Examen de Physique Statistique II

Vendredi 12 mai 2017

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 Fluctuations de l'énergie dans un gaz parfait classique

Nous étudions les fluctuations de l'énergie $\Delta E \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\text{var}(E)}$ d'un gaz parfait classique prédites dans le cadre de différents ensembles de la physique statistique. Nous considérons un gaz de N particules décrit par le Hamiltonien

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m} \qquad \text{avec } \vec{r}_i \in \text{ volume } V\,. \tag{1}$$

1/ Ensemble microcanonique.– Rappeler quelle est la situation physique décrite par l'ensemble microcanonique. Que valent les fluctuations ΔE^* dans ce cas ?

2/ Ensemble canonique.

a) À quelle situation physique correspond l'ensemble canonique ? Rappeler la définition *générale* de la fonction de partition canonique Z.

b) Comment déduire l'énergie moyenne $\overline{E}^{\text{C}}$ de Z ? (rappeler la démonstration de cette relation).

c) Justifier rapidement que $Z \propto \beta^{-3N/2}$ pour le gaz parfait classique. Calculer $\overline{E}^{\text{C}}$.

d) On donne $\left(\Delta E^{\text{C}}\right)^2 \stackrel{\text{def}}{=} \text{var}(E) = -\frac{\partial \overline{E}^{\text{C}}}{\partial \beta}$. Calculer la variance puis les fluctuations relatives $\Delta E^{\text{C}}/\overline{E}^{\text{C}}$.

3/ Ensemble grand canonique.

a) Quelle situation physique est décrite par l'ensemble grand canonique ? Donner la définition générale de la fonction de partition grand canonique Ξ.

b) Montrer que le nombre moyen de particules et l'énergie moyenne peuvent être déduits de Ξ à l'aide des relations

$$\overline{N}^{\text{G}} = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi \qquad \text{et} \qquad \overline{E}^{\text{G}} = \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{\mu}{\beta}\frac{\partial}{\partial \mu}\right) \ln \Xi\,. \tag{2}$$

c) Montrer que pour le gaz parfait classique $\Xi = \exp\left\{z\,\mathrm{e}^{\beta\mu}\right\}$, où z est la fonction de partition *pour une particule*. Justifier que $\partial z/\partial\beta = -3z/(2\beta)$. Déduire $\overline{N}^{\text{G}}$ et $\overline{E}^{\text{G}}$ en fonction de z, β et μ.

d) Calculer la variance de l'énergie, maintenant donnée par $\text{var}(E) = \left(-\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{\mu}{\beta}\frac{\partial}{\partial\mu}\right)\overline{E}^{\text{G}}$. Exprimer $\overline{E}^{\text{G}}$ et $\left(\Delta E^{\text{G}}\right)^2 \stackrel{\text{def}}{=} \text{var}(E)$ en fonction de $\overline{N}^{\text{G}}$ et k_BT. Déduire $\Delta E^{\text{G}}/\overline{E}^{\text{G}}$ en fonction de $\overline{N}^{\text{G}}$.

4/ Conclusion.– Comparer $\Delta E^*/E$, $\Delta E^{\text{C}}/\overline{E}^{\text{C}}$ et $\Delta E^{\text{G}}/\overline{E}^{\text{G}}$. Justifier physiquement pourquoi les fluctuations sont les plus grandes dans ce dernier cas. Rappeler la définition de la limite thermodynamique et commenter les résultats.

2 Gaz de photons

On étudie la thermodynamique d'un gaz de photons. Dans un premier temps, on applique (incorrectement) les résultats obtenus dans le cadre canonique pour un gaz parfait classique de particules ultrarelativistes. Dans un deuxième temps, on traitera rigoureusement l'effet du postulat de symétrisation à l'aide du formalisme grand canonique.

1/ On considère une particule libre de masse nulle, d'énergie $\varepsilon_{\vec{p}} = ||\vec{p}||c$. Montrer que la densité des états *individuels* (les ondes planes) est

$$\rho(\varepsilon) = \frac{V\, g_s}{2\pi^2(\hbar c)^3}\varepsilon^2 \qquad \text{où } g_s = 2 \tag{3}$$

est la dégénérescence de spin (pour les photons on a $s = 1$ mais $g_s = 2$ seulement, pour les deux états de polarisation).

[Indication : utiliser la règle semiclassique *ou* la représentation $\rho(\varepsilon) = \sum_\lambda \delta(\varepsilon - \varepsilon_\lambda)$.]

