© G. Weick

TD 2
Statistiques quantiques

1 Gaz bidimensionnel d'électrons

À l'interface entre deux semiconducteurs dopés (par exemple GaAs/AlGaAs) se forme un gaz confiné d'électrons. Le confinement est tel que l'on peut considérer que ce gaz est strictement bidimensionnel. On négligera dans la suite les interactions électron-électron et on se placera dans l'approximation de la masse effective. On appelle n la densité électronique du gaz et $A = L_x L_y$ sa surface (que l'on supposera être très grande devant toutes les autres échelles de longueur du problème), où L_x et L_y sont les dimensions latérales du gaz selon x et y, respectivement. On rappelle que les électrons sont des fermions de spin 1/2, et obéissent donc à la statistique de Fermi-Dirac. Le nombre moyen d'occupation d'un état d'énergie ϵ est alors donné par la distribution de Fermi-Dirac

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}, \tag{1}$$

où $\beta = 1/k_B T$ avec T la température du gaz, et où $\mu = \mu(T)$ est le potentiel chimique.

(a) Représentez la distribution de Fermi-Dirac (1). En particulier, analysez le cas $T = 0$.

(b) Résoudre l'équation de Schrödinger et montrez que la dispersion électronique est donnée par

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m},$$

où le vecteur d'onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ est quantifié selon $k_x = 2\pi n_x / L_x$ et $k_y = 2\pi n_y / L_y$ avec n_x et n_y des entiers. On utilisera des conditions aux limites périodiques. (Pourquoi ?)

(c) En déduire que la densité d'état électronique $\rho(\epsilon)$ est indépendante de l'énergie et est donnée par $\rho(\epsilon) = 1/\Delta$, où $\Delta = \pi\hbar^2/mA$ est l'espacement de niveau.

(d) Exprimez le nombre moyen N d'électrons dans le gaz. En déduire que le potentiel chimique a pour expression

$$\mu(T) = k_B T \ln\left(e^{T_F/T} - 1\right),$$

où T_F est la température de Fermi, définie via l'énergie de Fermi $E_F = k_B T_F$. Quelle est la définition de l'énergie de Fermi ? On donnera une expression explicite de E_F en fonction de N et Δ. Interprétez ce résultat. Tracez μ en fonction de la température.

(e) Exprimez l'énergie moyenne E du système (on ne cherchera pas à calculer l'intégrale). En déduire que le grand potentiel a pour expression $\Omega = -E$.

(f) Montrez que la pression P bidimensionnel du gaz est reliée à l'énergie moyenne par l'expression $E = PA$.

(g) On se place à température nulle. Déterminez l'équation d'état.

(h) À basse température ($T \ll T_F$), développez l'énergie moyenne au second ordre en T/T_F afin d'obtenir l'équation d'état.[1]

(i) Calculez l'équation d'état à haute température ($T \gg T_F$). Commentez.

(j) Comparez tous vos résultats au cas d'un gaz d'électron tridimensionnel.

[1] On donne

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} = \frac{\pi^2}{3}.$$

2 Condensation de Bose-Einstein

On considère un système de N bosons de masse m et de spin s ($s \in \mathbb{N}$) occupant un volume V. On néglige les interactions entre ces particules. Les niveaux d'énergies accessibles sont notés $\epsilon_{\mathbf{k}}$, et l'on posera que l'énergie du niveau fondamental est nulle.

(a) Quel est le nombre moyen $n(\epsilon)$ de particules d'énergie ϵ à la température T ? Montrez que la densité d'état peut se mettre sous la forme $d(\epsilon) = KV\sqrt{\epsilon}$, où K est une constante que l'on explicitera. Quel est le signe du potentiel chimique μ ? Comment est fixé μ dans la limite thermodynamique ?

(b) Sur un graphique, montrez comment la courbe de $n(\epsilon)$ évolue quand le potentiel chimique augmente à T constant, puis quand T augmente à μ constant. En considérant que le nombre de particules est fixé, montrez que

$$\left(\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)_N < 0.$$

(c) En introduisant la fugacité $\varphi = \mathrm{e}^{\beta\mu}$ ainsi que la fonction $f(\varphi) = \int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{\sqrt{x}}{\mathrm{e}^x/\varphi - 1}$, déterminez graphiquement le potentiel chimique μ. Que se passe-t-il lorsque l'on abaisse la température ? Montrez qu'il existe une température critique T_B appelée *température de Bose* pour laquelle $\mu = 0$. On donne

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x\,\sqrt{x}}{\mathrm{e}^x - 1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\zeta\left(\frac{3}{2}\right),$$

où $\zeta(z)$ est la fonction zêta de Riemann.[2]

(d) On se place à $T < T_\mathrm{B}$ et l'on considère que le nombre de particule est fixé. Montrez que le nombre de particules dans l'état de plus basse énergie est donnée par

$$N_0 = N\left[1 - \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2}\right].$$

Pourquoi ne retrouve-t-on pas cette condensation pour un gaz de photons ?

(e) Exprimez l'énergie moyenne E du système en fonction d'une intégrale que l'on ne cherchera pas à calculer. En utilisant la méthode de l'intégration par partie, montrez que le grand potentiel Ω du système s'exprime simplement en fonction de l'énergie E. En déduire la relation $PV = \frac{2}{3}E$, où P est la pression.

(f) Pour $T < T_\mathrm{B}$, exprimez la pression du système. On donne

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x\,x^{3/2}}{\mathrm{e}^x - 1} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\zeta\left(\frac{5}{2}\right).$$

(g) On se place maintenant à T et N fixés. Que se passe-t-il lorsque l'on réduit le volume du système ? Montrez que la transition a lieu pour

$$V_\mathrm{B} = \frac{1}{(2s+1)\zeta(3/2)}N\Lambda^3,$$

où $\Lambda = (2\pi\hbar^2/mk_\mathrm{B}T)^{1/2}$ est la longueur d'onde thermique de de Broglie. Discutez l'allure d'une isotherme dans le diagramme P-V.

(h) L'hélium 4 liquide présente une transition superfluide à 2.17 K. Comparez à la température de Bose. On donne pour l'hélium 4 liquide : spin $s = 0$, densité $0.12\,\mathrm{g/cm^3}$, $m = 4 \times m_\mathrm{proton} = 6.7 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}$, $\hbar = 1.0 \times 10^{-34}\,\mathrm{J.s}$, $k_\mathrm{B} = 1.4 \times 10^{-23}\,\mathrm{J/K}$.

---

[2] La fonction zêta de Riemann est définie pour tout nombre complexe z tel que $\mathrm{Re}(z) > 1$ par la série de Riemann

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z}.$$

En particulier, $\zeta(3/2) \simeq 2.61$ et $\zeta(5/2) \simeq 1.34$.