Examen — 1re session

Aucun document ni calculatrice ne sont autorisés
Durée de l'épreuve : 2h
Le sujet comprend 4 pages au total

1 Chaîne unidimensionelle de spins d'Ising

On considère une chaîne de N spins $s_i = \pm 1$ $(i = 0, 1, \dots, N-1)$ à la température T avec une interaction ferromagnétique J entre les premiers voisins dans un champ extérieur h. Le hamiltonien correspondant s'écrit

$$H = -J \sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} - h \sum_{i=0}^{N-1} s_i. \tag{1}$$

Les conditions aux limites sont périodiques, c'est-à-dire que l'on identifie $s_N = s_0$.

1.1 Questions préliminaires

(a) Quel est le signe de J ? Vous justifierez brièvement votre réponse.

(b) À champ nul ($h = 0$), quel est l'état magnétique du système à température nulle ?

(c) Toujours à $h = 0$, quel est l'état magnétique du système à haute température ? Haute devant quoi ?

1.2 Approximation de champ moyen

On cherche une solution au modèle d'Ising à 1D dans l'approximation de champ moyen. Dans la suite, on appelle $m = \langle s_i \rangle$ l'aimantation.

(a) Rappelez ce qu'est l'approximation de champ moyen dans le cadre du modèle d'Ising. Que vaut la fonction de corrélation spin-spin C_{ij} dans cette approximation ?

(b) Montrez que dans l'approximation de champ moyen, le hamiltonien (1) prend la forme

$$H = -(2Jm + h) \sum_{i=0}^{N-1} s_i + JNm^2.$$

(c) En déduire la fonction de partition canonique Z, ainsi que l'énergie libre F.

(d) Montrez que l'aimantation m obéit à une équation d'auto-cohérence que l'on explicitera.

(e) On se place à champ magnétique extérieur nul ($h = 0$). Montrez qu'il existe une transition de phase (paramagnétique-ferromagnétique) pour une température critique T_c que l'on exprimera en fonction des différents paramètres du problème.

(f) Le résultat de la question précédente est-il conforme qualitativement (et si oui quantitativement) à ce que vous savez du modèle d'Ising en dimension une ?

2 Condensation de Bose–Einstein dans un piège harmonique

L'objectif de ce problème est de décrire la condensation de Bose–Einstein pour un gaz parfait de bosons de masse m et de spin $s = 0$. On s'intéressera plus particulièrement au cas où les bosons sont confinés spatialement grâce à un piège harmonique. On notera dans la suite $\beta = 1/k_B T$ et $z = e^{\beta\mu}$, où μ est le potentiel chimique.

2.1 Questions préliminaires

On considère tout d'abord un gaz parfait de N bosons libres dans une enceinte de volume V et à la température T.

(a) Rappelez brièvement à quoi correspond la condensation de Bose–Einstein. On pourra en particulier donner qualitativement l'allure du potentiel chimique μ en fonction de la température.

(b) On rappelle que le critère de condensation est donné par la relation

$$\rho\Lambda(T)^3 > 2.61,$$

avec $\rho = N/V$ et $\Lambda(T) = (2\pi\hbar^2/mk_\mathrm{B}T)^{1/2}$.

(i) Déterminez la température de Bose T_B en-deçà de laquelle la condensation a lieu.

(ii) Indiquez quels sont les paramètres expérimentaux que l'on peut modifier pour observer la condensation de Bose–Einstein.

2.2 Gaz parfait de bosons dans un piège harmonique

On considère maintenant un gaz parfait de N bosons, à la température T, piégés dans un potentiel harmonique tridimensionnel isotrope, de raideur associée à la pulsation notée ω. On néglige toute interaction entre les atomes. Le hamiltonien du système est donc donné par

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2\mathbf{r}_i^2}{2} \right),$$

avec $\mathbf{p}_i$ et $\mathbf{r}_i$ la quantité de mouvement et la position du i^e boson ($i = 1, \ldots, N$). Dans la suite du problème, la température T du gaz vérifie en permanence $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega$.