A. Gaz classique de particules ultrarelativistes.– On décrit le gaz de N particules comme un gaz classique dans un volume V à température T.

2/ Justifier que la fonction de partition pour une particule est donnée par $z = \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon\, \rho(\varepsilon)\, \mathrm{e}^{-\beta\varepsilon}$ puis calculer l'intégrale [exprimer le résultat en fonction de V et la longueur thermique $\lambda_T \stackrel{\text{def}}{=} \hbar c/(k_B T)$].

3/ Quelle est la fonction de partition canonique Z_N^{MB} du gaz dans l'approximation de Maxwell-Boltzmann ? Déduire l'énergie libre $F^{\text{MB}}(T, V, N)$, qu'on exprimera en fonction de N, T, de la densité $n = N/V$ et de λ_T, afin de faire ressortir la propriété d'extensivité.

4/ Déduire l'énergie moyenne du gaz $\overline{E}^{\text{C}}$, la pression p et le potentiel chimique μ (on exprimera ce dernier en fonction de $k_B T$ et du produit adimensionné $n\lambda_T^3$).

5/ Photons.– Nous appliquons ces résultats au cas des photons : pour prendre en compte la non conservation du nombre de photons, on impose $\mu = 0$. Déduire une relation entre n et λ_T (où il est admis que n s'interprète maintenant comme la densité moyenne). Utiliser cette relation pour donner l'expression de F^{MB} en fonction de T et V (et des constantes fondamentales).

B. Traitement grand canonique.

6/ On considère des particules sans interaction à température T et potentiel chimique μ. Donner la définition *générale* de la fonction de partition grand canonique pour un état individuel d'énergie ε_λ. La calculer explicitement pour les bosons, on la note ξ_λ^{B}. Rappeler quelle est la contrainte sur μ. Comment le facteur de Bose-Einstein $\overline{n}^{\text{B}}(\varepsilon)$ est-il déduit de ξ_λ^{B} ? Donner son expression et tracer son allure en fonction de ε.

7/ Exprimer le nombre moyen de bosons $\overline{N}^{\text{G}}$ et l'énergie moyenne $\overline{E}^{\text{G}}$ sous la forme d'intégrales faisant intervenir $\overline{n}^{\text{B}}(\varepsilon)$ et la densité d'états individuels $\rho(\varepsilon)$.

8/ Jusqu'à la fin du problème, nous étudions le gaz de photons pour lequel $\boxed{\boldsymbol{\mu = 0}}$. Justifier l'égalité entre grand potentiel et énergie libre : $J = F$. Calculer explicitement $\overline{N}^{\text{G}}$ et $\overline{E}^{\text{G}}$ en fonction de V et T.

[Indication : utiliser les intégrales de l'annexe.]

9/ Rappeler la définition de la pression p (les définitions canonique et grand canonique coïncident pour $\mu = 0$). On a vu en cours que si $\rho(\varepsilon) \propto \varepsilon^2$, alors $J = -(1/3)\overline{E}^{\text{G}}$. Déduire l'énergie libre F en fonction de T et V. Puis p en fonction de T et des constantes fondamentales.

10/ Montrer que l'énergie libre, l'énergie et la pression s'expriment respectivement comme $F = -\eta\,\overline{N}^{\text{G}} k_B T$, $\overline{E}^{\text{G}} = 3\eta\,\overline{N}^{\text{G}} k_B T$ et $p = \eta\, n k_B T$ où η est une constante adimensionnée dont on donnera la valeur approchée. Comparer aux résultats de la partie **A**. Quelle est l'origine physique de η ? Justifier physiquement pourquoi $\eta > 1$ ou $\eta < 1$.

3 Métal bidimensionnel

Il est possible de réaliser un *métal bidimensionnel* en piégeant un gaz d'électrons à l'interface de deux semi-conducteurs. On peut montrer que la densité des états *individuels* est une constante $\rho_0 = \mathcal{A}\, m_*/(\pi\hbar^2)$, où m_* est la masse effective et $\mathcal{A}$ la surface où évoluent les électrons.

1/ Rappeler l'expression de la distribution de Fermi-Dirac $\overline{n}^{\mathrm{F}}(\varepsilon)$ et tracer la *soigneusement* pour $\mu > 0$ et $T = 0$; puis pour $k_B T \ll \mu$ sur le même graphe.

