

CORRIGÉ DE L'EXAMEN FINAL DE PHYSIQUE STATISTIQUE DU 20/05/2016

1 Capacité calorifique d'un solide amorphe

1/ $z_n = 1 + e^{-\beta\varepsilon_n}$ et $Z = \prod_{n=1}^N (1 + e^{-\beta\varepsilon_n})$ (systèmes indépendants).

Les systèmes à deux niveaux sont fixés dans l'espace \Rightarrow pas de facteur $1/N!$

2/ Énergie libre : $F = -k_B T \ln Z = -k_B T \sum_{n=1}^N \ln(1 + e^{-\beta\varepsilon_n})$

Énergie moyenne : $\bar{E}^C = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \sum_{n=1}^N \frac{\varepsilon_n}{e^{\beta\varepsilon_n} + 1}$.

D'où la capacité calorifique $C_V = \frac{\partial \bar{E}^C}{\partial T} = k_B \sum_{n=1}^N \frac{(\beta\varepsilon_n)^2 e^{\beta\varepsilon_n}}{(1 + e^{\beta\varepsilon_n})^2}$. On peut encore écrire la capacité calorifique comme une somme $C_V = k_B \sum_{n=1}^N c(\beta\varepsilon_n)$, où $c(x) = \left[\frac{x/2}{\text{ch}(x/2)}\right]^2$ est reliée à la capacité calorifique d'un unique système à 2 niveaux.

Pour $N = 1$ système à 2 niveaux on obtient les comportements limites :

- $C_V \simeq k_B (\varepsilon_1/k_B T)^2 e^{-\varepsilon_1/k_B T}$ pour $T \rightarrow 0$ (le comportement $C_V \sim e^{-\varepsilon_1/k_B T}$ est caractéristique d'un spectre gapé).
- La capacité calorifique décroît également aux hautes températures, $C_V \simeq k_B (\varepsilon_1/2k_B T)^2 \sim 1/T^2$, ce qui est lié à l'existence d'une énergie maximale, i.e. traduit la *saturation* de l'énergie à haute température (à haute température, les deux états sont équiprobables et $\bar{E}^C \simeq \varepsilon_1/2$).

3/ Le membre de droite est la moyenne de $f(y)$ par rapport à $P(y)$. Selon le membre de gauche de cette égalité, on obtient cette moyenne également en tirant des y_i au hasard de la loi P , en calculant pour chacun $f(y_i)$, et en déterminant la moyenne pour un nombre N de tirages qui devient infiniment grand.

Autrement dit : on utilise l'application du théorème de la limite centrale $(1/N) \sum_i f(y_i) \rightarrow \overline{f(y)}$ à des fluctuations $\mathcal{O}(1/\sqrt{N}) \rightarrow 0$ près.

4/ $C_V = N k_B \int_0^\infty d\varepsilon P(\varepsilon) \frac{(\beta\varepsilon)^2 e^{\beta\varepsilon}}{(1 + e^{\beta\varepsilon})^2}$

5/ On analyse le comportement de la capacité calorifique à basse température :

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{N k_B}{\beta} \int_0^\infty d\eta P\left(\frac{\eta}{\beta}\right) \frac{\eta^2 e^\eta}{(1 + e^\eta)^2} = \frac{N k_B}{\beta} \int_0^\infty d\eta \left[P(0) + \frac{\eta}{\beta} P'(0) + \dots \right] \frac{\eta^2 e^\eta}{(1 + e^\eta)^2} \\ &= N k_B T P(0) \underbrace{\int_0^\infty d\eta \frac{\eta^2 e^\eta}{(1 + e^\eta)^2}}_{\text{coeff. num.}} + \mathcal{O}(T^2) \end{aligned}$$

On obtient donc un comportement *linéaire* en température, $C_V \propto T$ pour $T \rightarrow 0$.

6/ (i) Indépendamment du calcul de cet exercice, on voit sur la figure que la contribution des phonons à C_V (le pointillé, pente = 3 en accord avec Debye), du moins dans le régime des températures de 0.25 à 0.5 K, est un ordre de grandeur plus petite que la capacité calorifique totale mesurée.

(ii) On voit que C_V se comporte en $C_V \propto T^\alpha$ avec $\alpha = 1.22$ à 1.30 . Ceci s'approche du comportement linéaire, $C_V \propto T$ (pente = 1), trouvé dans l'exercice. On peut qualifier cet accord de "satisfaisant" ou d'"insuffisant", selon la précision que l'on exige d'une théorie.

