

Physique Statistique

Corrigé de la petite classe n°4

Gaz de Bose et de Fermi

1 Le gaz de bosons bidimensionnel

1. La densité d'états se calcule de manière analogue à la densité d'états tridimensionnelle vue dans le cours. Dans l'espace des vecteurs d'onde (k_x, k_y) , le nombre d'états compris dans un volume élémentaire est :

$$d^2n = \frac{dk_x}{\frac{2\pi}{L_x}} \times \frac{dk_y}{\frac{2\pi}{L_y}} = L_x L_y \frac{d^2k}{4\pi^2} = \frac{S}{4\pi^2} d^2k$$

En utilisant l'impulsion plutôt que le vecteur d'onde, cette expression devient :

$$d^2n = \frac{S}{4\pi^2\hbar^2} d^2p$$

En utilisant l'expression de l'énergie cinétique $E = p^2/2m$ et en passant à une densité isotrope, on intègre sur toutes les orientations possibles dans l'espace (p_x, p_y) :

$$dn = \frac{S}{4\pi^2\hbar^2} 2\pi p dp = \frac{S}{2\pi\hbar^2} p dp = \frac{S}{2\pi\hbar^2} d(mE) = \frac{mS}{2\pi\hbar^2} dE$$

La densité d'états est donc constante en fonction de l'énergie, et l'espacement entre niveaux d'énergie est donné par définition par l'inverse de cette densité :

$$\delta E = \frac{dE}{dn} = \frac{2\pi\hbar^2}{mS}$$

Si l'on prend un échantillon macroscopique où $S = 1 \text{ cm}^2 = 10^{-4} \text{ m}^2$, pour des bosons de masse $m = 4 \text{ GeV}/c^2$, l'ordre de grandeur de δE est alors :

$$\delta E \approx \frac{6 \times 10^{-68} \times (3.10^8)^2}{(1,6.10^{-19})^2 \times 4.10^9 \times 10^{-4}} \approx 5 \times \frac{10^{-52}}{10^{-33}} = 5.10^{-19} \text{ eV}$$

Cette valeur extrêmement faible justifie l'utilisation d'une densité d'états continue, à condition que l'on soit à une température T telle que $k_B T > \delta E$, ce qui correspond à une température supérieure à :

$$T_{\min} = \frac{\delta E}{k_B} = \frac{5.10^{-19} \times 1,6.10^{-19}}{1,4.10^{-23}} \approx 6.10^{-15} \text{ K}$$

ce qui est une température inatteignable avec les techniques actuelles.

2. Les états quantiques tridimensionnels sont des états produits. Il s'agit d'un gaz bidimensionnel si le confinement dans la troisième dimension ne laisse subsister qu'un seul niveau, et que la température ne permet pas d'explorer les niveaux supérieurs. Or le deuxième niveau d'énergie dans un puits unidimensionnel de largeur ε est :

$$\delta E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{\varepsilon} \right)^2$$

Donc la condition s'écrit : $k_B T \ll \delta E_1$ soit $T \ll \frac{\hbar^2}{2mk_B} \left(\frac{2\pi}{\varepsilon} \right)^2$

3. La relation entre N et μ s'obtient en intégrant la densité d'états avec le facteur de Bose-Einstein :

$$N = \int_0^{+\infty} \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} - 1} \frac{dn}{dE} dE = \frac{mS}{2\pi\hbar^2} \int_0^{+\infty} \frac{dE}{e^{\beta(E-\mu)} - 1} = \frac{mS}{2\pi\hbar^2} \left[\frac{1}{\beta} \ln \left(1 - e^{-\beta(E-\mu)} \right) \right]_0^{+\infty}$$

$$= -\frac{mS}{2\pi\hbar^2} \frac{\ln(1 - e^{\beta\mu})}{\beta}$$

En introduisant la longueur Λ_{th} donnée dans l'énoncé, cette relation devient :

$$N = -\frac{S}{4\pi\Lambda_{\text{th}}^2} \ln(1 - e^{\beta\mu})$$

Nous avons affaire à des bosons donc $\mu < 0$, ce qui est cohérent avec l'expression ci-dessus.

4. Lorsque la température tend vers 0, alors $\beta \rightarrow +\infty$. Pour conserver un nombre de bosons donné, le potentiel chimique μ doit alors tendre vers 0 par valeur négative. Le nombre de bosons $N(\beta)$ peut prendre toutes les valeurs possibles, en fonction de μ , ce qui est très différent du cas tridimensionnel où $N(\mu)$ est borné même quand μ tend vers 0^- .
5. Comme la densité d'états continue offre suffisamment d'états pour les bosons, quelle que soit la température (la fonction $N(\mu)$ n'est pas bornée à β fixé), il n'y a pas de condensation de Bose-Einstein, à l'inverse du cas tridimensionnel.

