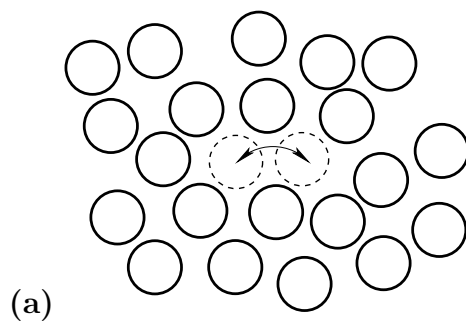


EXAMEN FINAL DE PHYSIQUE STATISTIQUE

Vendredi 20 mai 2016

Durée de l'épreuve : **3 heures.***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**.**1 Capacité calorifique d'un solide amorphe**

Introduction.— Nous avons vu en cours que le comportement génériquement attendu pour la capacité calorifique d'un solide est $C_V(T) \propto T^3$, ce qui repose sur l'existence de modes de vibration de basse énergie, décrits par une branche sonique. L'objet du problème est d'étudier le cas des solides *amorphes*, dans lesquels les vibrations collectives des atomes (les phonons) sont d'une importance secondaire par rapport à un autre type de mouvements : dans ces derniers, un atome, ou un petit groupe de deux ou trois atomes, peut effectuer par effet tunnel une transition entre deux états quantiques d'énergies différentes (voir figure 1.a). Un tel atome ou groupe d'atomes se comporte donc comme un **système à deux niveaux** (on parle également de *système à états tunnel*).



The heat capacity of 'water-free' and 'wet' vitreous silica down to 25 mK. Also shown as a broken line is the Debye phonon contribution calculated from the velocities of sound (Lasjaunias *et al* 1975). ●, □, Suprasil W (<1.5 ppm OH); ○, Suprasil (1200 ppm OH); ▲, Spectrosil B (~1000 ppm OH) (Zeller and Pohl 1971).

(b)

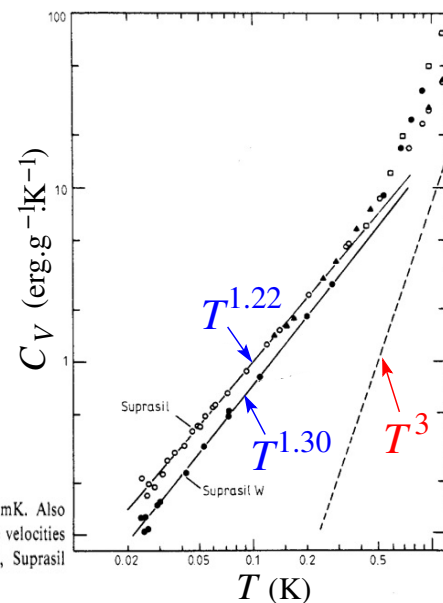


FIGURE 1 : (a) Représentation schématique d'un solide amorphe. Une petite fraction des atomes, dont l'atome en pointillé sur la figure, peut occuper deux positions alternatives. Ce sont des systèmes à deux niveaux. (b) La capacité calorifique C_V mesurée de certains verres en fonction de la température dans le régime de 0.02 à 0.5 K. Remarquer les échelles logarithmiques. Le pointillé représente la contribution à C_V provenant des phonons, calculée indirectement à partir de mesures de la vitesse du son. Figure tirée de : W. A. Philips, *Two-level states in glasses*, Rep. Progr. Phys. **59**,1657–1708 (1987).

Le solide amorphe sera assimilé ici à une collection de N systèmes à deux niveaux indépendants. Les deux énergies du n ème système sont 0 et $\varepsilon_n > 0$; les ε_n sont des *paramètres* du problème. Le solide est à l'équilibre à la température T .

1/ Donner l'expression de la fonction de partition canonique z_n du n ème système à deux niveaux. Donner ensuite la fonction de partition canonique Z du solide amorphe.

2/ Exprimer l'énergie libre F , l'énergie moyenne \overline{E}^C et la capacité calorifique $C_V = \partial \overline{E}^C / \partial T$ du solide. On écrit cette dernière sous la forme de sommes de contributions des différents systèmes à deux niveaux, $C_V = k_B \sum_{n=1}^N c(\beta \varepsilon_n)$, où $c(x)$ est une fonction sans dimension et $\beta = 1/k_B T$. Analyser les comportements limites de $c(x)$ puis tracer la soigneusement. Tracer C_V en fonction de T pour $N = 1$ (i.e. la contribution de chaque système à la capacité calorifique) et interpréter *physiquement* ses comportements limites.

