

Exercice 1 : Défauts de Schottky

Soit un cristal maintenu à la température T par un thermostat, et comportant $N+n$ sites. N sites sont occupés par un atome, et n sites sont vides. Un site vide a une énergie Δ ($\Delta > 0$) et un site occupé a une énergie nulle. Le nombre de sites vides peut fluctuer (le volume du cristal change). On suppose cependant que n reste petit devant N .

1. Quelle est la probabilité d'avoir n sites vides ?
2. Quel le nombre de sites vides le plus probable en fonction de la température.
3. Que devient ce nombre si $T \rightarrow 0$? si $T \rightarrow \infty$?

Exercice 2 : Pièges dans un cristal

Soit un cristal maintenu à la température T par un thermostat, et contenant N sites localisés identiques, avec un électron par site qui peut être soit d'énergie nulle, soit piégé et d'énergie $-\Delta$ ($\Delta > 0$).

1. On suppose que le nombre n d'électrons libres (non piégés) est fixé. Écrire la fonction de partition Z_n du système.
2. En fait, le nombre d'électrons libres peut fluctuer. Écrire la nouvelle fonction de partition Z du système.
3. Quelle est la probabilité pour qu'il y ait p électrons piégés ?
4. Quel est le nombre moyen d'électrons piégés ? Que devient ce nombre si $T \rightarrow 0$? si $T \rightarrow \infty$?

Exercice 3 : Défauts de Frenkel

Un cristal contient N sites réguliers et P ($P \ll N$) sites de défauts (interstices). Dans l'état fondamental, les atomes occupent chacun un site régulier et les interstices sont vides. Soit E_0 l'énergie de l'état fondamental. Quand un atome passe d'un site régulier à un interstice, son énergie augmente de $\varepsilon > 0$. On suppose qu'un atome de n'importe quel site régulier peut passer sur n'importe quel interstice. On appelle n le nombre de défauts du cristal (nombre d'interstices occupés). Le cristal est en contact avec un thermostat à la température T .

1. Combien y a-t-il de micro-états d'énergie $E_n = E_0 + n\varepsilon$?
2. Écrire l'expression de la fonction de partition Z sous la forme d'une somme sur les valeurs possibles de n .
3. Exprimer la probabilité que le cristal ait l'énergie E_n .
4. En déduire une valeur approchée de l'énergie la plus probable du cristal. On supposera N et P très grands devant n , et n lui-même très grand.