ENS Lyon
Magistère de Sciences Physiques
1999-2000

Examen de Mécanique Statistique
PCWH

Mécanique Statistique
Jeudi 18 janvier 2001

1 Oscillateurs harmoniques, solides et corps noir.

a) Un oscillateur harmonique possède des niveaux d'énergie quantifiés selon la relation: $\epsilon_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, avec $n = 0, 1, 2, ...$, et où ω représente la pulsation propre de l'oscillateur.

- Exprimer la fonction de partition Z, l'énergie interne et la chaleur spécifique de l'oscillateur.
- Identifier les limites classique et quantique puis définir une température caractéristique T_c séparant les deux regimes.

b) Le modèle de Debye rend compte du comportement de la chaleur spécifique d'un solide à basse température. Il consiste à modéliser les vibrations d'un solide de N atomes, de dimension d, par un système de dN oscillateurs indépendants, correspondent aux dN modes propres du système répartis selon la densité d'état (nombre d'oscillateurs par unité de ω):

$$g(\omega) = B_d \ \omega^{d-1}. \tag{1}$$

Une façon simple de réproduire les résultats expérimentaux est de remplacer la chaleur spécifique d'un oscillateur de pulsation ω par le comportement illustré sur la figure 1.

- Cette approximation vous paraît-elle justifiée ?
- Dans le cadre de cette approximation, établir, qu'à basse température:

$$C_v \approx k_B \frac{B_d}{d} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^d = dNk_B \left(\frac{T}{T_D}\right)^d, \tag{2}$$

  T_D définissant la température de Debye.
- Trouver alors l'expression du nombre N_{c1} d'oscillateurs restant classiques à la température T.

c) L'émission d'un corps noir peut être analysée en terme de modes propres d'oscillation. L'énergie électromagnétique ϵ_n d'un mode de pulsation ω est telle que: $\epsilon_n = \hbar\omega n, \quad n = 0, 1, 2$. La densité d'état, pour une cavité cubique de volume V, s'exprime: $g(\omega) = \frac{V\omega^2}{\pi^2 c^3}$.

- Trouver l'expression de l'énergie libre $F(T, V)$ du rayonnement.
- Déterminer la pression P, l'entropie S, l'énergie interne U et la chaleur spécifique à volume constant C_V du rayonnement.
- Le densité volumique d'énergie spectrale $u(T, \omega)$ présente un maximum pour une pulsation $\omega_{max} \sim k_B T/\hbar$ (coefficient de proportionnalité $a = 2,82$).
  Expliquer qualitiativement ce résultat.
  Déterminer ω_{max} pour $T = 6000$ K et commenter ce résultat.
- Trouver l'expression du nombre N_{c2} de modes se comportant classiquement à la température T.
- À $T = 300$ K, comparer le N_{c2} d'une cavité cubique de coté $L = 3$ cm à celui relatif aux vibrations d'un cristal de diamant même coté (soit, sensiblement une mole de diamant).
  Doit-on prendre en compte la radiation électromagnétique dans les bilans énergétique de ce diamant ?

Formulaire:

$$\int_0^\infty x^2 \ln(1 - \exp(-x))dx = -\frac{\pi^4}{45}, \tag{3}$$

$T_D(\text{diamant}) = 1950$ K,
$\hbar \sim 10^{-34}$ J·s,
$N_{Avogadro} \sim 10^{24}$,
Célérité de la lumière: $c = 3 \times 10^8$ m/s,
Constante de Boltzmann: $k_B \sim 10^{-23}$ J/K.

2 Statistiques de Fermi.

a) Paramagnétisme de Pauli Les électrons possèdent un moment magnétique $\vec{\mu}_B$, quantifié dans la direction $\hat{\underline{z}}$ selon: $\vec{\mu}_B = \pm\mu_B\hat{\underline{z}}$. En présence de champ magnétique $\vec{B} = B\hat{\underline{z}}$ les électrons acquière une énergie magnétique $\mp\mu_B B$ correspondant au moment aligné parallèlement ou anti-parallèlement au champ, et possèdent donc une énergie totale:

$$E = \epsilon \mp \mu_B B, \tag{4}$$

où ϵ désigne l'énergie cinétique.
Dans l'approximation des électrons libres, et en absence de champ, la densité des "cellules" translationnelles s'écrit $g(\epsilon) = \alpha\ \epsilon^{1/2}$. Chaque cellule est doublement dégénérée et contient les 2 états quantiques ($\pm\mu_B\hat{\underline{z}}$). Les électrons obéissent au principe d'exclusion de Pauli et suivent donc la statistique de Fermi-Dirac.

- Justifier que l'énergie totale d'un système de N électrons à $T = 0$ n'est pas nulle. Définir l'énergie de Fermi, ϵ_F et exprimer $\alpha(N, \epsilon_F)$.

- En présence du champ B la dégénéréscence entre $\pm\mu_B\hat{\underline{z}}$ est levée.
  Tracer la densité d'états $g^{\pm}(E)$ pour les électrons avec spin parallèle et antiparallèle au champ.
  Trouver les expressions des nombres N^+ et N^- d'électrons de spin parallèle et antiparallèle.

- Trouver une expression approximative du moment magnétique M et de la susceptibilité χ des électrons ($\mu_B B/k_B \sim 1K$ par Testla).

- À basse température, pour un composé paramagnétique isolant, on trouve $\chi = N\mu_B^2/k_B T$.
  Expliquer qualitativement la différence entre les deux expressions.

b) Niveaux donneurs dans un semiconducteur. Dans un semiconducteur, les impuretés (donneurs) créent des sites électroniques localisés spatialement. On peut traiter ces états pratiquement comme des "cellules" (localisées dans l'espace-k) pour les électrons libres, dont nous avons parlé en cours. Chaque site localisé est composé de deux états quantiques avec spin "up" et spin "down" et le système peut accueillir un électron dans chaque état quantique. Ici, il faut de plus prendre en compte l'interaction de coulombienne U entre deux électrons occupant le même site.

Un semiconducteur contient n_d sites, ayant chacun une énergie associée ϵ_d et une énergie d'interaction U entre deux électrons. Le cristal joue le rôle de réservoir d'électrons et les donneurs peuvent être étudiés dans l'ensemble grand canonique.

TSVP ....

- Exprimer la grande fonction de partition $\Phi(T, \mu)$ et former l'expression du nombre moyen f d'électrons sur un site.
  Calculer le nombre moyen d'électrons dans la bande de donneurs.

- Montrer que, dans la limite $U \to \infty$,

$$f = \frac{1}{\frac{1}{2} \exp \beta(\epsilon_d - \mu) + 1}. \tag{5}$$

- Montrer que, dans la limite $U \to 0$,

$$f = \frac{2}{\exp \beta(\epsilon_d - \mu) + 1}. \tag{6}$$

  Commenter cette dernière expression.