(a) Rappelez l'expression du nombre moyen de bosons $n(\epsilon_\lambda)$ dans un état d'énergie ϵ_λ en fonction de T et μ. Dans la suite on pourra poser $z = \mathrm{e}^{\beta\mu}$.

(b) On rappelle que les niveaux d'énergie d'un oscillateur harmonique dans l'état individuel $\lambda = \{n_x, n_y, n_z\}$ sont donnés par

$$\epsilon_\lambda = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_z\right),$$

où les nombres quantiques n_x, n_y et n_z sont des entiers naturels (on a choisi l'origine des énergies à 0). Justifiez brièvement que l'on peut indexer les niveaux d'énergie par un entier $n \in \mathbb{N}$ tel que $\epsilon_n = \hbar\omega n$, pourvu que l'on n'oublie pas la dégérescence $g(n)$ du niveau d'énergie ϵ_n. Montrez que $g(1) = 3$ et que $g(2) = 6$.

(c) Le niveau fondamental est-il dégénéré ? En déduire la valeur de $g(0)$. Exprimez le nombre N_0 de particules dans cet état en fonction de z. En déduire que le potentiel chimique μ est toujours négatif.

(d) Justifiez soigneusement que la dégénérescence $g(n)$ du n^e niveau est donnée par

$$g(n) = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

(e) En déduire que la densité d'états $\rho(\epsilon)$ dans le piège harmonique tridimensionnel peut s'écrire sous la forme

$$\rho(\epsilon) = \rho_1(\epsilon) + \rho_2(\epsilon) + \rho_3(\epsilon),$$

avec

$$\rho_1(\epsilon) = \frac{1}{\hbar\omega}, \qquad \rho_2(\epsilon) = \frac{3}{2}\frac{\epsilon}{(\hbar\omega)^2}, \qquad \rho_3(\epsilon) = \frac{1}{2}\frac{\epsilon^2}{(\hbar\omega)^3}.$$

2.3 Étude de la condensation

On décompose la population de bosons comme $N = N_0 + N_\mathrm{e}$, où N_0 est le nombre de bosons dans l'état fondamental et N_e correspond à la population totale des états excités. On admet que N_e est donné par

$$N_\mathrm{e} = N_{\mathrm{e},1} + N_{\mathrm{e},2} + N_{\mathrm{e},3},$$

avec

$$\begin{aligned} N_{\mathrm{e},1} &= \int_{\hbar\omega/2}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon\ \rho_1(\epsilon) n(\epsilon), \\ N_{\mathrm{e},2} &= \int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon\ \rho_2(\epsilon) n(\epsilon), \\ N_{\mathrm{e},3} &= \int_0^{\infty} \mathrm{d}\epsilon\ \rho_3(\epsilon) n(\epsilon). \end{aligned}$$

(a) Montrez que

$$N_{\mathrm{e},1} = -\frac{k_\mathrm{B} T}{\hbar\omega} \ln\left(1 - z\,\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega/2}\right).$$

On pourra utiliser les développements de Taylor suivants :

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{j=0}^{\infty} x^j,$$

$$\ln(1-x) = -\sum_{j=1}^{\infty} \frac{x^j}{j}.$$

(b) De la même manière, calculez $N_{\mathrm{e},2}$ et $N_{\mathrm{e},3}$. On pourra utiliser les fonctions de Bose $g_2(z)$ et $g_3(z)$, ainsi que les intégrales données en annexe.

(c) Dans la limite où $k_\mathrm{B} T \gg \hbar\omega$, en déduire que

$$N_\mathrm{e} \simeq \left(\frac{k_\mathrm{B} T}{\hbar\omega}\right)^3 g_3(z).$$

(d) En utilisant les propriétés des fonctions de Bose, montrez que pour une température T donnée, N_e est majoré par une valeur $N_\mathrm{e}^{\max}$ que l'on exprimera en fonction de T.

