Physique de la matière condensée – CT JUIN 2022

Question 1 – Energie de cohésion des gaz rares (10 points)

Le potentiel effectif V entre deux atomes de gaz rare de masse m séparés par une distance d peut être représenté par un potentiel de Lennard-Jones :

$$V = 4\varepsilon\left[\frac{\sigma^{12}}{d^{12}} - \frac{\sigma^6}{d^6}\right] \qquad (1)$$

L'énergie cinétique des atomes à basses températures (au voisinage de T=0K) est proche de l'énergie de point zéro de la molécule :

$$E = \frac{\hbar\omega}{2} \qquad (2)$$

où $\omega = \sqrt{\frac{2K}{m}}$ est la fréquence de vibration de la liaison entre les deux atomes et K la constante de force associée à la liaison. Les paramètres du potentiel (1) pour le Xe sont ε=20 meV et σ=0.398 nm. La masse du Xe est m=131,29 uma (1 uma=1,66 10^{-27} kg). L'énergie de liaison à basses températures est la somme de (1) et de (2) <u>à la distance d'équilibre</u>. La constante $\hbar = 1{,}054\ 571\ 818\ \ 10^{-34}$ Js.

a) Calculez l'énergie de point zéro et évaluez <u>l'énergie de la liaison</u> de la molécule Xe_2 à la limite du zéro absolu.

b) <u>Démontrez</u> la formule permettant de calculer <u>l'énergie potentielle</u> à l'équilibre d'un <u>cristal de Xe</u> (réseau de Bravais cubique à faces centrées) et évaluez celle-ci. [S_{12}(FFC)=12.13, S_6(FCC)=14.45, S_{12}(SC)=8.40, S_6(SC)=6.20].

Question 2 – Modèle d'Einstein (10 points)

On considère une chaîne de N atomes, chacun oscillant dans un puits de potentiel harmonique et en contact avec un thermostat à la température T. Dans le modèle d'Einstein, chaque atome oscille avec une fréquence ω_E. Ses états quantiques sont d'énergie $e_n = \hbar\omega_E(n + \frac{1}{2})$ où n=0,1,2,... On supposera être à l'équilibre thermique dans l'ensemble NVT.

Démontrez que l'énergie moyenne de la chaîne est

$$\langle E\rangle = N\,\hbar\omega_E\left(\langle n\rangle + \frac{1}{2}\right) \quad \text{avec} \quad \langle n\rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_E}{kT}\right) - 1}$$