Vos résultats du **1/** et du **2/** dépendent de $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$, soit d'un nombre macroscopique de paramètres que l'on ne connaît pas, ce qui empêche la comparaison avec les expériences. Dans l'ignorance, on traitera ces paramètres comme des variables aléatoires i.i.d. (= "indépendantes et identiquement distribuées") tirées d'une loi $P(\varepsilon)$ qui, elle, est supposée connue.

3/ Parenthèse mathématique.— Si y_1, y_2, \dots, y_N sont tirées indépendamment d'une loi $P(y)$, argumenter verbalement (pas plus que deux ou trois phrases bien formulées) que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(y_i) = \int dy P(y) f(y). \quad (1)$$

pour une fonction f arbitraire.

4/ Nous reprenons l'analyse du solide amorphe : considérer la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$) et écrire la capacité calorifique C_V trouvée au **2/** sous la forme d'une intégrale faisant intervenir la distribution $P(\varepsilon)$. Présenter votre résultat sous une forme qui en montre l'extensivité.

5/ Supposer que $P(\varepsilon)$ est une fonction régulière (développable en série de Taylor dans le voisinage de 0) et telle que $P(0) > 0$. Dans ces conditions, trouver le premier terme du développement basse température (c'est-à-dire en série de puissances de T) du résultat de **4/**. [Indication : pour faire ce développement, passer à la variable d'intégration $\eta \equiv \beta \varepsilon$; après développement de la fonction appropriée dans l'intégrand, on admet qu'il est licite d'intégrer terme à terme.]

6/ Considérer la figure 1.b et formuler vos conclusions.

2 Condensation de Bose-Einstein et fluctuations

A. Question de cours.— Nous considérons un ensemble de bosons sans interaction à température T et potentiel chimique μ . Nous notons ε_λ les énergies des états individuels et n_λ le facteur d'occupation (le nombre de bosons dans l'état $|\lambda\rangle$).

1/ Rappeler la définition de la fonction de grand partition Ξ . Donner sa factorisation en termes de la fonction de grand partition ξ_λ pour l'état individuel $|\lambda\rangle$. Calculer explicitement ξ_λ pour les bosons. Quelle est la contrainte sur μ ?

2/ Calculer le nombre moyen de bosons $\overline{n_\lambda}$ dans l'état individuel.

3/ La variance de n_λ est donnée par $\text{Var}(n_\lambda) = \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu}\right)^2 \ln \xi_\lambda$. Dédurre que $\text{Var}(n_\lambda)$ s'exprime comme une dérivée première de $\overline{n_\lambda}$ et montrer que $\text{Var}(n_\lambda) = \overline{n_\lambda} (1 + \overline{n_\lambda})$.

B. Condensation dans un puits harmonique.— Nous considérons un gaz d'atomes (supposés de spin nul) confinés par un potentiel harmonique isotrope de pulsation ω en trois dimensions. On choisit l'origine des énergies telle que le fondamental individuel a une énergie $\varepsilon_0 = 0$ (le premier état excité a donc une énergie $\varepsilon_1 = \hbar\omega$). La densité des états individuels est $\rho(\varepsilon) = \varepsilon^2 / [2(\hbar\omega)^3]$. On se place à la limite thermodynamique afin d'utiliser les formules grand canoniques pour décrire la situation où la température T et le nombre d'atomes N sont fixés.

1/ Décrire (de manière *synthétique*) le phénomène de condensation de Bose-Einstein.

2/ Sous la température de Bose-Einstein T_{BE} , on rappelle que le potentiel chimique peut être considéré fixé à $\mu = 0$ et que le nombre de bosons N , la température T et le nombre moyen de bosons dans le fondamental individuel \bar{n}_0 sont reliés par l'équation

$$N = \bar{n}_0(T) + \overbrace{\int_0^\infty d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} - 1}}^{\text{def } \bar{N}_e(T)} \quad \text{avec } \beta = 1/(k_B T). \quad (2)$$

Que représente $\bar{N}_e(T)$? Le calculer explicitement (utiliser l'annexe). Justifier qu'on peut écrire $\bar{n}_0(T_{\text{BE}}) = 0$. Déduire l'expression de T_{BE} en fonction de N , ω et des constantes fondamentales.

