

## EXAMEN DE PHYSIQUE STATISTIQUE

Jeudi 7 mai 2015

*Durée de l'épreuve : 3 heures.**L'utilisation de documents, téléphones portables, calculatrices, ... est interdite.***Recommandations :**Lisez attentivement l'énoncé et rédigez *succinctement* et *clairement* votre réponse.Vérifiez vos calculs (analyse dimensionnelle, etc) ; n'oubliez pas de vous **relire**.**Problème 1 : Magnétisme d'un gaz d'électrons bidimensionnel**

**Introduction.**— Les propriétés magnétiques d'un gaz d'électrons sans interaction sont contrôlées par deux phénomènes : le *paramagnétisme* de Pauli dû à l'alignement des moments magnétiques électroniques sur le champ magnétique et le *diamagnétisme* de Landau induit par le mouvement orbital des charges électroniques. L'hamiltonien de Pauli (pour un électron) qui décrit les deux phénomènes est

$$H = \frac{(\vec{p} - q_e \vec{A}(\vec{r}))^2}{2m_*} - \mu_z \mathcal{B} \quad \text{avec } \mu_z = \frac{q_e}{m_e} S_z, \quad (1)$$

où  $\vec{A}$  est le potentiel vecteur et  $q_e$  la charge de l'électron. La *masse effective*  $m_*$  des porteurs de charge (les électrons dans le métal) diffère en général de la masse  $m_e$  des électrons dans le vide.  $\mu_z$  est le moment magnétique de l'électron, relié à son spin  $S_z$  par le facteur gyromagnétique  $\gamma_e = q_e/m_e$ .

Nous considérons la situation d'un **champ magnétique homogène** selon  $Oz$  :  $\mathcal{B} = \partial_x A_y - \partial_y A_x$ . Afin de simplifier l'analyse, nous nous placerons en **deux dimensions** et supposons les électrons **confinés dans un plan de surface**  $\mathcal{A}$ . Nous considérerons la limite thermodynamique.

**A. Paramagnétisme de Pauli.**— Dans cette partie nous étudions l'effet du champ magnétique sur les moments magnétiques des électrons du gaz bidimensionnel. L'hamiltonien pour **un** électron est

$$H_P = \frac{\vec{p}^2}{2m_*} - \mu_z \mathcal{B} \quad \text{où } \vec{p} = (p_x, p_y). \quad (2)$$

**1/ Cas  $\mathcal{B} = 0$ .**— En l'absence de champ magnétique, les états propres de  $H_P = \vec{p}^2/(2m_*)$  (les états *individuels*) sont les ondes planes d'énergie  $\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 \vec{k}^2 / (2m_*)$ , où  $\vec{k} = (k_x, k_y)$ .

a) Montrer que la densité des états individuels  $\rho_0$  est indépendante de l'énergie en deux dimensions. Donner son expression en fonction de  $m_*$  et  $\mathcal{A}$  (penser à la dégénérescence de spin).

b) Rappeler (sans démonstration) l'expression de la distribution de Fermi-Dirac caractérisant l'occupation d'un état individuel d'énergie  $\varepsilon$  lorsque la température  $T$  et le potentiel chimique  $\mu$  du système sont fixés. Tracer *soigneusement* son allure en fonction de  $\varepsilon$  pour  $k_B T \ll \mu$  et à  $T = 0$ . Exprimer le nombre moyen de fermions dans le système sous la forme d'une intégrale (sans la calculer).

c) On se place à  $T = 0$ . Donner l'expression de l'énergie de Fermi  $\varepsilon_F$  (valeur du potentiel chimique à  $T = 0$ ) en fonction de la densité  $n_e = N/\mathcal{A}$ .

**2/ Cas  $\mathcal{B} \neq 0$ .**– Les états propres de l'hamiltonien (2) combinent une onde plane avec un état propre de  $S_z$ , noté  $|\pm\rangle$ .

a) Quelles sont les valeurs propres de l'hamiltonien (2) pour  $\mathcal{B} \neq 0$ ? Sur un même schéma, représenter l'occupation des états individuels en fonction de leur énergie pour les électrons de spin  $|+\rangle$  et pour les électrons de spin  $|-\rangle$ , lorsque  $\mathcal{B} \neq 0$  (pour  $T = 0$ ). Justifier que l'énergie de Fermi est indépendante du champ magnétique.

