

CE - Introduction à la Physique statistique - Seconde session 2021

Question 1 – Modèle d'Einstein de la chaleur spécifique (12 pts)

On se place dans les hypothèses de la mécanique quantique. Dans le modèle d'Einstein des vibrations d'un solide, tous les atomes vibrent dans un potentiel harmonique avec une fréquence moyenne que l'on notera ω_E . L'énergie **d'un atome** du solide est donc décrite par l'équation suivante :

$$E = 3 \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_E \quad (1)$$

où n est le nombre de quanta d'énergie $\hbar \omega_E$.

Pour $n=0$, 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).

Données numériques, $\omega_E = 10^{13}$ rad/s et $\hbar = 1,054\,571\,800 \cdot 10^{-34}$ Js/rad.

Pour rappel, $1 \text{ eV} = 1.602176565 \cdot 10^{-19}$ J, la constante de Boltzmann est

$k_B = 1.38064852 \cdot 10^{-23}$ J/K.

En utilisant le modèle d'Einstein [équation (1)], 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 :

$$\langle n(T) \rangle = \frac{1}{\exp(\beta \hbar \omega_E) - 1} \quad \text{avec } \beta = 1/(k_B T). \quad (2)$$

- b) Calculez l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ par atome à $T=77$ K et $T=300$ K en utilisant (1) et (2).
 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) Démontrez l'expression de la chaleur spécifique à volume constant C_V par atome dans ce modèle en utilisant les équations (1) et (2) et la définition de C_V .
 e) Montrez qu'à hautes températures, C_V tend vers une constante (résultat classique).
 f) Calculez C_V par atome à $T=77$ K et $T=300$ K et comparez à la valeur limite de C_V à hautes températures (point e).

Question 2 –(8 pts)

Un ensemble de N molécules dipolaires est adsorbé sur la surface d'un cristal. Le taux de recouvrement de la surface par les molécules est suffisamment faible pour que l'on puisse négliger en première approximation les interactions entre les molécules. La surface est à la température T . Le moment dipolaire d'une molécule est noté μ et sa norme est μ . A cause de l'anisotropie de la surface et des interactions molécule adsorbée-surface, le moment dipolaire de chaque molécule n'existe que dans deux orientations possibles équiprobables :

$$\mu^+ = \mu \mathbf{e}_y \text{ et } \mu^- = -\mu \mathbf{e}_y$$

où le vecteur \mathbf{e}_y est un vecteur unitaire selon Y choisi dans la direction préférentielle des moments dipolaires.

- Donnez la formule générale de la probabilité P d'observer n molécules avec un moment dipolaire μ^+ ($0 \leq n \leq N$).
- Appliquez la formule a) pour les cas $N=10$ et $N=100$.
- Calculez la **valeur moyenne** du moment dipolaire d'un ensemble de 100 molécules ($N=100$) et sa **variance**.
- Lorsqu'un champ électrique $\mathbf{E}=E \mathbf{e}_y$ est appliqué, la différence d'énergie entre les deux orientations possibles du moment dipolaire d'une molécule est : $\varepsilon^+ - \varepsilon^- = -2\mu E = -0.1 \text{ eV}$. Si la température du substrat est de 300K, calculez le rapport entre la probabilité que le moment dipolaire de la molécule soit μ^+ par rapport à la probabilité que son moment soit μ^- . Si 100 molécules sont adsorbées, quelle est le moment dipolaire total moyen de l'ensemble à 300 K?