

## Physique de la matière condensée - CT MAI 2022

Question 1 - Energie de cohésion (16 points)

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

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

où  $\varepsilon=20$  meV et  $\sigma=0.398$  nm. La masse du Xe est  $m=131,29$  uma ( $1 \text{ uma}=1,66 \cdot 10^{-27}$  kg).

- Quelles sont les significations physiques des paramètres  $\varepsilon$  et  $\sigma$ ?
- Calculez l'énergie potentielle de liaison de la molécule  $\text{Xe}_2$  et sa longueur à l'équilibre en utilisant le potentiel  $V$ .
- Donnez l'équation du potentiel harmonique approximant au mieux le potentiel  $V$  au voisinage de la distance de liaison à l'équilibre. Calculez la valeur de la constante de force  $K$  associée.
- Sachant que la fréquence de vibration harmonique de la liaison  $\text{Xe}_2$  obéit à  $\omega^2 = \frac{2K}{m}$ , calculez la correction d'énergie de point zéro et évaluez l'énergie de la liaison à la limite du zéro absolu.
- Bien que le Xe soit un gaz dans les conditions normales de pression et température, il cristallise dans un réseau cubique à basses températures (inférieures à  $-111,8^\circ\text{C}$  à pression atmosphérique). En utilisant le potentiel  $V$ , calculez l'énergie de cohésion d'un cristal de Xe en considérant les réseaux de Bravais cubique à faces centrées et cubique simple. Quel est celui dans lequel le Xe cristallise ? Pour rappel, les valeurs des sommes de réseaux sont :  $S_{12}(\text{FCC})=12.13$ ,  $S_6(\text{FCC})=14.45$ ,  $S_{12}(\text{SC})=8.40$ ,  $S_6(\text{SC})=6.20$ .
- Comparez l'énergie de cohésion obtenue en e) avec les résultats expérimentaux : paramètre cristallin  $a=0.612$  nm et énergie de cohésion/atome = 0.17 eV et commentez.

## Question 2 – Modèle d'Einstein (14 points)

Dans le modèle d'Einstein des vibrations d'un solide, tous les atomes vibrent dans un potentiel harmonique isotrope avec une fréquence identique selon les axes X, Y et Z que l'on notera  $\omega_E$ . L'énergie d'un atome du solide est donc décrite par l'équation suivante :

$$E = \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega_E \quad (2)$$

où  $n_x$ ,  $n_y$  et  $n_z$  sont les nombres de quanta d'énergie  $\hbar \omega_E$  correspondant à l'excitation de modes de vibration selon X, Y et Z. Pour  $n \equiv n_x + n_y + n_z = 0$ , l'atome est dans son état d'énergie le plus bas, l'état fondamental. Pour  $n > 0$ , l'atome se trouve dans un état excité d'énergie  $n \hbar \omega_E$ . Chaque quantum de vibration peut être vu comme une quasiparticule (un boson). Dans le cas du cristal de diamant,  $\omega_E = 1.7136 \cdot 10^{14} \frac{\text{rad}}{\text{s}}$ . On donne les constantes  $\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ Js/rad}$ ,  $1 \text{ eV} = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ ,  $k_B = 1.3806 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ .

En utilisant le modèle d'Einstein, répondez aux questions suivantes.

- a) On considère que chaque atome du solide est en équilibre thermique à la température  $T$ . Dans ce cas, l'énergie de chaque atome fluctue au cours du temps passant d'un état quantique à un autre, d'une valeur de  $n$  à une autre. Démontrez que la valeur moyenne dans le temps (ou dans l'ensemble canonique) du nombre de quanta, que l'on notera  $\langle n(T) \rangle$ , est donnée par la distribution de Planck :

$$\langle n(T) \rangle = \langle n_x(T) \rangle + \langle n_y(T) \rangle + \langle n_z(T) \rangle = \frac{3}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_E}{k_B T}\right) - 1} \quad (3)$$

- b) Calculez l'énergie moyenne  $\langle E \rangle$  par atome à  $T=77 \text{ K}$  et  $T=300 \text{ K}$  en utilisant (2) et (3).
- c) Comparez les valeurs obtenues pour l'énergie moyenne par atome en b) avec les valeurs calculées dans une hypothèse classique en utilisant le théorème d'équipartition.
- d) Bonus facultatif : démontrez l'expression de la chaleur spécifique à volume constant dans ce modèle et comparez à l'hypothèse classique.