b) Si l'on désigne par  $N_{\pm}$  le nombre d'électrons dans un état de spin  $|\pm\rangle$ , l'aimantation du gaz est  $\mathcal{M}_z^{\text{para}} = \mu_B (N_+ - N_-)$  où  $\mu_B \stackrel{\text{def}}{=} q_e \hbar / (2m_e)$  est le magnéton de Bohr. On introduit la susceptibilité de Pauli, définie comme  $\chi_{\text{Pauli}} \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\mathcal{B} \rightarrow 0} \partial \mathcal{M}_z^{\text{para}} / \partial \mathcal{B}$ . Montrer que

$$\chi_{\text{Pauli}} = \mu_B^2 \rho_0. \quad (3)$$

**B. Diamagnétisme de Landau.**– Nous étudions maintenant l'effet du champ magnétique sur le mouvement orbital des électrons. On oublie le couplage au spin étudié au **A** et on considère l'hamiltonien de Landau

$$H_L = \frac{(\vec{p} - q_e \vec{A}(\vec{r}))^2}{2m_*} \quad (4)$$

pour une particule chargée sans spin soumise à un champ magnétique homogène selon  $Oz$ . Le spectre des énergies de (4) (les états *individuels*) est un spectre d'oscillateur harmonique de pulsation  $\omega_c = q_e \mathcal{B} / m_*$  (nous supposons  $q_e \mathcal{B} > 0$ ) :

$$\varepsilon_n = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{avec } n = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

Chaque niveau porte une **dégénérescence**  $d_L$  proportionnelle à la surface du plan :

$$d_L = \frac{q_e \mathcal{B} \mathcal{A}}{2\pi \hbar}. \quad (6)$$

Ce spectre est appelé le *spectre de Landau*.

**1/ Préliminaire – Question de cours :** on note  $|\lambda\rangle$  les *états* individuels (états propres de l'hamiltonien à un corps) et  $\varepsilon_\lambda$  les énergies associées.

a) Rappeler la définition de la fonction de partition grand canonique et donner sa décomposition sur les états individuels.

b) Donner l'expression de la fonction de grand partition  $\xi_\lambda$  associée à l'état individuel  $|\lambda\rangle$  pour des **fermions**. Dédire une expression du grand potentiel en terme du spectre des énergies individuelles  $\{\varepsilon_\lambda\}$ .

**2/ Application :**

a) Montrer que le grand potentiel décrivant le gaz d'électrons sous champ magnétique est

$$J(T, \mathcal{A}, \mu, \mathcal{B}) = -\rho_0 \frac{\hbar \omega_c}{\beta} \sum_{n=0}^{\infty} \ln \left( 1 + e^{-\beta(\hbar \omega_c(n+1/2) - \mu)} \right). \quad (7)$$

Remarque : ne pas oublier la dégénérescence de spin qui n'est pas prise en compte dans  $d_L$ .

b) On définit la susceptibilité de Landau comme  $\chi_{\text{Landau}} \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\mathcal{B} \rightarrow 0} \partial \mathcal{M}_z^{\text{dia}} / \partial \mathcal{B}$  où  $\mathcal{M}_z^{\text{dia}}$  est l'aimantation déduite du grand potentiel (7). Rappeler comment déduire l'aimantation du grand potentiel et justifier le comportement

$$J(T, \mathcal{A}, \mu, \mathcal{B}) \underset{\mathcal{B} \rightarrow 0}{=} J(T, \mathcal{A}, \mu, 0) - \frac{1}{2} \chi_{\text{Landau}} \mathcal{B}^2 + \mathcal{O}(\mathcal{B}^4). \quad (8)$$

c) On remarque que si  $\mathcal{B} \rightarrow 0$ , l'espacement entre niveaux de Landau  $\hbar\omega_c$  tend vers zéro. Afin d'analyser le comportement à bas champ de l'expression (7), on utilise la formule d'Euler-MacLaurin permettant d'approximer une somme par une intégrale :

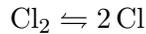
$$a \sum_{n=0}^{\infty} f(a(n + 1/2)) \underset{a \rightarrow 0}{=} \int_0^{\infty} dx f(x) + \frac{a^2}{24} f'(0) + \mathcal{O}(a^3) \quad (9)$$

où  $f(x)$  est une fonction qui décroît à l'infini suffisamment rapidement. Déduire l'expression de  $\chi_{\text{Landau}}$ .

d) On considère la limite de température nulle ( $T \rightarrow 0$  et  $\mu \rightarrow \varepsilon_F$ ). Comparer  $\chi_{\text{Landau}}$  et  $\chi_{\text{Pauli}}$  (notamment les dépendances dans  $m_*$  et  $m_e$ ). Justifier les signes des deux susceptibilités par des arguments physiques. Quel est l'effet dominant (donner la susceptibilité totale) ?

## Problème 2 : Dissociation du chlore

On considère un gaz de  $N_0$  molécules de chlore  $\text{Cl}_2$  dans une enceinte de volume  $V$  maintenue à température  $T$ . À cause de l'agitation thermique les molécules peuvent se dissocier en deux atomes de chlore :



Nous étudions l'équilibre entre les deux gaz (d'atomes et de molécules), qui seront traités dans l'approximation semiclassique.

**A. Gaz monoatomique.**— On considère que l'enceinte contient  $N_1$  atomes de chlore ( $N_1$  est supposé fixé dans cette question).

