Examen de Physique statistique I

mardi 25 août 2015

Durée de l'épreuve : **1h30**

L'utilisation de documents, téléphones portables, calculatrices, ... est interdite.

Recommandations :

Lisez attentivement l'énoncé et rédigez *succinctement* et *clairement* votre réponse.
Vérifiez vos calculs (analyse dimensionnelle, etc) ; n'oubliez pas de vous **relire**.

Pensez aux **informations en annexe**.

Question de cours

1/ Quel type de systèmes, avec quels paramètres extérieurs, est décrit par l'ensemble microcanonique et quelle est la différence principale avec un système décrit par l'ensemble canonique ?

2/ Donner la probabilité d'occupation d'un microétat dans l'ensemble microcanonique. Exprimer l'entropie microcanonique.

Partie A : Température de spin d'un réseau de spins 1/2

On considère un système formé de N spins 1/2 fixés aux nœuds d'un réseau cristallin placé dans un champ magnétique $\vec{B} = B\,\vec{u}_z$. On ne s'intéresse ici qu'à l'ensemble des spins et on néglige tous les autres degrés de liberté. Ce système atteint son équilibre macroscopique grâce aux interactions entre spins, mais on suppose que les énergies d'interaction correspondantes sont négligeables devant l'énergie de couplage entre les moments magnétiques de spin et le champ extérieur. Dans cette approximation, l'hamiltonien du système est donné par :

$$H = -B\sum_{i=1}^{N}\mu_{iz} \equiv \sum_{i=1}^{N} h_i,$$

où μ_{iz} est la composante du i-ème moment magnétique dans la direction de $\vec{B}$. On rappelle que ce moment magnétique est associé au moment cinétique de spin par la relation : $\vec{\mu} = 2\mu_B\vec{S}/\hbar$, où $\mu_B < 0$ est le magnéton de Bohr. On rappelle également que l'observable de spin S_z a deux états propres associés à deux valeurs propres différentes : $S_z|\pm\rangle = \pm\hbar/2|\pm\rangle$.

1. Calculer les valeurs propres $\varepsilon_\pm$ du hamiltonien individuel h_i d'un spin en fonction de B et de μ_B.

2. On suppose dans toute cette partie que le système est isolé et on note E son énergie totale. Soit N_+ et N_- les nombres de spin dans les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Donner l'expression de E en fonction de N_+ et N_-. En déduire les expressions de N_+ et N_- en fonction de E et N. Quelles sont les valeurs extrêmes possibles de E ?

3. Donner l'expression du nombre Ω de microétats accessibles si l'énergie du système est E. Déduire l'entropie microcanonique S^* en supposant $N \gg 1$ et $N_\pm \gg 1$.

4. En déduire l'expression de la température microcanonique du système, que l'on exprimera ici sous la forme $\beta^* = 1/(k_B T^*)$. On exprimera β^* en fonction de N_+ et N_-, puis en fonction de E, N (et B). Pour quelles valeurs de l'énergie totale E est-elle négative ? Dans quel domaine peut varier β^* ? Représenter T^* en fonction de E.

5. Montrer que l'on peut écrire : $E = -N\mu_B B \,\mathrm{th}(\beta^* \mu_B B)$. Représenter E en fonction de β^*.

Partie B : Équilibre thermique entre deux réseaux de spins

Dans cette seconde partie, on considère deux systèmes $\mathscr{S}_1$ et $\mathscr{S}_2$ de spins 1/2 formés respectivement de N_1 et N_2 spins et placés dans le même champ magnétique $\vec{B}$. Initialement ces deux systèmes sont isolés. Soient E_{1i} et E_{2i} les valeurs respectives de leurs énergies initiales, et $T_1^*(E_{1i}) \equiv T_{1i}^*$ et $T_2^*(E_{2i}) \equiv T_{2i}^*$ les valeurs correspondantes de leurs températures microcanoniques. Ils sont alors mis en contact thermique et peuvent donc échanger de l'énergie, le système total $\mathscr{S}_1 \cup \mathscr{S}_2$ restant, lui, isolé.

1. Rappeler sans démonstration la relation qui va vous permettre de calculer la valeur la plus probable $\tilde{E}_1$ de l'énergie de $\mathscr{S}_1$. Montrer qu'il en résulte que :

$$\frac{\tilde{E}_1}{N_1} = \frac{\tilde{E}_2}{N_2},$$

   où $\tilde{E}_2$ est l'énergie la plus probable de $\mathscr{S}_2$.

2. Si l'on admet que la limite thermodynamique est atteinte, que peut-on dire alors de ces valeurs les plus probables ? Dans la suite du problème, on suppose cette limite atteinte et l'on appelle T^* la température d'équilibre thermique des deux systèmes.

