Université de Paris
PhStat1

Année 2019-2020

PHYSIQUE STATISTIQUE

TD n°6 : Statistiques quantiques

Les exercices estampillés [S] sont des exercices supplémentaires qui ne pourront être traités en séances de travaux dirigés dans l'horaire imparti, mais qu'il est utile d'étudier dans un travail personnel.

---

1 Paramagnétisme de Pauli

On assimile les électrons de conduction d'un métal à un gaz parfait dégénéré de N électrons enfermés dans un volume $\mathcal{V}$ et on cherche à calculer l'aimantation de spin de ces électrons lorsqu'ils sont placés dans un champ magnétique uniforme B et maintenus à la température T.

1. Calculer les densités d'état $\rho_+(\varepsilon)$ et $\rho_-(\varepsilon)$ correspondant respectivement aux valeurs $+1/2$ et $-1/2$ du nombre quantique de spin S_z (on appellera μ_B le module du moment magnétique de spin des électrons).
2. Déterminer le potentiel chimique μ_0 à température et champ nuls.
3. Donner les expressions intégrales des nombres moyens N_+ et N_- en fonction de μ_B, T, μ et B.
4. Déterminer le potentiel chimique μ et l'aimantation moyenne M à température nulle et dans la limite où $\mu_\mathrm{B}B \ll \mu_0$. Considérant que, typiquement, dans le cuivre, la densité d'électrons de conduction vaut $N/\mathcal{V} \approx 8{,}5 \times 10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3}$, évaluer μ_0. Pour quelles valeurs de B le calcul précédent est-il valable ($\mu_\mathrm{B} = 5{,}8 \times 10^{-5}\,\mathrm{eV/Tesla}$) ? En deçà de quelle valeur de la température est-il raisonnable de considérer celle-ci comme nulle ?
5. Calculer l'aimantation à température finie dans l'approximation classique. Étudier la limite $mB \ll kT$. Comparer cette aimantation avec celle trouvée à la question précédente.

---

2 Semiconducteur

On cherchera dans ce TD à déterminer les concentrations de porteurs dans la bande de conduction (électrons) et dans la bande de valence (trous ou lacunes d'électrons) d'un matériau semiconducteur ainsi que leur dépendance en fonction de la température. On suppose que le semiconducteur considéré possède une bande de valence et une bande de conduction au profil parabolique (voir figure 1) :

$$\epsilon_c(k) = \epsilon_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \qquad \text{et} \qquad \epsilon_v(k) = \epsilon_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} \tag{1}$$

Dans une deuxième partie, on considérera l'effet d'un dopage de sites donneurs d'électrons sur la densité de porteurs. On pourra par exemple considérer l'exemple d'impuretés d'Arsenic dans le Germanium dont l'énergie ϵ_d des sites donneurs est située à $\approx 0.0127eV$ de la bande de conduction du Germanium.

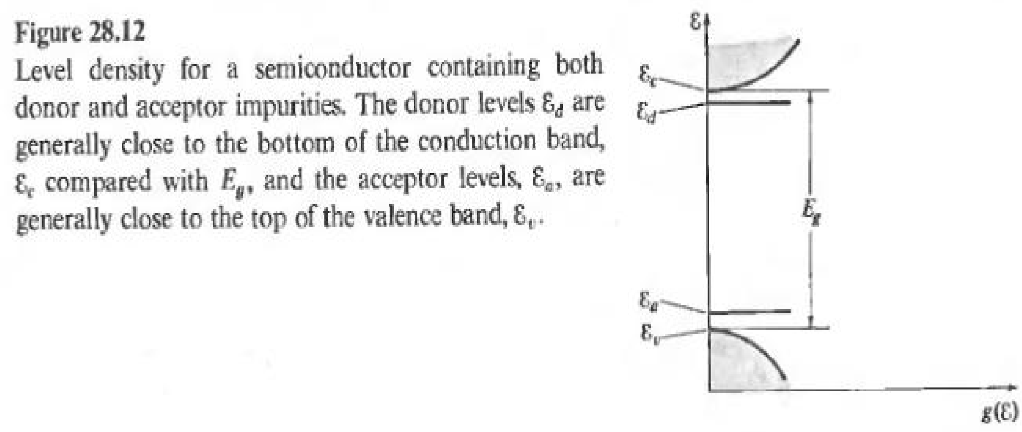

Figure 28.12
Level density for a semiconductor containing both donor and acceptor impurities. The donor levels $\mathcal{E}_d$ are generally close to the bottom of the conduction band, $\mathcal{E}_c$ compared with E_g, and the acceptor levels, $\mathcal{E}_a$, are generally close to the top of the valence band, $\mathcal{E}_v$.

FIGURE 1 – Extrait de Ashcroft et Mermin.

