Centre universitaire Ahmed ZABANA Relizane
Institut: SESNV
Département : Physique

Série de TD N°1
physique du solide 2 (PHONON 2)

Exercice 1 : rangée d'atomes du types C=C-C=C- C=C-C=

Soit un réseau linéaire de maille $\ll a \gg$ayant un motif composée de 2 atomes identiques situés sur la ligne et distants à l'équilibre de b $\left(\mathrm{b} < \frac{a}{2}\right)$.on repère la position instantanée des atomes par X_1, X_2 …X_{2n-1}, X_{2n}, X_{2n+1} ….et leurs écart, le long de la ligne .par rapport à leur position d'équilibre par… U_{2n-2} ; U_{2n-1} ; U_{2n}; U_{2n+1} ; U_{2n+2} ;….

a- en se limitant aux interaction entre un atomes donnée et ses plus proches et ses plus proches voisins , interactions qui sont caractérisées par les constantes de rappel $\beta 1 et\ \beta 2$et qui sont symbolisées sur la figure

b- 1 -établir les équations du mouvement des 2 espèces d'atomes qui constituent le motif. A partir des solutions de la forme :

$$\mathrm{U}_{2\mathrm{n}} = \mathrm{A}\ exp^{i(\omega t - kX2n)} \qquad ; \qquad \mathrm{U}_{2\mathrm{n}} = B\ exp^{i(\omega t - kX2n+1)}$$

1-établir les relations de dispersion des branches acoustiques et longitudinal eseb fonction de $\beta 1, \beta 2$etm (masse d'atome) et a

2- précise la valeur littérale du rapport des amplitudes $\frac{A}{B}$pour chacune de ces branches au centre de la zone de Brillouin, K=0.

C- sachant que la vitesse du son le long de la chaine est telle que Vs=5000m/s (valeur expérimentale) et avec a=5Å

Série de TD N°2
Physique du solide 2

Exercice 1 :

On rappelle la quantification des niveaux de l'oscillateur harmonique :

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

Où n= 0, 1, 2, 3, ….et on appelle phonon un quantum d'énergie $\hbar\omega$ présent dans le système l'excitation thermique des vibrations du solide se traduit donc par une augmentation du nombre de phonon avec la température.

1-déterminer la valeur moyenne $\langle n\rangle$de cet ensemble d'oscillateurs harmoniques et en déduire les variations thermiques de l'énergie interne.

2-déterminer la contribution de ces modes de vibration à la capacité calorifique du cristal.et vérifier qu'è haut température elle correspond bien à ce qui attendu classiquement.

Dans les solides isolants non magnétiques la capacité calorifique mesurée à basse température a une dépendance en loi de puissance de T en général enT^3

3- rappeler pourquoi la capacité calorifique d'origine électronique est négligeable dans tels solides. Montrer que le modèle d'Einstein ne s'applique pas à basse température T.

Exercice 2 :

Soit un réseau constitué de N atomes identiques équidistants de$\ll a \gg$.

qu'elle est la densité des vibrations dans l'espace des K. soit g(K) pour le seul mode longitudinal possible.

En supposant que la relation de dispersion du phonon puisse être décrite par la relation $\omega = v_s|\kappa|$ (vsest la vitesse du son), en déduire la densité des vibration dans l'espace des υpréciser la valeur maximale de la fréquence des vibrations υ_o des atomes.

Donner sous forme d'intégrale définie l'expression de l'énergie interne.

Déduire le comportement de la chaleur spécifique à haut $K_bT \gg h\upsilon_o$ et a basse $K_bT \ll h\upsilon_o$ température.

Série de TD N°3
Physique du solide 2 (PHONON 2)

Exercice 1 :

On considère un segment de longueur L le long duquel les électrons sont susceptibles de se mouvoir librement (v=0). A L'extérieur de ce segment leur énergie potentielle V est infinie ($v=\infty$)pour $x>L$ et $x<L$.