3. On considère la limite de faible champ jusqu'à la fin du problème, i.e. $|\mu_B B| \ll k_B T_{1i}^*$ et $|\mu_B B| \ll k_B T_{2i}^*$ (et donc $|\mu_B B| \ll k_B T^*$). Quelle est la relation approchée entre l'énergie d'un réseau de spins et sa température dans ce cas ? Déduire que la température d'équilibre est donnée par

$$\frac{N_1 + N_2}{T^*} \simeq \frac{N_1}{T_{1i}^*} + \frac{N_2}{T_{2i}^*}\,.$$

4. Soit $\delta E_1 \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{E}_1 - E_{1i}$ la variation d'énergie de $\mathscr{S}_1$. Exprimer δE_1 en fonction de N_1, N_2, T_{1i}^* et T_{2i}^* (et B).

5. On suppose maintenant que $T_{2i}^* > 0$. Analyser le sens du transfert de chaleur entre $\mathscr{S}_1$ et $\mathscr{S}_2$ suivant la valeur de T_{i1}^*. (On rappelle que, par définition, le corps le plus chaud est celui qui cède de l'énergie ; on précisera donc bien qui, de $\mathscr{S}_1$ ou $\mathscr{S}_2$, est le plus chaud).

Annexe

Formule de Stirling $\ln n! \simeq n \ln n - n$ pour $n \gg 1$.

Examen de Physique statistique II

mardi 25 août 2015

Durée de l'épreuve : **1h30**

L'utilisation de documents, téléphones portables, ... est interdite. Calculatrices autorisées.

Recommandations :

Lisez attentivement l'énoncé et rédigez *succinctement* et *clairement* votre réponse.
Vérifiez vos calculs (analyse dimensionnelle, etc) ; n'oubliez pas de vous **relire**.

Pensez aux **informations en annexe**.

Question de cours

1/ Rappeler (sans démonstration) la distribution grand canonique d'occupation d'un microétat (définir les conditions auxquelles s'applique la description et les différentes quantités introduites).

2/ Donner la définition de la grande fonction de partition Ξ. Comment déduire le nombre moyen de particules et l'énergie moyenne en fonction de Ξ (démontrer brièvement ces résultats).

Capacité calorifique de la feuille de graphène

Au milieu des années 2000, d'importants progrès ont été réalisés pour la fabrication et la manipulation de feuilles de graphène monocouches (une couche d'atomes de carbone organisés en réseau « nid d'abeilles » comme le montre la figure).

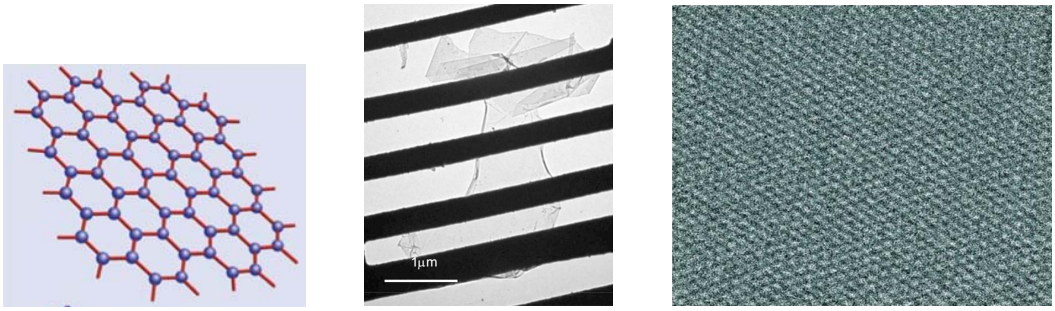

Figure 1 – **Feuille de graphène.** Au milieu : *feuille de graphène suspendue (partie pâle) entre contacts métalliques (parties sombres) vue par microscopie électronique à transmission.* À droite : *image du réseau à l'échelle atomique.* Figures tirées de la revue : A. H. Castro Neto *et al.*, *The electronic properties of graphene*, Review of Modern Physics **81**, 109 (2009).

Dans ce problème nous étudions les propriétés thermodynamiques du gaz d'électrons dans la feuille de graphène. Dans la limite de basse énergie, les états libres à un électron (ondes planes) sont caractérisés par une relation de dispersion du type relativiste

$$\varepsilon_{\vec{k},\pm} = \pm\hbar\, v_0\, ||\vec{k}|| \qquad \text{où } v_0 \simeq 10^6\ \text{m/s}\,. \tag{1}$$

L'indice $\pm$ désigne des états dans la bande de valence ($-$, bande occupée) et de conduction ($+$, vide à $T = 0$). Ces états ont une **dégénérescence 4**. En principe, cette forme simplifiée n'est valable que pour des énergies petites devant la largeur de bande $\Lambda \sim 1\text{eV}$: on pourra simplement considérer que les ondes planes n'existent que pour des énergies telles que $|\varepsilon| < \Lambda$.