Semiconducteur intrinsèque

1. Donner l'ordre de grandeur des bandes interdites du Germanium ou du Silicium.
2. Donner l'expression du nombre N_c d'électrons par unité de volume dans la bande de conduction ainsi que le nombre P_v de trous dans la bande de valence en fonction de la température et du potentiel chimique.
3. Calculer la densité d'états dans chaque bande.
4. On suppose que $\epsilon_c - \mu \gg k_bT$ et $\mu - \epsilon_v \gg k_bT$. Calculer alors explicitement N_c et P_v (on rappelle que $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$). On pose $n_i^2 = N_c.P_v$. Exprimer n_i, N_c et P_v en fonction de la température seulement.
5. En déduire la valeur du potentiel chimique μ_i en fonction de la température. Discuter la validité des approximations faites précédemment.

Semiconducteurs dopés

Il est difficile en pratique d'observer le régime intrinsèque de conduction des semiconducteurs car ceux-ci sont généralement dopés (volontairement ou pas) par des impuretés. On considère que le semiconducteur contient N_d impuretés donneuses par unité de volume. A température nulle, chaque site donneur d'énergie ϵ_d est occupé par un électron. A plus haute température, ces sites peuvent s'ioniser et ainsi fournir des porteurs additionnels dans la bande de conduction.

6. Calculer la fonction de partition grand canonique du système des électrons liés aux N_d impuretés sachant que chaque site peut contenir 0 ou 1 électron dans deux états de spin.
7. En déduire le nombre de sites n_d occupés en fonction de la température et du potentiel chimique puis relier N_c, P_v, N_d et n_d.
8. On suppose que la température est suffisamment élevée pour qu'un grand nombre de sites donneurs soient ionisés. Dans ce cas, on a $\epsilon_d - \mu >> k_bT$. En déduire alors l'expression de N_c et P_v en fonction de N_d et n_i. En déduire l'existence de deux régimes de dopage en fonction de la densité d'impuretés.
9. Calculer le potentiel chimique en fonction de N_d, n_i et μ_i. Discuter la validité des approximations précédentes.
10. Commenter les données expérimentales de la figure 2.

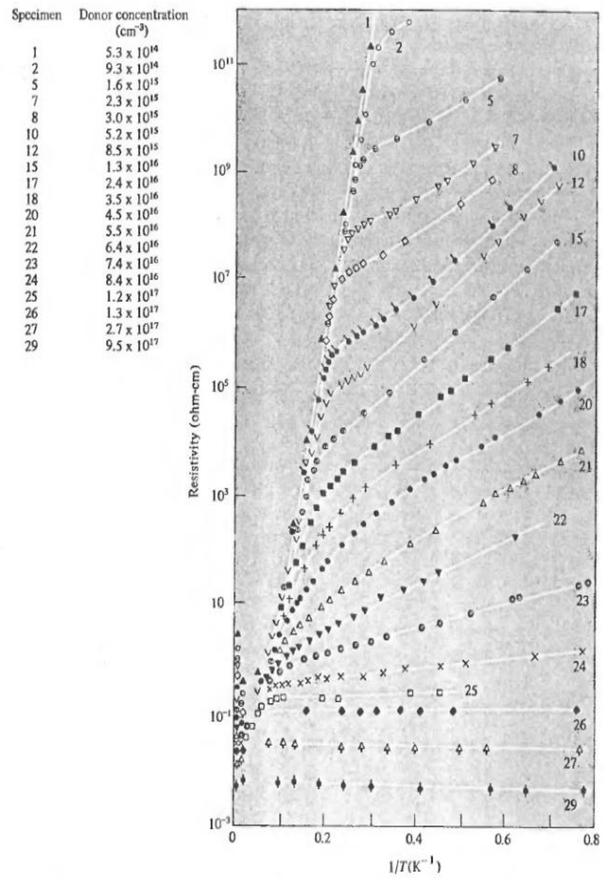

Figure 28.2
The resistivity of antimony-doped germanium as a function of $1/T$ for several impurity concentrations. (From H. J. Fritzsche, *J. Phys. Chem. Solids* 6, 69 (1958).)

FIGURE 2 – Extrait de Ashcroft et Mermin.

3 Gaz de bosons en deux dimensions

Il est possible de confiner un gaz d'atomes de rubidium 87 (^{87}Rb) en deux dimensions d'espace. Ces atomes sont des bosons, et ils ont été polarisés en spin, si bien qu'on ne les trouve que dans un seul état de spin. On se propose d'examiner les propriétés de ce gaz en l'absence de piégeage harmonique, puis en présence d'un tel piégeage, et de confronter l'analyse théorique à des résultats expérimentaux récents. Nous ferons l'hypothèse que les atomes de ^{87}Rb de masse m sont indépendants, donc que l'on peut négliger leurs interactions. On se placera dans le cadre d'une description grand-canonique et l'on appellera μ le potentiel chimique imposé par le réservoir de particules et $z = \mathrm{e}^{\beta\mu}$ la fugacité correspondante.