3/ Déduire l'expression de la fraction condensée $\bar{n}_0(T)/N$ en fonction de T/T_{BE} pour $T \leq T_{\text{BE}}$. Tracer la soigneusement ($\forall T \geq 0$).

4/ **Fluctuations.**— Puisque N est fixé, il n'est pas clair que l'application des formules grand canonique pour les fluctuations soit justifiée. Nous supposons néanmoins que c'est bien le cas au moins **pour les états excités**, dont les occupations sont microscopiques (i.e. nous supposons que le condensat joue le rôle de réservoir pour les bosons excités).

a/ Justifier que la variance du nombre de bosons excités est

$$\Delta N_e^2 \stackrel{\text{def}}{=} \text{Var}(N_e) = \int_0^\infty d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{e^{\beta\varepsilon}}{(e^{\beta\varepsilon} - 1)^2}. \quad (3)$$

b/ Calculer explicitement ΔN_e^2 en fonction de T , ω et des constantes fondamentales, puis en fonction de T/T_{BE} seulement. [Indication : à l'aide d'une intégration par parties, faire apparaître l'intégrale de l'annexe.]

c/ On souhaite maintenant caractériser les fluctuations du nombre de bosons dans le fondamental, $\Delta n_0^2 \stackrel{\text{def}}{=} \text{Var}(n_0)$. Justifier que $\text{Var}(n_0) = \text{Var}(N_e)$ lorsque le nombre d'atomes est fixé. Déduire l'expression de $\Delta n_0/\bar{n}_0$ en fonction de T/T_{BE} et N . Commenter. Tracer $\Delta n_0/\bar{n}_0$ en fonction de T .

ANNEXE :

$$\int_0^\infty \frac{dt t^{\alpha-1}}{e^t - 1} = \Gamma(\alpha) \zeta(\alpha) \quad \text{converge pour } \alpha > 1,$$

où $\Gamma(\alpha)$ est la fonction gamma d'Euler et $\zeta(\alpha)$ est la fonction zeta de Riemann ; $\Gamma(n+1) = n!$.

3 Ferromagnétisme itinérant et modèle de Stoner

L'aimantation d'un métal (comme par exemple le fer) a pour origine la polarisation en spin des électrons de conduction. On parle alors de *ferromagnétisme itinérant*. La polarisation du gaz est possible si l'interaction entre les électrons (Coulomb écrantée) est suffisamment forte. Nous étudions l'apparition de cet ordre ferromagnétique à $T = 0$.

A. Gaz de fermions libres sans spin.— On retrouve quelques propriétés élémentaires d'un gaz de fermions libres à température nulle et dans un volume V (à trois dimension) ; l'énergie d'un fermion est $\varepsilon_{\vec{p}} = \vec{p}^2/(2m)$. **Dans la partie A on ne prendra pas en compte la dégénérescence de spin.**

1/ Calculer $\Phi(\varepsilon)$, le nombre d'états quantiques individuels d'énergies inférieures à ε , dans l'approximation semiclassique. Déduire la densité d'états *par unité de volume*, notée $\rho(\varepsilon) = \Phi'(\varepsilon)/V$, en fonction de ε , m et \hbar .

2/ Rappeler l'expression de la distribution de Fermi-Dirac pour une température T et un potentiel chimique μ . Tracer la pour $k_B T \ll \mu$ et pour $T = 0$.

⚠ Jusqu'à la fin du problème, nous supposons que $T = 0$. ⚠

Le potentiel chimique est alors égal à l'énergie de Fermi, $\mu = \varepsilon_F$. Exprimer le nombre de fermions N en fonction de $\Phi(\varepsilon_F)$. Dédire l'expression de l'énergie de Fermi ε_F en fonction de la densité moyenne $n = N/V$.

3/ Calculer l'énergie du gaz de fermions E_0 en fonction de N et de l'énergie de Fermi ε_F . Exprimer l'énergie par unité de volume comme une fonction de la densité, $\mathcal{E}_0(n) \stackrel{\text{def}}{=} E_0/V$.