2 Condensation de Bose-Einstein et fluctuations

A. Question de cours.— On retrouvait la distribution de Bose-Einstein

$$\bar{n}_\lambda = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \xi_\lambda}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)} - 1}$$

avec $\mu < \varepsilon_0$. On trouvera dans les notes de cours la démonstration de

$$\text{Var}(n_\lambda) = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln \xi_\lambda}{\partial \mu^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \bar{n}_\lambda}{\partial \mu} = \frac{e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)} - 1)^2} = \bar{n}_\lambda (1 + \bar{n}_\lambda) .$$

B. Condensation dans un puits harmonique.— On considère N atomes à température T dans un puits harmonique 3D.

1/ Si T diminue à N fixé, on a vu en TD qu'il existe une température finie, T_{BE} , à laquelle le potentiel chimique atteint sa limite supérieure autorisée, $\mu = \varepsilon_0^- = 0^-$. En dessous de cette température, un nombre *macroscopique* de bosons s'accumulent dans l'état individuel fondamental, i.e. $n_0 = \mathcal{O}(N)$.

2/ L'expression grand canonique pour le nombre moyen de bosons est

$$\bar{N}^G = \sum_\lambda \bar{n}_\lambda$$

On admet qu'elle décrit également la situation canonique à la limite thermodynamique, $\bar{N}^G \rightarrow N$. Si le spectre des états individuels est très dense (décrit par une densité d'états), on peut remplacer la somme par une intégrale $\sum_\lambda \rightarrow \int d\varepsilon \rho(\varepsilon)$. Pour $T < T_{\text{BE}}$, il faut cependant singulariser la contribution du fondamental, $\bar{n}_0(T)$, qui devient macroscopique, alors que le nombre moyen de bosons excités $\bar{N}_e(T)$ s'exprime encore comme "un nombre macroscopique de contributions microscopiques" :

$$N = \bar{n}_0(T) + \int_0^\infty d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \quad \text{pour } T \leq T_{\text{BE}} \text{ (i.e. } \mu = 0)$$

En utilisant l'annexe on obtient $\bar{N}_e(T) = \zeta(3)(k_B T / \hbar\omega)^3$.

$T = T_{\text{BE}}$ est la température en deça de laquelle \bar{n}_0 devient macroscopique ; cependant il peut encore être considéré microscopique à la transition, i.e. on peut écrire $\bar{n}_0(T_{\text{BE}}) = 0$ et $\bar{N}_e(T_{\text{BE}}) = N$ d'où $T_{\text{BE}} = [N/\zeta(3)]^{1/3} \hbar\omega/k_B$.

3/ La fraction condensée est $\bar{n}_0(T)/N = 1 - (T/T_{\text{BE}})^3$ pour $T \leq T_{\text{BE}}$ (et nulle au delà).

4/ Fluctuations.

a/ La variance du nombre de bosons excités est la somme des variances (les états sont indépendants et le condensat joue le rôle de réservoir pour les bosons excités)

$$\Delta N_e^2 = \sum_{\lambda>0} \text{Var}(n_\lambda) = \sum_{\lambda>0} \bar{n}_\lambda (1 + \bar{n}_\lambda) = \sum_{\lambda>0} \frac{e^{\beta\varepsilon_\lambda}}{(e^{\beta\varepsilon_\lambda} - 1)^2} = \int_0^\infty d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{e^{\beta\varepsilon}}{(e^{\beta\varepsilon} - 1)^2}$$

On a utilisé que $\mu = 0$.

b/ Une I.P.P. donne

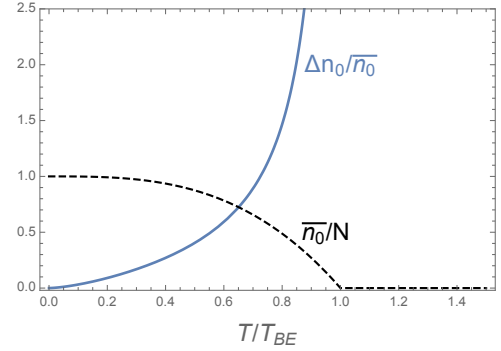
$$\Delta N_e^2 = \frac{1}{(\hbar\omega)^3\beta} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} = \zeta(2) \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right)^3 = N \frac{\zeta(2)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_{BE}} \right)^3$$

c/ Puisque $N = n_0 + N_e$ est fixé, on a $\text{Var}(n_0) = \text{Var}(N - N_e) = \text{Var}(N_e)$. En collectant les résultats nous déduisons :

$$\boxed{\frac{\Delta n_0}{\bar{n}_0} = \sqrt{\frac{\zeta(2)}{N\zeta(3)} \frac{\tau^{3/2}}{1 - \tau^3}}} \quad \text{avec } \tau \stackrel{\text{def}}{=} \frac{T}{T_{BE}}. \quad (7)$$

Les fluctuations relatives divergent en approchant la température critique :

$$\frac{\Delta n_0}{\bar{n}_0} \sim \frac{1}{T_{BE} - T} \quad \text{pour } T \rightarrow T_{BE}^-$$



POUR EN SAVOIR PLUS : cette analyse a été proposée dans l'article :

H. David Politzer, « *Condensate fluctuations of a trapped, ideal Bose gas* », Phys. Rev. A **54**, 5048 (1996).

Une analyse plus soignée a été faite dans :

M. Holthaus, E. Kalinowski and K. Kirsten, « *Condensate fluctuations in trapped Bose gases : canonical vs. microcanonical ensemble* », Ann. Phys. **270**, 198 (1998).

