

5 Chaleur spécifique d'un cristal ionique

On considère un réseau linéaire de paramètre $2a$, de longueur L , constitué d'une rangée de N paires d'ions ($L = 2Na$). Pour simplifier le calcul des chaleurs spécifiques, on schématise les deux relations de dispersion $\omega(K)$ de la figure 1 (voir corrigé PC 4), de la façon suivante :

- On assimile la relation de dispersion des phonons acoustiques au modèle de Debye, soit $\omega = \nu_s K$. On définit la pulsation de Debye ω_D comme la pulsation maximum des modes acoustiques lorsque la relation de dispersion est supposée linéaire. Dans le cas présent (1D), elle est donc la pulsation des modes ayant le vecteur d'onde sur le bord de la Zone de Brillouin.
 - On assimile la dispersion des phonons optiques au modèle d'Einstein, soit $\omega(K) = \omega_E$.
1. Déterminer, en utilisant les conditions cycliques de Born Von Karman, le nombre d'oscillateurs ayant une pulsation comprise entre ω et $\omega + d\omega$.
 2. On considère les vibrations de la branche optique. Déterminer l'énergie moyenne d'un oscillateur. A cette fin, on prendra comme énergie de référence (c'est-à-dire égale à zéro) l'énergie de l'état fondamental. En déduire l'énergie interne correspondante et la valeur de la chaleur spécifique dans les cas limites de basse et haute température.
 3. On considère les vibrations de la branche acoustique. Déterminer l'énergie interne et la valeur de la chaleur spécifique dans les cas limite basse et haute température.
 4. En déduire la chaleur spécifique globale à haute et basse température.
 5. Application numérique : calculer les températures de Debye θ_D et d'Einstein θ_E et donner la contribution respective (par paire d'ions) des phonons optiques et acoustiques à 20 K, avec $a = 0,28$ nm, $\nu_E = 9,510^{12}$ Hz et $\nu_s = 8800$ m · s⁻¹.

On rappelle que :

$$\int_0^\infty \frac{x}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^2}{6}$$
$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$
$$k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$$