

Exercice 1: Propriétés générales

On considère un système de N particules identiques. On suppose que les N particules sont indépendantes et que la seule interaction qu'elles subissent est un effet de confinement à l'intérieur d'une boîte rectangulaire (à deux dimensions, $d = 2$) ou cubique (à trois dimensions, $d = 3$) de côté L . On notera $V = L^d$ la surface ou le volume totale de la boîte, qu'on supposera toujours très grande, $V \rightarrow \infty$.

1. Ecrire l'équation de Schrödinger pour les fonctions d'onde stationnaires d'une particule quantique de masse m . Quelles sont les solutions, et les énergies ϵ associées, si l'on applique des conditions aux limites strictes aux bords de la boîte ? Même question pour des conditions aux limites périodiques.
2. Les solutions de l'équation de Schrödinger sont caractérisées par des nombres quantiques k_x, k_y, k_z qui sont liés à la quantité de mouvement de la particule (à deux dimensions k_z n'est pas présent). La densité d'états $\rho(\epsilon)$ est donnée par le nombre d'états quantiques qui se trouvent dans un petit intervalle d'énergie $\Delta\epsilon$. Montrer que si on définit

$$\rho(\epsilon) = \sum_{k_x, k_y, k_z} \delta(\epsilon - \epsilon(k_x, k_y, k_z)) , \quad (1)$$

où $\delta(x)$ est la distribution delta de Dirac, on trouve que

$$\mathcal{N}(\epsilon, \Delta\epsilon) = \int_{\epsilon}^{\epsilon+\Delta\epsilon} d\epsilon' \rho(\epsilon') \quad (2)$$

donne bien le nombre d'états quantiques dont l'énergie se trouve dans l'intervalle $[\epsilon, \epsilon+\Delta\epsilon]$.

3. Montrer que dans la limite $V \rightarrow \infty$, on peut transformer la somme sur k_x, k_y, k_z en intégrale sur un vecteur \vec{k} et on obtient par exemple (à trois dimensions et avec conditions au bord périodiques):

$$\rho(\epsilon) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x dk_y dk_z \delta(\epsilon - \epsilon(k_x, k_y, k_z)) . \quad (3)$$

Trouver les formules analogues pour les autres cas (conditions strictes, deux dimensions).

4. En utilisant les formules précédentes, calculer la densité d'états $\rho(\epsilon)$ à $d = 2, 3$. On considérera les deux types de conditions aux limites et on supposera que la particule a un spin S . Montrer que dans les deux cas, on trouve

$$\begin{aligned} \rho(\epsilon) &= \frac{Vmg}{2\pi\hbar^2} , & d = 2 \\ \rho(\epsilon) &= \frac{Vm^{3/2}g}{\sqrt{2\pi^2}\hbar^3} \sqrt{\epsilon} , & d = 3 \end{aligned} \quad (4)$$

où g est la dégénérescence de spin.

5. Rappeler l'expression de la fonction $N_F(\epsilon)$ de Fermi-Dirac, qui exprime la probabilité qu'un niveau d'énergie ϵ soit occupé par un fermion quand la température du système est T et son potentiel chimique μ . On notera $\beta = 1/(k_B T)$ où k_B désigne la constante de Boltzmann. Représenter son allure pour différentes valeurs de la température, et montrer que son graphe est symétrique par rapport au point $(\mu, 1/2)$.
6. Rappeler l'expression de la fonction $N_B(\epsilon)$ de Bose-Einstein, qui exprime la probabilité qu'un niveau d'énergie ϵ soit occupé par un boson quand la température du système est T et son potentiel chimique μ .

7. Montrer que pour un système de volume fini, le nombre moyen de particules dans l'ensemble grand-canonique est donné par

$$N = \sum_{k_x, k_y, k_z} \frac{1}{e^{\beta \left(\frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} - \mu \right)} - 1} . \quad (5)$$

Tracer la fonction $N(\mu)$. Si on fixe le nombre de particules (ensemble canonique), quelle condition fixe le potentiel chimique μ en fonction de N ? Montrer que si le volume V est fini, on a $\mu < 0$ quel que soit N pour un gaz parfait de bosons.

Exercice 2 : Gaz parfait de bosons et fermions à deux dimensions

On considère dans cet exercice un système de particules confinées à la surface d'un solide, donc à dimension $d = 2$. On suppose pour l'instant que les particules n'ont pas de spin.

