Université Lyon I / ENS Lyon
Magistère de Sciences de la Matière
2001–2002 [1]

Travaux Dirigés
Physique Statistique

DEFAUTS DANS LES CRISTAUX

1 Défauts de Frenkel.

1.1 Approche microcanonique.

1.1.1.

$$\Omega(n) = \frac{N!}{(N-n)!n!}\frac{N'!}{(N'-n)!n!}$$

1.1.2.

$$S(E)/k_B = N\ln N - +N'\ln N' - (N-n)\ln(N-n) - (N'-n)\ln(N'-n) - 2n\ln n$$

avec $n = E/\epsilon$.

Donc

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{k_B}{\epsilon}(\ln(N-n) + \ln(N'-n) - 2\ln n)$$

et si $n \ll N$ et $n \ll N'$ alors

$$n \simeq \sqrt{NN'}\exp(-\epsilon/2k_BT)$$

Dans la limite opposée de haute T, n tend vers $NN'/(N+N')$.

Dans le cas particulier $N = N'$ on peut calculer facilement

$$n = \frac{N}{1+\exp(\epsilon/2k_BT)}$$

A T ambiante $k_BT = 1eV/40$, ce qui donne une proportion de defauts de $e^{-10} \sim 10^{-5}$.

1.2 Approche canonique.

1.2.1.

$$Q = \sum_n g_n \exp(-E_n/k_BT)$$

ici, g_n est le $\Omega(n)$ calculé ci dessus, $E_n = n\epsilon$ $(0 \le n \le N)$.

1.2.2. On maximise $\ln\Omega(n) - n\epsilon/k_BT$ ce qui ramène au résultat canonique, $< n >= \sqrt{NN'}\exp(-\epsilon/2k_BT)$ pour $k_BT << \epsilon$.

1.2.3.

$$\ln Q \simeq N\ln N + N'\ln N' - 2n\ln n - (N-n)\ln(N-n) - (N'-n)\ln(N'-n) - n\beta\epsilon$$

où n est le terme qui maximise la contribution à Q.

On se place dans le cas particulier $N = N'$ ce qui donne pour le n le plus probable

$$\frac{n}{N} = \frac{1}{1+\exp(\beta\epsilon/2)}$$

$$\frac{N-n}{N} = \frac{\exp(\beta\epsilon/2)}{1+\exp(\beta\epsilon/2)}$$

et

$$-\beta F = \ln Q = 2N\ln(1+\exp(\beta\epsilon/2)) - N\beta\epsilon$$

$$E = -\frac{d\ln Q}{d\beta} = n\epsilon$$

$$S/k_B = (E-F)/k_BT = 2N\ln(1+\exp(\beta\epsilon/2)) - N(\epsilon/k_BT)\frac{\exp(\beta\epsilon/2)}{1+\exp(\beta\epsilon/2)}$$

[1] Jean-Louis Barrat; 04 72 44 85 65; barrat@dpm.univ-lyon1.fr ; http://dpm.univ-lyon1.fr/˜barrat

Fluctuations d'énergie :

$$< E^2 > - < E >^2 = \frac{d^2 \ln Q}{d\beta^2} = (N\epsilon^2/2)\frac{\exp(-\beta\epsilon/2)}{(1+\exp(-\beta\epsilon/2)^2}$$

$$\sigma_E/E = (1/\sqrt{2N})\exp(\beta\epsilon/4)$$

les fluctuations relatives décroissent comme $1/\sqrt{N}$

capacité calorifique

$$C_D = \frac{dE}{dT} = \frac{1}{k_B T^2}\frac{d^2 \ln Q}{d\beta^2}$$

A noter le lien entre C_D et les fluctuations d'énergie, qui montre que C_D est positive.

$$C_D = \frac{N\epsilon}{2k_B T^2}\frac{\exp(-\beta\epsilon/2)}{(1+\exp(-\beta\epsilon/2)^2}$$

à $T = 300K$ $C_D/Nk_B \simeq 200\exp(-10) \simeq 10^{-3}$ négligeable devant $3Nk_B$.