B. Électrons en interaction dans l'approximation de champ moyen.— On prend maintenant en compte le degré de liberté de spin des électrons, qui peuvent se trouver dans deux états de spin (\uparrow ou \downarrow). Dans un métal, l'interaction effective entre électrons est de très courte portée ($\sim \text{\AA}$). La supposant locale (interaction à deux corps $\propto \delta(\vec{r} - \vec{r}')$), elle n'affecte que les électrons de spins opposés, à cause du principe de Pauli. L'hamiltonien du gaz s'écrit : $\hat{H} = \hat{H}_{\text{cin}} + U \int d^3\vec{r} \hat{n}_{\uparrow}(\vec{r}) \hat{n}_{\downarrow}(\vec{r})$, où $\hat{n}_{\uparrow, \downarrow}(\vec{r})$ est la densité d'électrons de spin \uparrow, \downarrow et U une constante caractérisant la force de l'interaction entre électrons.

Dans le modèle de Stoner, on suppose *a priori* que les électrons des deux états de spin sont caractérisés par deux densités **moyennes** $n_{\uparrow} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \hat{n}_{\uparrow}(\vec{r}) \rangle$ et $n_{\downarrow} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \hat{n}_{\downarrow}(\vec{r}) \rangle$ pouvant (ou non) différer et que les deux gaz se comportent comme deux gaz libres. La densité d'énergie du gaz est donc

$$\mathcal{E}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = \frac{1}{V} \langle \hat{H} \rangle = \mathcal{E}_0(n_{\uparrow}) + \mathcal{E}_0(n_{\downarrow}) + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} \quad (4)$$

où $\mathcal{E}_0(n)$ est la fonction obtenue dans la partie **A**.

1/ Quelle est la dimension de U ? Pour caractériser l'interaction, on introduit le paramètre ℓ , défini par $U = 2(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2 \ell / (3m)$. Quelle est la dimension de ℓ ?

2/ Nous notons $n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$ la densité électronique totale. Une différence de densités, $n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$, correspond à une aimantation, proportionnelle à la polarisation

$$\mathcal{M} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}}. \quad (5)$$

Montrer que la densité d'énergie totale s'exprime comme

$$\mathcal{E}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{20} \frac{\hbar^2 n^{5/3}}{m} \left[(1 + \mathcal{M})^{5/3} + (1 - \mathcal{M})^{5/3} \right] + \frac{U n^2}{4} (1 - \mathcal{M}^2). \quad (6)$$

3/ L'idée de l'approche suivie ici est que la valeur de la polarisation \mathcal{M} n'est pas libre, mais "choisie" par le système afin de minimiser son énergie $\mathcal{E}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow})$, à n fixée. Par la suite nous supposons que la condition $\mathcal{M} \ll 1$ est réalisée.

a/ En utilisant le développement limité

$$(1 + x)^{5/3} = 1 + 5 \left(\frac{x}{3} \right) + 5 \left(\frac{x}{3} \right)^2 - \frac{5}{3} \left(\frac{x}{3} \right)^3 + \frac{5}{3} \left(\frac{x}{3} \right)^4 + \mathcal{O}(x^5),$$

écrire le développement de l'énergie jusqu'à l'ordre 4 dans la polarisation : $\mathcal{E}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) \simeq \text{cte} + c \frac{\hbar^2 n^{5/3}}{m} [a \mathcal{M}^2 + \mathcal{M}^4]$. On exprimera la constante a en termes d'une combinaison adimensionnée de ℓ et n (c est une autre constante sans dimension).

b/ Montrer que la constante a change de signe quand ℓ (i.e. l'interaction) augmente. Identifier la valeur critique du paramètre, notée ℓ_c , correspondant au cas où $a = 0$. Tracer l'allure de $\mathcal{E}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow})$ en fonction de \mathcal{M} pour $\ell < \ell_c$ et pour $\ell > \ell_c$.

c/ Dédire que lorsque ℓ varie, le système passe d'un état paramagnétique ($\mathcal{M} = 0$) à un état ferromagnétique ($\mathcal{M} \neq 0$), i.e. acquiert une aimantation spontanée (en l'absence de champ magnétique extérieur).

d/ (BONUS) Montrer que la valeur critique de l'interaction U_c (correspondant à ℓ_c) est simplement reliée à la densité d'états $\rho(\varepsilon_F)$ par unité de volume et par spin de la question **A.1** (où ε_F est l'énergie de Fermi pour le gaz non polarisé, de densité n).