1. Justifier brièvement, pour un boson confiné dans une boîte carrée de taille $L \times L$ avec conditions aux limites périodiques, que son spectre énergétique est donné par $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ où l'on précisera les valeurs de $\mathbf{k}$ autorisées.
2. Donner, sans démonstration, le nombre moyen $f_{\mathbf{k}}$ de bosons occupant l'état $\mathbf{k}$ en fonction des données du problème.
3. Montrer, pour un boson, que le nombre d'états $\rho(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon$ dont l'énergie est comprise entre ε et $\varepsilon + \mathrm{d}\varepsilon$ vérifie $\rho(\varepsilon) = \mathrm{Cste}$, où l'on précisera la constante en fonction de L, $\lambda = \sqrt{\frac{\beta h^2}{2\pi m}}$ et de β.
4. Quel est le lien entre la densité surfacique moyenne de particules n et les $f_{\mathbf{k}}$? En récrivant

cette relation sous forme intégrale à l'aide de $\rho(\varepsilon)$, montrer que $n\lambda^2 = g_1(z) = -\ln(1-z)$. Les fonctions g_α sont définies par $g_\alpha(z) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^{\alpha-1}}{\mathrm{e}^x/z-1} = \sum_{\ell\geq 1}\frac{z^\ell}{\ell^\alpha}$.

5. Vérifier que la formule obtenue en **4** vous redonne bien, dans la limite classique (non quantique) l'expression de la fugacité d'un gaz parfait classique (effectuer directement, par ailleurs, le calcul classique pour comparaison).
6. Conclure, d'après **4**, quant à l'existence, ou l'absence, d'un phénomène de condensation de Bose-Einstein en deux dimensions.
7. On piège à présent notre assemblée d'atomes par un potentiel harmonique magnétique $V(\mathbf{r}) = \frac{m\omega^2}{2}\mathbf{r}^2$. Les états propres de chaque atome sont indexés par deux entiers $i, j \geq 0$, et leur énergie associée est $\varepsilon_{i,j} = \hbar\omega(i+j)$. Exprimer, en fonction de n, le nombre g_n d'états accessibles à un atome occupant le niveau d'énergie $(n+1)\hbar\omega$.
8. Donner N_0, nombre moyen d'atomes occupant l'état fondamental, en fonction de z.
9. Donner N', le nombre moyen d'atomes occupant les états excités sous la forme d'une somme sur les entiers $n \geq 1$ d'une fonction de n, z et $\beta\hbar\omega$ que l'on précisera.
10. Dans le contexte expérimental qui nous intéresse $T \sim 100$ nK et $\omega \sim 2\pi \times 10$ Hz. Estimer numériquement $\beta\hbar\omega$.
11. À l'aide de l'approximation suggérée par le calcul de la question **10**, montrer que le nombre maximal N'_c d'atomes qui occupent des états excités est donné par $N'_c = (\beta\hbar\omega)^{-2}g_2(1)$. Conclure quant à l'existence, ou l'absence, d'un phénomène de condensation de Bose-Einstein en deux dimensions en présence d'un piège harmonique.

---

4 Coefficients d'Einstein [S]

On rappelle que le photon est un boson de spin 1 et de masse nulle (deux états de polarisation possible) dont le nombre n'est pas conservé. Par conséquent, le potentiel chimique d'un gaz de photons est nul.

1. Calculer la densité spectrale de modes propres par unité de volume $\rho(\omega)$.
2. En déduire la densité spectrale d'énergie par unité de volume $u(\omega)$, formule de Planck. Donner ses limites de basse et haute fréquence. Montrer que son maximum évolue linéairement en fonction de la température.
3. On considère un ensemble de N atomes à deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 en équilibre à la température T avec le rayonnement thermique. En supposant que les atomes sont discernables, déterminer le rapport N_2/N_1 en fonction de la température T.

L'interaction avec le rayonnement électromagnétique entraîne des transitions entre les niveaux E_1 et E_2. On considère deux processus :

— l'émission spontanée entraînant des transitions $2 \to 1$

— l'absorption qui induit des transitions $1 \to 2$.

4. Écrire l'évolution des populations dN_1/dt et dN_2/dt en fonction de N_1, N_2, $u((E_2-E_1)/\hbar)$ ainsi que A et B coefficients d'Einstein indépendants de la température caractérisant les poids de ces deux processus.
5. En déduire que l'équilibre avec le rayonnement thermique est incompatible en général avec la description canonique des populations N_1 et N_2. Une solution est toutefois possible dans la limite des hautes fréquences. En déduire une relation entre A et B.
6. En suivant le raisonnement d'Einstein en 1917, montrer que cette contradiction peut être levée en introduisant un autre processus dont on donnera la forme et le nom.
7. Donner la valeur de N_1/N et N_2/N dans les limites de faible densité d'énergie et de large densité d'énergie du rayonnement électromagnétique.
8. À quelle condition peut-on avoir une amplification du rayonnement électromagnétique par l'interaction avec les atomes ?