

Mécanique Statistique Jeudi 23 janvier 2003

1 Modèle pour des verres-système à deux niveaux.

La figure 1 représente la chaleur spécifique à basse température d'un matériau amorphe (vitreux), GeO_2 . Dans le région, $T < 10^0 K$ les données s'éloignent de la courbe $C_V \sim T^3$ pour suivre un comportement approximativement linéaire en T .

FIG. 1 – Chaleur spécifique de GeO_2 vitreux (ref : Zeller and Pohl, Phys. Rev. B, **4**, 2029, 1971).

Une image simpliste des systèmes vitreux implique des excitations de basse énergie qui ne sont pas des “phonons”, mais plutôt des amas localisés de molécules qui peuvent se transformer entre deux états localement stable, séparés par une énergie ϵ . Un résultat du désordre structural est que la différence d'énergie ϵ est différente pour chaque amas identifiable. Dans cette première question nous allons étudier le comportement d'un système de N amas à deux niveaux présentant une dispersion des valeurs de ϵ .

1.1 un amas à deux niveaux

Un amas possède deux niveaux d'énergie, 0 et ϵ , supposés non dégénérés.

(a) Calculer la fonction de partition Z , l'énergie moyenne à l'équilibre $\bar{\epsilon}$ et la contribution de l'amas à la chaleur spécifique C_V , en fonction de la température.

(b) Définir une température T_c caractérisant le comportement de C_V . Tracer $C_V(T)$ en fonction de T/T_c et interpréter le résultat. Identifier le comportement asymptotique à haute et à basse température. Montrer que C_V approche zéro dans ces deux limites.

(c) Donner deux valeurs caractéristiques (ordres de grandeur) permettant de caractériser

- la valeur typique de $C_V(T)$
- la largeur à mi hauteur de $C_V(T)$.

(d) Comparer, à basse et à haute température, le comportement de cet amas avec celui d'un oscillateur harmonique de fréquence $\omega = \epsilon/\hbar$.

1.2 Un système vitreux

Considérons un système constitué par N amas à deux niveaux. La distribution décrivant la dispersion des niveaux (densité d'états) est de la forme :

$$\begin{aligned} g(\epsilon) &= \alpha = \text{const.}, \epsilon < \epsilon_0 \\ &= 0 \quad \epsilon > \epsilon_0. \end{aligned} \quad (1)$$

On rappelle que $g(\epsilon)$ est définie par le fait que le nombre dN d'amas qui ont une énergie d'excitation comprise entre ϵ et $\epsilon + d\epsilon$ est $g(\epsilon)d\epsilon$.

- (a) Exprimer α en fonction de ϵ_0 et N .
- (b) Trouver l'expression de la chaleur spécifique du système.
- (c) Montrer que, pour $T \ll T_0 = \epsilon_0/k_B$

$$C_V = \gamma N k_B \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (2)$$

où γ est une constante définie par

$$\gamma = \int_0^\infty \frac{x^2 \exp(x)}{(\exp(x) + 1)^2} dx, \quad (3)$$

en accord qualitatif avec l'expérience.

(d) A haute température, la chaleur spécifique de notre système modèle approche zero. Calculer le comportement asymptotique, exprimé en fonction de T_0 . Tracer l'allure de la courbe $C_V(T)$.

2 Gaz de Bosons ultra-relativistes

On considère un gaz parfait de Bosons (spin $S = 0$) ultra relativiste, C'est à dire, que leur vitesse est de l'ordre de c , la vitesse de la lumière. Dans cette limite, l'énergie cinétique s'écrit $\epsilon = pc$, où p est le module de la quantité de mouvement.

Les particules sont confinées dans une boîte cubique de côté L et elles sont caractérisées par une "vecteur d'onde" $\vec{k}$ prenant des valeurs discrètes suivant chaque axe : $k_x = \pi/Ln_x$, $n_x = 0, 1, 2, 3, \dots$. Le densité d'états pour ces "cellules" d'une particule est $f(k) = V k^2 / 2\pi^2$, où $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ et V est le volume et k le module du vecteur d'onde.

(a) Calculer la densité d'états des cellules en fonction de l'énergie, $g(\epsilon)$, pour une particule ultra-relativiste.

(b) Définir un microétat pour un gaz parfait de N Bosons. Donner une expression pour le nombre moyen de particules, $n(\epsilon)$, dans une cellule d'énergie ϵ . Justifier l'équation de contrainte pour les N particules, décrit par l'ensemble canonique :

$$N = \int_0^\infty n(\epsilon)g(\epsilon)d\epsilon. \quad (4)$$

(c) Exprimer sous quelles conditions la contrainte (4) est utilisable. Montrer que pour si la température est inférieure à une valeur T_C , il n'est plus possible de trouver une solution acceptable pour le potentiel chimique μ . Expliquer pourquoi on interprète T_C comme la température de condensation de Bose-Einstein.

(d) Calculer T_C . Modifier la contrainte (4) en introduisant le nombre $N_0(T)$ de particules dans la première cellule, $\epsilon = 0$, pour $T < T_C$. On montrera que $N_0(T) + BVT^3 = N$, où B est une constante que l'on exprimera en fonction de $\hbar$, c , k_B , V et de l'intégrale $I = \int_0^\infty x^2 dx / (e^x - 1)$.

(e) Calculer, pour $T < T_C$, l'énergie interne à l'équilibre, $\bar{E}$ et montrer que

$$\begin{aligned} \bar{E} &= Va'T^4, \\ a' &= \frac{k_B^4 V}{2\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{z^3}{\exp(z) - 1} dz. \end{aligned} \quad (5)$$

(f) Expliquer brièvement, en quel sens on peut comparer le champ électromagnétique dans une cavité, en équilibre thermique à température T , à un système de bosons ultrarelativistes ayant subi une condensation de Bose-Einstein.

(g) Un gaz atomique de Rubidium, masse $Re = ? \text{ Kg}$, confiné dans un piège électrostatique subit une condensation de Bose-Einstein à $T_C = 1 \mu\text{K}$. Estimer la vitesse typique des atomes à T_C et en déduire s'ils sont relativistes ou non-relativistes.