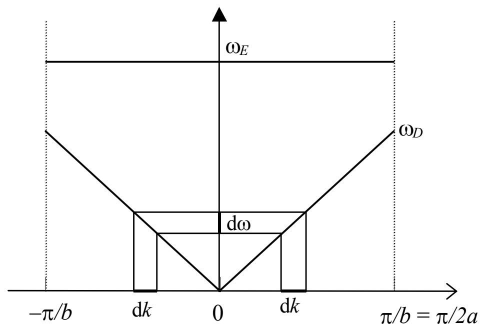
CPC 5 : Chaleur spécifique d'un réseau



1. Les conditions aux limites de BVK imposent : $e^{iK(x+L)} = e^{iKL}$, et conduisent donc à une discrétisation dans l'espace des vecteurs d'ondes : $K = n\dfrac{2\pi}{L}$ où n est un entier relatif. Dans la première zone de Brillouin, il y a donc N modes avec $L = N\,b$ ($b = 2\,a$). N représente aussi le nombre de mailles (nombre de paires d'atomes) dans le cristal.

   Le nombre d'oscillateurs ayant une pulsation comprise entre ω et ω + dω est donnée par

$$\frac{2dK}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{2\,\frac{dK}{d\omega}}{\frac{2\pi}{L}}d\omega = g(\omega)d\omega$$

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi}\frac{dK}{d\omega}$$

   Pour la branche acoustique

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi v_S} = \frac{N}{\omega_D} \text{ pour } \omega \in [0\,;\,\omega_D]$$

   avec $\omega_D = v_S\,\dfrac{\pi}{b}$ de telle façon que $\displaystyle\int_0^{\omega_D} g(\omega)d\omega = N$

   Pour la branche optique

$$g(\omega) = N\,\delta(\omega - \omega_E)$$

Pour le calcul de la chaleur spécifique du réseau, nous allons adopter la méthode suivante. D'après le cours, on associe pour un mode de vibration de pulsation $\omega(K)$, une particule appelée phonon d'énergie $\hbar\omega$. Un phonon est alors un boson de spin $S = 0$.

A l'équilibre à une température donnée, le nombre moyen de phonons ayant l'énergie $\hbar\omega$ est donnée par la statistique de B.E. en nombre indéterminé (Physique I) :

$$\overline{N}(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

L'énergie totale des phonons est alors donnée par

$$E(T) = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \hbar\omega\, g(\omega)\, d\omega \quad (1)$$

où la quantité $\hbar\omega\, g(\omega)\, d\omega$ est l'énergie des phonons ayant une énergie comprise entre $\hbar\omega$ et $\hbar\,(\omega + d\omega)$.

La chaleur spécifique est alors donnée par

$$C_V(T) = \frac{\partial E}{\partial T}$$

2. On s'intéresse ici à la contribution de la branche optique. L'énergie correspondante est égale à

$$E_O(T) = \frac{N\hbar\omega_E}{e^{\beta\hbar\omega_E} - 1}$$

$$C_{VO}(T) = N k_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{\beta\hbar\omega_E}}{\left(e^{\beta\hbar\omega_E} - 1\right)^2}$$

On définit alors la température caractéristique

$$\theta_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B}$$

Si $T >> \theta_E$ on vérifie que la chaleur spécifique tend vers une constante

$$C_{VO}(T) \approx N k_B$$

Si $T << \theta_E$ on vérifie que la chaleur spécifique s'annule

$$C_{VO}(T) = N k_B \left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 e^{-\frac{\theta_E}{T}}$$

La figure ci-dessous montre la courbe complète de $C_{VO}(T)$.

3. On s'intéresse ici à la contribution de la branche acoustique. L'énergie correspondante est égale à

$$E_A(T) = \frac{N}{\omega_D} \int_0^{\omega_D} \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \hbar\omega\, d\omega$$

$$E_A(T) = N \frac{(k_B T)^2}{\hbar\omega_D} \int_0^{x_D} \frac{1}{e^x - 1} x\, dx$$

On définit alors la température caractéristique

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$$

Si $T >> \theta_D$ on vérifie que la chaleur spécifique tend vers une constante

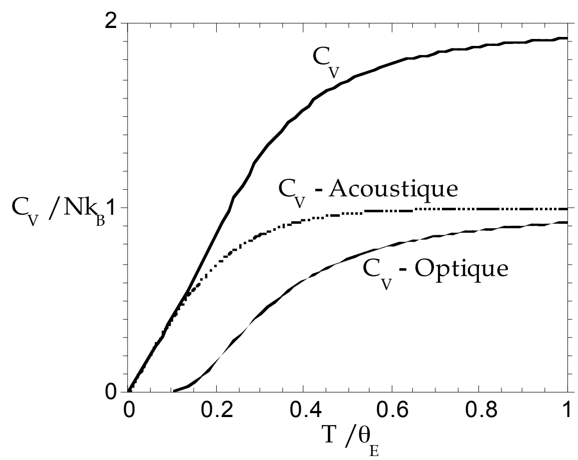
$$\int_0^{x_D} \frac{x}{e^x - 1} dx \to x_D \qquad \Rightarrow \qquad E_A(T) \approx N k_B T$$

$$C_{VA}(T) \approx N\, k_B$$

Si $T << \theta_D$ on vérifie que la chaleur spécifique tend vers zéro

$$E_A(T) \approx N \frac{(k_B T)^2}{\hbar\omega_D} \int_0^{\infty} \frac{1}{\mathrm{e}^x - 1} x\, dx \approx N \frac{\pi^2}{6} \frac{(k_B T)^2}{\hbar\omega_D}$$

$$C_{VA}(T) \approx N\, k_B \frac{\pi^2}{3} \frac{T}{\theta_D}$$



4. La courbe ci-dessus montre l'allure complète pour les deux contributions et leur somme.

5. θ_E = 456 K, $\theta_D = \dfrac{h\nu_D}{k_B} = \dfrac{h}{k_B}\dfrac{v_S}{4a} =$ 377 K

   A T = 20 K, $C_{VO} = 6{,}5\ 10^{-8}\ N\, k_{\mathrm{B}}$ et $C_{VA} = 0{,}18\ N\, k_{\mathrm{B}}$. La contribution de la branche optique est négligeable. En effet à T = 20 K, les fréquence de vibrations mise en jeu dans les fluctuations de l'énergie sont inférieures à $\nu(T) = k_{\mathrm{B}}T/h = \mathrm{T}/\theta_D\ \nu_D \sim 0{,}06\ \nu_D$ qui ne sont accessibles que par les phonons acoustiques.

   A très haute température, la chaleur spécifique tend vers $2\ N\, k_B$ soit k_B par atome.