(e) En déduire qu'il se produit une condensation des bosons dans l'état fondamental pour une température T_c donnée par

$$N = \left(\frac{k_\mathrm{B} T_\mathrm{c}}{\hbar\omega}\right)^3 g_3(1).$$

On justifiera brièvement mais soigneusement ce résultat. En particulier, on pourra donner l'allure de z et de N_0 en fonction de la température.

(f) On dit que le nombre de bosons dans l'état fondamental devient macroscopique en dessous de T_c. Justifiez cette affirmation.

(g) On considère $N = 10^3$ atomes et $\omega = 10^3\,\mathrm{s}^{-1}$. Estimez T_c et discuter de l'approximation $\hbar\omega \ll k_\mathrm{B} T_\mathrm{c}$. On donne $\hbar = 10^{-15}$ eV.s et $k_\mathrm{B} = 10^{-4}$ eV.K^{-1}.

2.4 Énergie interne et capacité calorifique

On cherche maintenant à calculer l'énergie moyenne et la capacité calorifique du gaz de bosons. On commence par calculer la fonction de partition grand-canonique, dont l'expression est donnée par

$$\Xi = \prod_\lambda \frac{1}{1 - z\exp(-\beta\epsilon_\lambda)}.$$

(a) En prenant soin de séparer les contributions de l'état fondamental et celles des états excités, montrez en ne conservant que le terme dominant $\rho_3\,(\epsilon)$ que

$$\ln \Xi = -\ln(1-z) + \left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar\omega}\right)^3 g_4(z).$$

(b) À condition de choisir comme variables thermodynamiques indépendantes z, β et N, l'énergie moyen E est donnée par la relation

$$E = -\left.\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \beta}\right|_{z,N}.$$

Montrez que

$$E(T) = \begin{cases} 3Nk_\mathrm{B}T\left(\dfrac{T}{T_\mathrm{c}}\right)^3 \dfrac{g_4(1)}{g_3(1)}, & T \leqslant T_\mathrm{c}, \\ 3Nk_\mathrm{B}T\dfrac{g_4(z)}{g_3(z)}, & T > T_\mathrm{c}. \end{cases}$$

Quelle est la limite de $E(T)$ pour $T \gg T_\mathrm{c}$? Quelle conclusion en tirez-vous ?

(c) Calculez la capacité calorifique du gaz de bosons. Est-elle continue pour $T = T_\mathrm{c}$? De quel ordre est la transition ?

2.5 Extension du nuage de bosons

(a) En utilisant le théorème d'équipartition, exprimez Δx_T, l'extension du nuage de bosons présents dans les états excités en fonction de T, k_B, $\hbar$, et ω.

(b) Justifiez que l'extension du nuage de bosons présents dans l'état condensé s'exprime comme

$$\Delta x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

(c) Exprimez le rapport $\Delta x_0/\Delta x_T$ en fonction de N.

Annexe mathématique

Fonctions de Bose

On rappelle l'expression des fonctions de Bose $g_\alpha(z)$ définies pour $0 \leqslant z \leqslant 1$ et $\alpha > 1$:

$$g_\alpha(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\alpha}.$$

Les fonctions de Bose ont les propriétés suivantes :

- elles sont croissantes ;
- $g_\alpha(z) \simeq z$ pour $z \ll 1$;
- $g_2(1) = 1.64$, $g_3(1) = 1.20$, et $g_4(1) = 1.08$.

Intégrales utiles :

$$\int_0^\infty \mathrm{d}u\; u\,\mathrm{e}^{-u} = 1 \qquad \int_0^\infty \mathrm{d}u\; u^2\,\mathrm{e}^{-u} = 2$$

Relation utile :

$$\sum_{k=1}^{n} k = \frac{n(n+1)}{2}$$