Licence de Physique et Mécanique – S6 Université Paris-Sud XI
Année 2013-2014

# Exercices de Physique Statistique – Chapitre 7

Statistique des modes de vibrations

## Chaleur spécifique des solides

L'objectif de ce TD est d'interpréter les observations expérimentales de la figure 1 qui montrent la chaleur spécifique $C_V(T)$ de solides en fonction de la température. On va considérer les solides comme un agencement périodique d'atomes (cristal) mais tel que ceux-ci puissent effectuer de petits déplacements autour de leur position d'équilibre. On ne décrira que la contribution due à la vibration des atomes, sachant qu'il peut y avoir d'autres degrés de liberté qui peuvent contribuer à stocker de l'énergie (électrons de valence ou impuretés par exemple). On se placera dans le cas d'un système en contact avec un thermostat de température $T$.

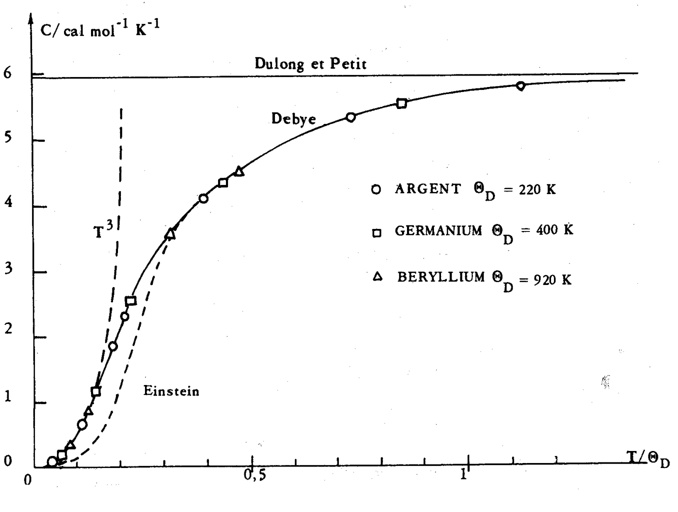


FIGURE 1: Comportement expérimental de la chaleur spécifique des solides.

## Oscillateur harmonique

Comme nous allons étudier la statistique de vibrations, on va commencer par refaire les calculs du cours sur un oscillateur harmonique à une dimension. On rappelle que les énergies quantiques sont dans ce cas

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \text{avec } n = 0, 1, 2, \dots \text{ un entier,} \tag{1}$$

$\omega$ la pulsation de l'oscillateur et $\hbar$ la constante de Planck réduite. Il y a un état par niveau d'énergie.

1. Exprimer puis calculer la fonction de partition de cet oscillateur.
2. En déduire l'expression de l'énergie moyenne. Montrer qu'elle peut se mettre sous la forme $\varepsilon_n = \hbar\omega\left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right)$. Interpréter physiquement $\langle n\rangle$.
3. Discuter les comportements haute et basse température. On pourra introduire une température caractéristique $\Theta$ que l'on exprimera en fonction des données.
4. Pouvait-on retrouver rapidement la limite haute température par un calcul classique ?
5. Donner la formule de la chaleur spécifique en fonction de la température.

## Modèle d'Einstein

Dans ce modèle, on considère que les $N$ atomes constituant le solide sont indépendants les uns des autres et peuvent vibrer autour de leur position d'équilibre selon les trois directions de l'espace à la même pulsation que l'on notera $\omega_0$.

6. Justifier que la fonction de partition des atomes se met sous la forme $Z = z^{3N}$ et donner $z$.
7. En déduire l'énergie moyenne puis la chaleur spécifique.
8. Discuter les comportements haute (loi de Dulong et Petit) et basse température. Comparer à la figure 1.

## Modèle de Debye

Pour décrire correctement le comportement à basse température, on ne doit pas considérer les atomes comme indépendants mais couplés les uns aux autres. Pour les petits déplacements, cela revient à considérer un ensemble d'atomes reliés par des ressorts. La résolution de ce problème d'oscillateurs couplés montre qu'il existe $3N$ modes de vibration *collectifs* et *indépendants entre eux*. Ces modes sonores ont trois états de "polarisation" (2 modes de cisaillement qui sont transverses et 1 mode de compression qui est longitudinal) ainsi qu'une relation de dispersion, qui peut être approximée à basse énergie $\hbar\omega(\vec{k})$ par

$$\omega(\vec{k}) = c_s\|\vec{k}\| \,, \tag{2}$$

avec $c_s$ la vitesse du son. Dans un solide carré de côté $L$, les vecteurs d'ondes sont quantifiés (comme pour une corde vibrante) et donnés par

$$\vec{k} = \frac{\pi}{L}(m_x, m_y, m_z) \quad \text{avec les entiers} \quad 1 \leq m_{x,y,z} \leq \tilde{N} \,, \tag{3}$$

avec $\tilde{N}$ le nombre d'atomes sur une arête, $\tilde{N} = N^{1/3}$ et $L = \tilde{N}a$ avec $a$ la distance entre atomes.

9. Faire un schéma de l'espace des $\vec{k}$. Quel est le volume élémentaire occupé par un mode $\vec{k}$ dans l'espace des $\vec{k}$ ?
10. La densité spectrale de modes $\rho(\omega)$ est telle que le nombre de modes ayant une pulsation $\omega$ à $d\omega$ vaut $\rho(\omega)d\omega$. Montrer que
$$\rho(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2 c_s^3}\omega^2 \ .$$
11. On appelle pulsation de Debye $\omega_D$, la pulsation telle que
$$\int_0^{\omega_D} d\omega\rho(\omega) = 3N \ . \tag{4}$$
Qu'exprime la relation ci-dessus ? Calculer $\omega_D$ en fonction des données puis interpréter physiquement le résultat.
12. Exprimer la fonction de partition de l'ensemble des $3N$ modes d'oscillation sous forme d'un produit $Z = \prod_i z_i$ en précisant la signification de l'indice $i$ et la forme des $z_i$
13. Donner l'énergie moyenne d'abord sous la forme d'une somme discrète sur les $i$ puis sous forme d'une intégrale sur $\omega$.
14. Faire de même pour la chaleur spécifique.
15. Étudier la limite haute température et comparer aux résultats des parties précédentes. On pourra introduire la température caractéristique $\Theta_D$ associée à $\omega_D$.
16. Montrer que le comportement à basse température est maintenant de la forme $C_V(T) = AT^3$ et comparer aux observations de la figure 1.

## Formulaire

- $\displaystyle\int_0^{\infty} dx \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} = \frac{4\pi^4}{15}$