Travaux dirigés de physique statistique – PA201

Corrigé TD 1

Exercice 1 : *Défauts de Schottky*

1. Les sites sont discernables, il y a C_{N+n}^{n} façons de choisir les sites vides, donc :

   $P(n) = C_{N+n}^{n} \exp\left[-n\Delta / kT\right] / Z$.

   On notera que Z est une constante finie, si n reste limité à une valeur petite devant N. Pour n grand, le modèle n'a plus de sens physique, le cristal se disloque.
2. On cherche le maximum de $P(n)$, ou, ce qui revient au même, de $\ln\left(P(n)\right)$:

   $$0 = \frac{\partial \ln\left(P(n)\right)}{\partial n} \simeq \frac{\partial}{\partial n}\left[\left(N+n\right)\ln\left(N+n\right) - n\ln n - N\ln N - n\Delta / kT\right]$$

   $$1 + \ln\left(N+n\right) - 1 - \ln n - \Delta / kT = 0 \Rightarrow n = \frac{N}{\exp\left(\Delta / kT\right) - 1}$$
3. Si $T \to 0,\ n \to 0$; si $T \to \infty,\ n \to \infty$ (le cristal se disloque !).

Exercice 2 : *Pièges dans un cristal*

1. Les sites sont discernables, il y a C_{N}^{N-n} façons de choisir les sites occupés, et les électrons sont indiscernables, donc :

   $$Z_n = \sum_{(\alpha)} \exp\left[-E_\alpha / kT\right] = C_N^{N-n} \exp\left[\Delta\left(N-n\right) / kT\right] = C_N^{N-n} \exp\left[\Delta / kT\right]^{N-n}$$
2. $$Z = \sum_{n=0}^{N} Z_n = \sum_{n=0}^{N} C_N^{N-n} \exp\left[\Delta / kT\right]^{N-n} = \left(1 + \exp\left[\Delta / kT\right]\right)^{N}$$
3. $$P(p) = \frac{Z_{N-p}}{Z}$$
4. $$< n_p > = \sum_{p=0}^{N} pP(p) = \sum_{p=0}^{N} pC_N^{p} \exp\left[\Delta / kT\right]^{p} / \left(1 + \exp\left[\Delta / kT\right]\right)^{N}$$

   Or : $x\dfrac{d}{dx}\left(1+x\right)^{n} = x\dfrac{d}{dx}\sum_{p=0}^{n} C_n^{p} x^{p} = \sum_{p=0}^{n} pC_n^{p} x^{p} = nx\left(1+x\right)^{n-1}$

   D'où :

   $$< n_p > = N\exp\left[\Delta / kT\right]\left(1 + \exp\left[\Delta / kT\right]\right)^{N-1} / \left(1 + \exp\left[\Delta / kT\right]\right)^{N} = N / \left(1 + \exp\left[-\Delta / kT\right]\right)$$

   Si $T \to 0, < n_p > \to N$.

   Si $T \to \infty, < n_p > \to N / 2$.

Corrigé TD 1

Exercice 3 : *Défauts de Frenkel*

1. C'est le nombre de façons de choisir les n sites réguliers vacants et les n interstices occupés, soit : $C_N^n \times C_P^n$.
2. $Z = \sum_i \exp\left(-E_i / kT\right)$ où la somme porte sur tous les micro-états, soit :

   $$Z = \sum_{n=0}^{P} C_N^n C_P^n \exp\left(-(E_0 + n\varepsilon) / kT\right)$$

3. $P(E_n) = C_N^n C_P^n \exp\left(-(E_0 + n\varepsilon) / kT\right) / Z$

   On cherche le maximum de $P(E_n)$, ou, ce qui revient au même, de $\ln\left(P(E_n)\right)$, soit en utilisant la formule de Stirling :

   $$0 = \frac{\partial \ln\left(P(E_n)\right)}{\partial n} \simeq \frac{\partial}{\partial n}\{N \ln N - n \ln n - (N-n)\ln(N-n) + P \ln P - n \ln n - (P-n)\ln(P-n) - E_n / kT\}$$

   Soit :

   $0 = -2\ln n - 2 + \ln\left(N-n\right) + 1 + \ln\left(P-n\right) + 1 - \varepsilon / kT$, d'où avec $n \ll P, N$:

   $$n \simeq \sqrt{NP}\exp\left(-\varepsilon / 2kT\right).$$

   L'énergie la plus probable est donc environ $E_0 + \varepsilon\sqrt{NP}\exp\left(-\varepsilon / 2kT\right)$.