



 : Exercices de cours à faire avant le TD et qui ne seront pas corrigés en séances

 : Exercices à préparer avant le TD et qui seront corrigés en séance

 : Exercices non corrigés en TD (plus difficiles), pour réviser & s'entraîner

N'hésitez pas à demander des éclaircissements auprès de vos enseignant.e.s.

1 Statistiques classiques et quantiques : un exemple numérique

On considère un système quantique dont l'Hamiltonien exhibe trois états propres non dégénérés d'énergies distinctes, respectivement 0, ϵ et 2ϵ , en équilibre avec un thermostat à la température T .

- 1 – Le système est composé d'une particule sans spin. Représenter graphiquement les différents micro-états possibles du système. Calculer la fonction de partition $Z_1(\beta)$ de cette particule et son énergie moyenne $\langle E_1(\beta) \rangle$.
- 2 – Le système est composé de deux particules sans spin *discernables*. Représenter graphiquement les différents micro-états possibles du système. Calculer la fonction de partition $Z_{2d}(\beta)$ de ces deux particules et montrer que $Z_{2d}(\beta) = Z_1(\beta)^2$. En déduire l'énergie moyenne $\langle E_{2d}(\beta) \rangle$. Tracer avec Python $\langle E_{2d}(\beta) \rangle$ en fonction du paramètre $x = \frac{k_B T}{\epsilon}$.
- 3 – Le système est composé de deux bosons *indiscernables*. Représenter graphiquement les différents micro-états possibles du système. Calculer la fonction de partition $Z_{2B}(\beta)$ de ces deux particules. Vérifier que $Z_{2B}(\beta) = \frac{1}{2}[Z_1(\beta)^2 + Z_1(2\beta)]$. En déduire l'énergie moyenne $\langle E_{2B}(\beta) \rangle$. Tracer avec Python $\langle E_{2B}(\beta) \rangle$ en fonction de x .
- 4 – Le système est composé de deux fermions *indiscernables* de spin nul (en totale violation du théorème spin-statistique!). Représenter graphiquement les différents micro-états possibles du système. Calculer la fonction de partition $Z_{2F}(\beta)$ de ces deux particules. Vérifier que $Z_{2F}(\beta) = \frac{1}{2}[Z_1(\beta)^2 - Z_1(2\beta)]$. En déduire l'énergie moyenne $\langle E_{2F}(\beta) \rangle$. Tracer avec Python $\langle E_{2F}(\beta) \rangle$ en fonction de x .
- 5 – Qu'advient-il si les fermions ont un spin $\frac{1}{2}$? Reprendre la question précédente. Expliquer pourquoi cela revient à considérer que tous les niveaux d'énergie sont dégénérés deux fois.

On considère désormais qu'outre la température, on fixe le potentiel chimique μ .

- 6 – Rappeler les expressions des taux d'occupation de chaque état propre en fonction de son énergie, de T et de μ selon que les particules sont des bosons ou des fermions.
- 7 – Donner les expressions correspondantes (pour notre système avec trois états propres) de l'énergie moyenne $\langle E(\beta, \mu) \rangle$ et du nombre moyen de particules $\langle N(\beta, \mu) \rangle$.
- 8 – On veut un nombre moyen de bosons égal à deux. Calculer numériquement la fugacité $f = \exp(\beta\mu)$ pour quelques valeurs du paramètre x , puis l'énergie moyenne correspondante. Comparer avec les résultats de la question 3.

2 Modèle à deux niveaux d'un semi-conducteur intrinsèque

On se propose d'étudier la conductivité électrique d'un semi-conducteur intrinsèque, c'est-à-dire ne contenant pas d'impuretés. On considère donc un modèle dans lequel les bandes de valence et de conduction sont assimilées à deux niveaux d'énergie ϵ_1 et ϵ_2 , de même dégénérescence $g = g_1 = g_2$. On posera $\Delta\epsilon = \epsilon_2 - \epsilon_1 > 0$.

Soit N le nombre d'électrons se trouvant dans la bande de valence (c'est-à-dire dans ce modèle sur ϵ_1) au zéro absolu : à cette température, la bande de conduction est vide. On suppose donc que $N = g$. Soient T la température du système et μ son potentiel chimique.

- 1 – A quelle statistique obéissent les électrons ? En déduire le nombre d'électrons N_1 et N_2 se trouvant respectivement sur les niveaux ϵ_1 et ϵ_2 à l'équilibre thermique. Quelle relation lie N_1 , N_2 et N ?
- 2 – On pose $f = \exp(\beta\mu)$, $f_1 = \exp(\beta\epsilon_1)$ et $f_2 = \exp(\beta\epsilon_2)$. Déduire de la relation précédente l'expression de f en fonction de f_1 et f_2 . Montrer que, quelle que soit la température, $\mu = \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2}$.
- 3 – On note P_1 et P_2 , le nombre de trous ou places vides dans chacun des niveaux 1 et 2. Exprimer N_1 et N_2 , ainsi que P_1 et P_2 en fonction de g , $\Delta\epsilon$ et $k_B T$. Quelles sont les limites de ces quantités aux basses et aux hautes températures ?
- 4 – Comparer ces résultats avec ceux que l'on obtient lorsqu'on applique la statistique classique de Maxwell-Boltzmann à ce système.
- 5 – Donner les expressions de l'énergie moyenne \bar{E} et de la capacité calorifique C en fonction de la température.
- 6 – On admet que C présente un maximum lorsque $2 \frac{k_B T}{\Delta\epsilon} = 0,42$. Sachant que $\Delta\epsilon = 1$ eV, calculer la température correspondante. En déduire que dans les semi-conducteurs usuels, seule la partie croissante de la capacité calorifique avec la température peut être observée.
- 7 – Toujours dans le cas $\Delta\epsilon = 1$ eV, simplifier les expressions obtenues de N_2 et P_1 lorsque la température est proche de l'ambiante (300 K).
- 8 – La conductivité électrique est donnée par la formule

$$\sigma = e \left(\frac{N_2}{V} \mu_- + \frac{P_1}{V} \mu_+ \right),$$

où e est la charge élémentaire, μ_{\pm} les mobilités respectives des électrons et des trous dans ce cristal, quantités que l'on supposera indépendantes de la température. Pour le silicium, $n = \frac{N}{V} = 3,1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $\Delta\epsilon = 1,1$ eV, $\mu_+ = 400 \text{ cm}^2 \cdot (\text{V.s})^{-1}$ et $\mu_- = 1600 \text{ cm}^2 \cdot (\text{V.s})^{-1}$. Calculer la conductivité électrique du silicium pur à $T = 300$ K et $T = 1000$ K. Tracer la courbe théorique de la conductibilité en fonction de la température dans une représentation où le graphe de la fonction est linéaire. Expliquer comment la mesure de σ permet de déterminer $\Delta\epsilon$.