1. Calculer μ en fonction de la densité superficielle $n = N/V$ et de la température T , pour les bosons et les fermions, dans la limite $V \rightarrow \infty$. Montrer que

$$\mu = T \log [\mp (1 - \exp(\pm T_0(n)/T))] \quad (6)$$

le signe supérieur étant pour les fermions, et donner l'expression de $T_0(n)$. Tracer dans les deux cas la courbe représentant μ en fonction de T , à n fixé.

2. Pour les bosons, tracer la courbe représentant μ en fonction de n , à T fixé. Montrer que l'hypothèse $\mu < 0$ est vérifiée pour toute valeur finie de n et que $\mu \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow \infty$. En conclure que *le phénomène de condensation de Bose-Einstein ne se produit pas à deux dimensions*. En utilisant cette expression, écrire l'énergie du gaz pour $T \gg T_0$ et pour $T \ll T_0$ en utilisant l'égalité $\int_0^\infty dx \frac{x}{e^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}$. Commenter les deux résultats.

Exercice 3 : Electrons à la surface d'un solide

On considère maintenant un système de N électrons (fermions de spin 1/2) à la surface d'un solide.

1. Expliciter la valeur du niveau de Fermi ϵ_F , limite du potentiel chimique à température nulle, en fonction de la densité électronique de surface $n = N/V$. Sachant que l'ordre de grandeur de n dans un solide est $\sim \text{\AA}^{-2}$, retrouver l'ordre de grandeur de ϵ_F . Définir une échelle de température T_F associée au niveau de Fermi et la comparer aux températures usuelles. Comparer T_F à la température T_0 définie dans l'exercice 2.
2. On suppose dans cette question que $T = 0$. Quelle est la vitesse maximale d'une particule du gaz ? Quelle condition doit satisfaire la densité superficielle n pour que les formules non relativistes utilisées ici soient valables ? Préciser numériquement cette condition pour des électrons, en estimant leur nombre par \AA^2 ; quel est l'ordre de grandeur correspondant de la température de Fermi ? Comparez avec la densité superficielle d'un solide; qu'en concluez-vous ?
3. On suppose dans cette question que $T = 0$. Quelle est l'énergie totale E_0 des N électrons ? Comment peut-on définir une pression pour ce système de particules ? La calculer, ainsi que le module de compression $-V \left. \frac{\partial p}{\partial V} \right|_N$. Montrer que $p = E_0/V$.

4. On s'intéresse maintenant au régime des basses températures, et l'on cherche un développement systématique (dit développement de Sommerfeld) en puissances de la température d'intégrales du type

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon N_F(\epsilon) g(\epsilon) , \quad (7)$$

où g est une fonction régulière arbitraire. On sépare la valeur à $T = 0$ en réécrivant cette expression comme

$$I = \int_{-\infty}^{\mu} d\epsilon g(\epsilon) + \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \hat{f}(\epsilon) g(\epsilon) . \quad (8)$$

Expliciter \hat{f} et tracer son allure pour différentes températures. En déduire le développement

$$I = \int_{-\infty}^{\mu} d\epsilon g(\epsilon) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\mu) + \dots , \quad (9)$$

en utilisant l'égalité $\int_0^{\infty} dx \frac{x}{1+e^x} = \frac{\pi^2}{12}$. Quelle est la forme de la suite du développement ?

5. Déterminez le comportement de la chaleur spécifique à l'ordre le plus bas en température. Vous appliquerez pour cela le développement de Sommerfeld au calcul du nombre de particules et de l'énergie, et vous utiliserez l'expression du potentiel chimique obtenue en précédente.
6. Que donne le développement de Sommerfeld si on l'applique au calcul du potentiel chimique μ ? Peut-on comprendre cette anomalie à partir de l'expression exacte de μ obtenue en précédente ?