1/ Densité d'états.– Puisque le spectre des états individuels est symétrique par rapport à l'énergie $\varepsilon = 0$, on peut se limiter au calcul de la densité d'états pour $\varepsilon > 0$. Montrer que la relation de dispersion $\varepsilon_{\vec{p}} = v_0||\vec{p}||$ est associée à une densité d'états linéaire en deux dimensions

$$\rho(\varepsilon) = \mathcal{A}\, C\, |\varepsilon| \tag{2}$$

où $\mathcal{A}$ est la surface de la feuille de graphène. Donner l'expression de la constante C.

Remarque : dans notre modèle, la forme linéaire (2) est valable pour $\varepsilon \in [-\Lambda, +\Lambda]$; la densité d'états sera prise nulle hors de l'intervalle : $\rho(\varepsilon) = 0$ si $\varepsilon \notin [-\Lambda, +\Lambda]$.

Dans le jargon de la matière condensée, un tel comportement de densité d'états où bandes de conduction et de valence se touchent est interprété comme un **semi-métal**, un état intermédiaire entre le métal ($\rho(\varepsilon_F)$ finie) et l'isolant ($\rho(\varepsilon) = 0$ dans un intervalle fini, le gap, contenant ε_F).

2/ Nombre d'électrons et potentiel chimique

Dans un premier temps, on suppose la température T et le potentiel chimique μ fixés.

a) Rappeler l'expression de la distribution de Fermi-Dirac, que l'on notera $n(\varepsilon;\mu)$. Tracer *soigneusement* $n(\varepsilon;0)$ pour $T = 0$ et T finie.

b) Montrer que le nombre moyen d'électrons peut se mettre sous la forme

$$\overline{N}^{\mathrm{G}}(T,\mu) = \overline{N}^{\mathrm{G}}(0,0) - \int_0^\Lambda \mathrm{d}\varepsilon\, \rho(-\varepsilon)\, n(\varepsilon;-\mu) + \int_0^\Lambda \mathrm{d}\varepsilon\, \rho(\varepsilon)\, n(\varepsilon;\mu)\,. \tag{3}$$

Interpréter les différents termes.

On considère maintenant, et **jusqu'à la fin de problème**, la situation où le nombre d'électrons N est fixé, i.e. on écrit $\overline{N}^{\mathrm{G}}(T,\mu) = N$ ce qui fournit le potentiel chimique comme fonction de T.

c) À quelle condition peut-on utiliser le résultat grand canonique pour décrire la situation *canonique* ? Si la feuille de graphène est non dopée, le potentiel chimique s'annule à température nulle $\mu(T = 0) = \varepsilon_F = 0$. Montrer que le potentiel chimique reste alors indépendant de la température : $\mu(T) = 0\ \forall\ T$.

d) Déduire la densité de porteurs $n_e(T) = N_e(T)/\mathcal{A}$ en fonction de T et des constantes du problème ($N_e(T)$ est le nombre d'électrons d'énergie $\varepsilon > 0$) **on supposera que $\boldsymbol{\Lambda/k_BT \to \infty}$** pour simplifier le calcul de l'intégrale. Discuter la validité de cette approximation (par exemple si $T \lesssim 300\,\mathrm{K}$). A.N. : calculer $n_e(T)$ à $T = 300\,\mathrm{K}$.

3/ Énergie et capacité calorifique.

a) Montrer que l'énergie d'excitation est le double de l'énergie des électrons de conduction :

$$\delta E(T) \overset{\text{def}}{=} \overline{E}(T) - \overline{E}(0) = 2\, E_e(T) = 2 \int_0^\Lambda \mathrm{d}\varepsilon\, \rho(\varepsilon)\, \varepsilon\, n(\varepsilon;0)\,. \tag{4}$$

b) Calculer explicitement l'énergie $\delta E(T)$ (pour $\Lambda/k_BT \to \infty$) et déduire la capacité calorifique $C_V(T)$. Montrer qu'elle peut se mettre sous la forme $C_V(T) = \alpha\, N_e(T)\, k_B$ où α est un nombre sans dimension que l'on précisera.

c) Rappeler l'argument heuristique qui permet d'expliquer le comportement linéaire $C_V(T) \sim Nk_B\,(T/T_F)$ pour un *métal normal* (i.e. lorsque $\rho(\varepsilon_F)$ est finie). Adapter cet argument pour justifier par un argument similaire le comportement de $C_V(T)$ de la feuille de graphène.

Annexe

• Intégrales utiles : $\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x}{\mathrm{e}^x + 1} = \frac{\pi^2}{12}\,, \qquad \int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^2}{\mathrm{e}^x + 1} = \frac{3}{2}\,\zeta(3) \quad \text{où } \zeta(3) \simeq 1.202$

• Constantes fondamentales : $k_B = 1.38 \times 10^{-23}\,\mathrm{J.K^{-1}}$, $\hbar = 10^{-34}\,\mathrm{J.s}$ et $q_e = -1.6 \times 10^{-19}\,\mathrm{C}$