2/ Rappeler l'expression grand canonique du nombre moyen de fermions $\overline{N}^{\mathrm{G}}$ comme une intégrale faisant intervenir $\overline{n}^{\mathrm{F}}(\varepsilon)$. En remarquant que $1/\big(\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1\big) = \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}/\big(1+\mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon-\mu)}\big)$, calculer explicitement cette intégrale.

3/ On se place à la limite thermodynamique, i.e. $\overline{N}^{\mathrm{G}} \to N$: déduire le potentiel chimique en fonction de T et de la densité $n = N/\mathcal{A}$. Déduire que l'énergie de Fermi est donnée par $\varepsilon_F \equiv k_B T_F = \pi\hbar^2 n/m_*$. Exprimer $\mu(T,n)$ en fonction de $k_B T$ et T/T_F seulement. Tracer $\mu(T,n)$ en fonction de T et justifier que l'on pourra considérer $\mu(T,n) \simeq \varepsilon_F$ tant que $T \ll T_F$.

4/ A.N. : on considère un gaz à une interface GaAs/GaAlAs. La masse effective des électrons est $m_* = 0.067\, m_e$ et la densité $n = 4.5 \times 10^{15}\ \mathrm{m}^{-2}$. Déduire la température de Fermi T_F en Kelvin. Dans quel régime se trouve le gaz à $T = 300\,\mathrm{K}$? Et dans un cryostat à $T = 1\,\mathrm{K}$?

5/ Exprimer l'énergie moyenne $\overline{E}^{\mathrm{G}}$ comme une intégrale. On se place à la limite thermodynamique et on note l'énergie $\overline{E}^{\mathrm{G}} \to E(T,N)$ (la dépendance en $\mathcal{A}$ est implicite). Montrer que

$$E(T,N) = \frac{1}{2} N \varepsilon_F \left[1 + \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2 + \mathcal{O}(T^4)\right] \qquad \text{pour } T \ll T_F \tag{4}$$

[Indication : utiliser la formule de Sommerfeld de l'annexe.]

6/ Déduire la capacité calorifique C_V pour $T \ll T_F$, exprimée en fonction de $N k_B$ et de T/T_F. Justifier physiquement le résultat et comparer au résultat qu'on aurait obtenu pour $T \gg T_F$.

7/ [Bonus] En utilisant $C_V = T\frac{\partial S^{\mathrm{C}}}{\partial T}$, où $S^{\mathrm{C}}(T,N)$ est l'entropie canonique, justifier que $S^{\mathrm{C}} \simeq C_V$. On introduit l'énergie d'excitation $E^* \stackrel{\mathrm{def}}{=} E(T,N) - E(0,N)$. Exprimer T/T_F en fonction de $E^*/(N\varepsilon_F)$. Déduire l'expression de l'entropie microcanonique $S^*(E^*,N)$. Déduire le comportement dominant de la densité des états du gaz fermionique. Comparer à la densité d'états décrivant un gaz classique $\rho_{\mathrm{class}}(E,N) = \frac{\mathcal{A}^N}{(N!)^2}\left(\frac{m_* E}{2\pi\hbar^2}\right)^N$.

Annexe

- Intégrales :

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty \mathrm{d}t\, t^{z-1}\,\mathrm{e}^{-t} \qquad \text{avec } \Gamma(n) = (n-1)!$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{x^{\alpha-1}}{\mathrm{e}^x - 1} = \Gamma(\alpha)\,\zeta(\alpha) \qquad \text{avec } \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} \simeq 1.645\ ,\ \ \zeta(3) \simeq 1.202\ ,\ \ \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90} \simeq 1.082\ , \ldots$$

- Développement de Sommerfeld : soit une fonction $\varphi(\varepsilon)$ régulière,

$$\int^\infty \mathrm{d}\varepsilon\, \varphi(\varepsilon)\, \overline{n}^{\mathrm{F}}(\varepsilon) \underset{T\to 0}{=} \int^\mu \mathrm{d}\varepsilon\, \varphi(\varepsilon) + \frac{\pi^2}{6}\varphi'(\mu)\,(k_B T)^2 + \mathcal{O}(T^4)$$

- Constantes : $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K, $\hbar = 10^{-34}$ J.s, $|q_e| = 1.6 \times 10^{-19}$ C et $m_e = 10^{-30}$ kg.

Solutions sur la page du cours : cf. `http://lptms.u-psud.fr/christophe_texier/`