Exercice 4 : Gaz parfait de bosons à trois dimensions

On considère maintenant un gaz de bosons sans spin à trois dimensions, et on discutera le phénomène de condensation de Bose-Einstein. Il sera utile d'introduire la *fugacité* $z = e^{\beta\mu}$. Vous serez amenés à utiliser les fonctions suivantes:

$$g_\ell(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\ell} = \frac{1}{\Gamma(\ell)} \int_0^\infty \frac{x^{\ell-1} dx}{z^{-1}e^x - 1}, \quad (10)$$

appelées quelquefois fonctions polylogarithmiques. Vous aurez à envisager les valeurs $\ell = 3/2$ et $5/2$. Pour $z \ll 1$, $g_\ell(z) \simeq z$, mais vous aurez surtout besoin d'examiner le comportement de $g_\ell(z)$ quand $z \rightarrow 1^-$. Pour $\ell > 1$, $g_\ell(1) = \zeta(\ell)$, où ζ est la fonction de Riemann, ce qui donne $g_{3/2}(1) = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \simeq 2,612$ et $g_{5/2}(1) = \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \simeq 1,342$. On rappelle que $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \sqrt{\pi}/2$ et que $\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = 3\sqrt{\pi}/4$.

1. Dans la limite $V \rightarrow \infty$ et en supposant que $\mu < 0$, montrer que la condition qui lie μ à la densité $n = N/V$ et à la température T est

$$n = \frac{1}{\Lambda^3} g_{3/2}(z). \quad (11)$$

où Λ est la longueur d'onde thermique. Tracer de façon schématique la courbe représentant n en fonction de μ , à T fixé, et comparer avec le résultat obtenu à deux dimensions. Montrer que à trois dimensions n reste fini quand $\mu \rightarrow 0$ et trouver la valeur de densité n_c qui correspond à la limite $\mu \rightarrow 0$. Ceci semble conduire à une contradiction, parce que aucune valeur de μ ne correspond aux densités $n > n_c$.

2. Cette contradiction apparente nous amène à réfléchir mieux aux hypothèses qu'on a fait. Quand on augmente la densité et on approche la limite $n \rightarrow n_c^-$, on trouve que $\mu \rightarrow 0^-$, ce qui contredit l'hypothèse qu'on a fait pour trouver l'équation (11). Répéter donc le calcul de la densité en fonction du potentiel chimique qu'on a fait au point 1 toujours en considérant V très grand, mais maintenir séparée la contribution de l'état fondamental. Montrer qu'on trouve la condition

$$n = \frac{1}{V} \frac{1}{1-z} + \frac{1}{\Lambda^3} g_{3/2}(z). \quad (12)$$

En déduire qu'il y a un problème d'échange de limites entre $V \rightarrow \infty$ et $\mu \rightarrow 0$.

3. Sachant que pour $z \rightarrow 1^-$ on a $g_{3/2}(z) = g_{3/2}(1) - C\sqrt{1-z}$, montrer que pour V très grand:

$$z(n, T) = \begin{cases} z_0(n, T), & n < n_c, \\ 1 - \left(\frac{\Lambda^3}{CV}\right)^{2/3}, & n = n_c, \\ 1 - \frac{1}{V(n-n_c)}, & n > n_c. \end{cases} \quad (13)$$

où $z_0(n, T)$ est la solution de l'équation (11). Tracer de façon schématique la courbe représentant z en fonction de n . Discuter la limite $V \rightarrow \infty$.

4. Déduire du résultat précédent que le nombre de bosons dans l'état fondamental est donné par $N_0 = V(n - n_c)$ pour $n > n_c$, et donc diverge quand $V \rightarrow \infty$. On appelle ce phénomène *condensation de Bose-Einstein*.
5. A chaque température T , on trouve une densité critique $n_c(T)$. Donner l'expression de $n_c(T)$. On définit une température critique $T_c(n)$ à travers de l'inversion de cette relation. Donner l'expression de $T_c(n)$. Tracer le diagramme de phase du gaz dans le plan (n, T) .

6. Dans la même approximation qui conduit à l'équation (12), calculez l'expression de la fonction de partition grand canonique au dessus et en dessous de T_c . En déduire l'expressions du grand potentiel

$$\Omega = T \log(1 - z) - \frac{TV}{\Lambda^3} g_{5/2}(z) , \quad (14)$$

de la pression, de l'énergie interne, et de l'entropie du système. Discutez les limites de haute et basse température.

7. Quelle est la différence avec le rayonnement du corps noir vu en travaux dirigés?
8. Recherche personnelle: quelles sont les réalisations expérimentale de cette “condensation de Bose-Einstein” ? A quelles densités et températures correspondent-elles ? Comparer avec l'expression de $T_c(n)$ qu'on a trouvé pour le gaz parfait.