2 Semiconducteurs à impuretés

1. La statistique de Fermi-Dirac s'applique aussi bien aux électrons piégés qu'aux électrons libres. Il n'est pas utile de repartir de la grande fonction de partition : l'hypothèse d'électrons indépendants (hypothèse implicite dès lors qu'on parle d'énergie individuelle, négative pour les électrons et positive pour les électrons libres) suffit. La probabilité d'occupation des pièges (énergie $E = -E_d$) vaut donc :

$$\frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1} = \frac{1}{\exp\left(-\frac{E_d+\mu}{k_B T}\right) + 1}$$

et le nombre N_p d'électrons piégés est relié au nombre total N par :

$$N_p = \frac{N}{\exp\left(-\frac{E_d+\mu}{k_B T}\right) + 1}$$

Comme les électrons libres (en nombre N_l) ne représentent qu'une petite fraction des électrons ($N_l \ll N$), on a donc $N_p \approx N$ d'où l'on conclut que le potentiel chimique μ satisfait la condition $\exp\left(-\frac{E_d+\mu}{k_B T}\right) \ll 1$.

2. La statistique de Fermi s'applique évidemment aussi aux électrons libres d'énergie $E > 0$; la probabilité d'occupation d'un tel état vaut donc :

$$p(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) + 1},$$

mais, comme ici μ est négatif et tel que $\exp\left(-\frac{\mu}{k_B T}\right) \gg 1$, alors, a fortiori, l'exponentielle domine le dénominateur dans $p(E)$ et la probabilité d'occupation est quasiment égale à :

$$p(E) \simeq \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$

Les deux conditions que nous avons imposées au potentiel chimique ne sont pas contradictoires ; nous le vérifierons a posteriori.

3. Le calcul du nombre d'électrons libres se fait, comme dans le cours, au moyen de la densité d'états $g(E)$ et de la probabilité d'occupation $p(E)$:

$$N_l = \int_0^{+\infty} p(E) g(E) dE = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m_e^3} \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) \int_0^{+\infty} \sqrt{E} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) dE .$$

En posant dans l'intégrale $x = E/k_B T$ et en utilisant l'intégrale définie donnée dans l'énoncé, on obtient finalement :

$$\frac{N_l}{N} = \frac{V}{4N} \left(\frac{2m_e k_B T}{\pi \hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) = \left(\frac{k_B T}{E_0}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right)$$

en introduisant l'énergie $E_0 = \frac{\pi \hbar^2}{2m_e} \left(\frac{4N}{V}\right)^{2/3}$, qui est de l'ordre de l'énergie de Fermi d'un vrai conducteur.

4. En partant de l'expression de N_p trouvée à la première question, on obtient une autre expression de $N_l = N - N_p$:

$$N_l = \frac{\exp\left(-\frac{E_d + \mu}{k_B T}\right)}{\exp\left(-\frac{E_d + \mu}{k_B T}\right) + 1}$$

mais le dénominateur est presque égal à 1 puisque $N_p \approx N$ et $N_l \ll N$. Par conséquent, on a :

$$N_l \simeq N \exp\left(-\frac{E_d + \mu}{k_B T}\right)$$

En comparant cette expression de N_l à celle trouvée à la troisième question, on arrive à une équation qui donne le potentiel chimique μ :

$$\frac{N_l}{N} = \exp\left(-\frac{E_d + \mu}{k_B T}\right) = \left(\frac{k_B T}{E_0}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{\mu}{k_B T}\right) ,$$

d'où

$$\exp\left(\frac{2\mu}{k_B T}\right) = \left(\frac{k_B T}{E_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_d}{k_B T}\right) ,$$

soit, en passant au logarithme :

$$\mu = -\frac{1}{2}E_d + \frac{3}{4}k_B T \ln\left(\frac{E_0}{k_B T}\right)$$

Le second terme est de l'ordre de $k_B T \ll E_d$. On vérifie donc que μ est proche de $-E_d/2$, ce qui satisfait à la fois aux deux conditions posées a priori :

- $\exp\left(\frac{-\mu}{k_B T}\right) \gg 1$ (car $E_d \gg k_B T$) ;
- $\exp\left(-\frac{E_d + \mu}{k_B T}\right) \ll 1$ (car $E_d + \mu \approx +E_d/2 \gg k_B T$).

5. En reportant l'expression de μ dans celle de N_l/N , on obtient la variation du nombre d'électrons libres (ceux qui sont responsables de la conduction) en fonction de la température :

$$N_l = N \left(\frac{k_B T}{E_0}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{E_d}{2k_B T}\right)$$