1/ Calculer la fonction de partition canonique du gaz parfait monoatomique dans l'approximation semiclassique. On introduira la longueur d'onde thermique  $\lambda_T = \sqrt{2\pi\hbar^2/(m_{\text{Cl}}k_B T)}$  où  $m_{\text{Cl}}$  est la masse de l'atome de chlore. Donner l'expression de l'énergie libre  $F_1$  pour  $N_1 \gg 1$ .

2/ Montrer que le potentiel chimique du gaz est donné par

$$\mu_1 = k_B T \ln(n_1 \lambda_T^3) \quad (10)$$

où  $n_1 = N_1/V$  est la densité d'atomes.

**B. Gaz moléculaire.**— La molécule de dichlore a des degrés de liberté de rotation. L'énergie totale d'une molécule est donc

$$H_{\text{molécule}} = \frac{\vec{p}^2}{4m_{\text{Cl}}} + H_{\text{rotation}} - \varepsilon_0 \quad (11)$$

où  $H_{\text{rotation}}$  est l'énergie cinétique de rotation et  $\varepsilon_0 > 0$  l'énergie de liaison entre les deux atomes.

1/ a) Justifier que la fonction de partition canonique  $z_{\text{molécule}}$  d'une molécule admet une factorisation correspondant aux trois termes de l'énergie  $z_{\text{molécule}} = z_{\text{translation}} z_{\text{rotation}} z_{\text{liaison}}$ . Exprimer  $z_{\text{translation}}$  en fonction de  $V$  et  $\lambda_T$ .

b) On traite les degrés de liberté de rotation classiquement. Justifier (sans calcul compliqué) que  $z_{\text{rotation}}$  est proportionnelle à la température (on écrira  $z_{\text{rotation}} = T/T_{\text{rot}}$  où  $T_{\text{rot}}$  dépend des

détails microscopiques). On donne  $T_{\text{rot}} = 0.35 \text{ K}$ ; que peut-on dire de la validité du traitement classique si  $T = 300 \text{ K}$  ?

c) La molécule a également un degré de liberté de vibration que nous ne prenons pas en compte ici, i.e. l'hamiltonien contient un terme supplémentaire  $H_{\text{vib}} = p_r^2/(2m_r) + \frac{1}{2}m_r\omega^2(r-r_0)^2 - \hbar\omega/2$ . Sachant que  $T_{\text{vib}} = \hbar\omega/k_B = 808 \text{ K}$ , expliquer pourquoi il est justifié d'oublier ce terme de l'énergie si la température est  $T = 300 \text{ K}$ .

2/ Donner l'expression de l'énergie libre  $F_2$  du gaz de  $N_2 \gg 1$  molécules, en fonction de  $N_2$ ,  $T$  et  $z_{\text{molécule}}$ .

3/ Dédurre que le potentiel chimique du gaz est donné par

$$\mu_2 = k_B T \ln \left( 2^{-3/2} n_2 \lambda_T^3 (T_{\text{rot}}/T) e^{-\varepsilon_0/k_B T} \right) \quad (12)$$

où  $n_2 = N_2/V$  est la densité de molécules et  $\lambda_T$  la longueur qui a été définie plus haut.

**C. Équilibre chimique.**— On tient maintenant compte du fait que les molécules de dichlore peuvent se dissocier. L'enceinte contient un mélange de gaz monoatomique et moléculaire.

1/ Si avant dissociation, il y avait  $N_0$  molécules de dichlore, quelle est la relation entre  $N_0$ , le nombre  $N_1$  d'atomes de chlore et le nombre  $N_2$  de molécules non dissociées ?

2/ Justifier que la fonction de partition canonique du mélange s'écrit en terme des énergies libres  $F_1(N_1)$  et  $F_2(N_2)$  des deux gaz comme

$$Z = \sum_{N_2=0}^{N_0} e^{-\beta [F_1(2(N_0-N_2)) + F_2(N_2)]} \quad (13)$$

3/ Dans la limite thermodynamique, la somme sur  $N_2$  est dominée par le voisinage de la valeur qui minimise l'énergie libre réduite  $\tilde{F}(N_2) \stackrel{\text{def}}{=} F_1(2(N_0 - N_2)) + F_2(N_2)$ . Dédurre une équation qui relie les deux potentiels chimiques  $\mu_1$  et  $\mu_2$ .

4/ **Loi d'action de masse.**— Montrer que la condition précédente peut se mettre sous la forme

$$\frac{n_1^2}{n_2} = K(T) \quad (14)$$

où  $K(T)$  est une fonction de la température et des paramètres microscopiques. Donner l'expression de  $K(T)$ . Tracer *soigneusement* l'allure de  $K(T)$  en fonction de  $T$ . On donne  $\varepsilon_0/k_B = 29\,000 \text{ K}$ ; que peut-on déduire sur l'efficacité de la dissociation à température ambiante ?

## Annexe

Formule de Stirling :  $\ln N! \simeq N \ln N - N$ .

**Solutions** : cf. page du cours [http://lptms.u-psud.fr/christophe\\_texier/](http://lptms.u-psud.fr/christophe_texier/)