3 Ferromagnétisme itinérant et modèle de Stoner

A. Gaz de fermions libres sans spin. – La densité d'états intégrée est donnée par le calcul semi-classique : $\Phi(\varepsilon) = \frac{V}{h^3} \frac{4\pi}{3} (2m\varepsilon)^{3/2}$, d'où la densité d'états par unité de volume et par spin $\rho(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}$.

2/ À $T = 0$, l'énergie de Fermi est donnée en écrivant $N = \Phi(\varepsilon_F)$ d'où $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (6\pi^2 n)^{2/3}$.

3/ L'énergie du gaz est donnée par $E_0 = V \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \rho(\varepsilon) \varepsilon$, d'où

$$\mathcal{E}_0(n) = \frac{3}{5} n \varepsilon_F = \frac{3(6\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{10} \frac{n^{5/3}}{m}.$$

B. Électrons en interaction dans l'approximation de champ moyen.

1/ $[U] = [\text{énergie}] \times [\text{volume}]$ d'où $[\ell] = [\text{longueur}]$.

2/ Il suffit d'introduire $n_\uparrow = n(1 + \mathcal{M})/2$ et $n_\downarrow = n(1 - \mathcal{M})/2$ dans $\mathcal{E}(n_\uparrow, n_\downarrow) = \mathcal{E}_0(n_\uparrow) + \mathcal{E}_0(n_\downarrow) + U n_\uparrow n_\downarrow$.

3/ On suit une approche variationnelle : on a exprimé le paramètre \mathcal{M} , qu'on a supposé *a priori* non nul, puis on introduit un critère (minimisation de l'énergie) pour déterminer le paramètre

a posteriori. On se limitera ici au régime $\mathcal{M} \ll 1$.

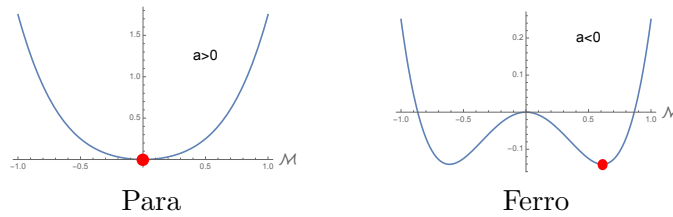
a/ En utilisant le d.l. on obtient

$$\mathcal{E}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = 2 \mathcal{E}_0(n/2) + 2 \times 3^4 (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2 n^{5/3}}{m} \left[3(1 - \ell n^{1/3}) \mathcal{M}^2 + \mathcal{M}^4 + \mathcal{O}(\mathcal{M}^6) \right]$$

b & c/ On voit donc que la densité d'énergie est de la forme $\mathcal{E} \simeq \text{const} + (\dots) \frac{\hbar^2 n^{5/3}}{m} [a \mathcal{M}^2 + \mathcal{M}^4]$ où $a = 3(1 - \ell n^{1/3})$ peut changer de signe en fonction de la valeur de $\ell n^{1/3}$. La valeur critique de l'interaction est simplement reliée à la densité : $\ell_c = n^{-1/3}$.

Si l'interaction est faible, $\ell < \ell_c$, le minimum de l'énergie est $\mathcal{M} = 0$: le métal est dans une phase **paramagnétique**.

Si l'interaction est supérieure au seuil, $\ell > \ell_c$, l'énergie a deux minima en $\mathcal{M} = \pm \sqrt{-a/2} \neq 0$: le métal est dans une phase **ferromagnétique** (il est aimanté en l'absence de champ magnétique extérieur).



Remarque : au delà de la transition de Stoner ($\ell > \ell_c$), dans la phase ferromagnétique, le système "choisit" un des deux minima (dans la pratique ce choix dépend de la façon dont le système passe la transition). Le système est alors dans un état qui brise la symétrie $\mathcal{M} \leftrightarrow -\mathcal{M}$ du problème (le profil d'énergie est symétrique). Ce phénomène de « **brisure spontanée de symétrie** » est générique et caractéristique de nombreuses transitions de phase.

d/ $U_c \sim 1/\rho(\varepsilon_F)$.