nombre d'oscillateurs avec $N \propto 10^{20}$ ou plus.

On sait qu'on peut écrire $\langle E_N \rangle$ l'énergie moyenne de N oscillateurs indépendants comme,

$$\begin{aligned} \langle E_N \rangle &= -\frac{1}{Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} \\ &= -\frac{1}{Z_1^N} \frac{\partial Z_1^N}{\partial \beta} \end{aligned}$$

Car on peut factorisé Z_N comme Z_1^N .

$$\begin{aligned} \langle E_N \rangle &= -(\beta \hbar \omega)^N \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{\beta \hbar \omega} \right)^N \\ &= (\beta \hbar \omega)^N \frac{N}{\beta^{N+1} \hbar^N \omega^N} \\ &= N \frac{1}{\beta} \\ &= N \langle E_1 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle E_N^2 \rangle &= \frac{1}{Z_1^N} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} (Z_1^N) \\ &= \frac{1}{Z_1^N} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(N \frac{\partial Z_1}{\partial \beta} Z_1^{N-1} \right) \\ &= \frac{1}{Z_1^N} N \left(\frac{\partial^2 Z_1}{\partial \beta^2} + \frac{\partial Z_1}{\partial \beta} (N-1) \frac{\partial Z_1}{\partial \beta} Z_1^{N-2} \right) \\ &= \left(\frac{1}{Z_1} \frac{\partial^2 Z_1}{\partial \beta^2} \right) N + N(N-1) \left(\frac{1}{Z_1} \frac{\partial Z_1}{\partial \beta} \right)^2 \\ &= N \langle E_1^2 \rangle + N(N-1) \langle E_1 \rangle^2 \end{aligned}$$

Alors,

$$\langle E_N \rangle = N \langle E_1 \rangle$$

$$\langle E_N^2 \rangle = N \langle E_1^2 \rangle + N(N-1) \langle E_1 \rangle^2$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}\sigma_N &= \sqrt{N(N-1)\langle E_1 \rangle^2 + N\langle E_1^2 \rangle - N^2\langle E_1 \rangle^2} \\ &= \sqrt{N}\sigma_{E_1}\end{aligned}$$

D'où

$$\sigma_N = \sqrt{N}k_B T$$