① a) quelle est la forme générale de l'équation de Schrödinger ? Préciser ces solutions dans le cas de condition au limites fixes.

b) représenter l'allure des trois 3 premières fonctions d'ondes.

② a) En déduire la quantification des niveaux d'énergie cinétique autorisés.

b) quelle est l'expression littérale des trois 3 premiers niveaux d'énergie distincts soit E1 , E2, E3 .

③ application au cas de l'atome L= 3Å

a) Valeurs numérique (en ev) pises par E1 , E2 , E3 ?
b) L'atome a 2 électrons (supposés lires ?) quelle énergie minimale doit ont communiqué a l'un de ses électrons pour faire passer de l'état fondamental au premier niveau excité.

④ application au cas d'une molécule L= 15Å.

a) même question qu'en 3) concernant E1, E2, E3, la formule de la molécule pourrait être H2C-CH-CH- H2C dans laquelle le symbole.. Représente l'existence d'électron π suseptiblede se propager librement le long de la molécule.

b) Quelle énergie minimal faut-il communiquer à un de ces électron pour la faire passer de l'état fondamental à l'état excité.

⑤ -Application au cas métal L=3mm.

a) même question qu'en trois concernant E1, E2, E3.

b) la rangée est constitués d'atomes identiques et divalents deux électron libre /atome) équidistants de a=3Å . Combien de niveau d'énergie dans l'état Fondamental

C)-quelle est l'énergie EF du dernier niveau occupé ?

Exercice 2 :

On considère un électron de masse m soumis à une énergie potentielle nulle à l'intérieur d'un parallélépipède rectangle de cotés a, b, c et ayant de ses sommets en 0 et ut autre au point M de cordonnées a, b, c, la fonction potentiel est infinie de la boite rectangulaire.

1)-A quelle équation différentielle obéit la fonction d'onde de la particule ?

2)-on cherche à résoudre cette équation par des solutions à variables séparées du type :

$$\phi(x,y,z) = \phi_X(x).\phi_Y(y).\phi z(z)$$

Montrer que l'équation du 1er se met sous la forme :

$\frac{1}{\phi_X}\frac{\partial\phi_X(x)^2}{\partial x}$+$\frac{1}{\phi_Y}\frac{\partial\phi_Y(y)^2}{\partial y}$+$\frac{1}{\phi z}\frac{\partial\phi z(z)^2}{\partial z}$=$-E\frac{2m}{\hbar^2}$

Et qu'il suffit de résoudre les équations :

$\frac{\partial\phi_X(x)^2}{\partial x}$+$Kx^2\phi_X(x)$=0 ; $\frac{\partial\phi_Y(y)^2}{\partial y}$ $+ Ky^2\phi_Y(y). = 0$;$\frac{\partial\phi z(z)^2}{\partial z}$ $+ Kz^2\phi z(z) = 0$

Avec Kx^2+Ky^2+Kz^2=0

3- intégrer les équation différentielle précédentes.

4- montrer que les conditions aux limites sur les parois de la cavité imposent des solutions du types :

$\phi_X(x)$=Asin$\frac{n_X\pi}{a}x$; $\phi_Y(y)$=Bsin$\frac{ny\pi}{b}y$; $\phi z(z)$=Csin$\frac{nz\pi}{c}z$

Dans lesquelles les nombre quantiques nx ,ny,nz sont des entiers > 0

En déduire l'expression complète de la fonction d'ondes résultante.

5-calculer les valeurs quantifiées de l'énergie totale E en fonction de nx ,ny,nz et des dimensions de la cavité

6- dans l'hypothèse ou la cavité est cubique (a=b=c=L) .

a-Trouver toute les fonctions d'ondes pour les trois 3 premiers niveaux d'énergie distincts .

b- donner l'expression de chaque niveau .

c- exprimer la dégénérescence de chaque niveau.