3ème année IMACS-GP

Contrôle de Physique Statistique

11 avril 2019

Durée 1h15. Documents interdits, téléphones portables et calculettes interdits.

Étude d'un système à une dimension : électrons libres dans un fil quantique

On considère un gaz d'électrons (particules indiscernables de spin ½) confinés dans un fil quantique de longueur L. Leur relation de dispersion en énergie est $\boldsymbol{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$.

1 - Calculs de densités d'états

a - Calculer la densité d'état pour un système à **1 électron** se déplaçant librement dans un fil quantique (1D) de longueur L. Pour vous aider vous représenterez l'espace des phases de l'électron à 1D.

$$\Phi(E_0) = 2\frac{2k_0}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{2Lk_0}{\pi} = \frac{2L\sqrt{2mE_0}}{\pi\hbar}$$

$$\rho(E) = \frac{\mathrm{d}\Phi(E)}{dE} = \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\frac{1}{\sqrt{E}}$$

b – Calculer la densité d'état pour un système à **N électrons** (on prendra N pair) se déplaçant librement dans un fil quantique (1D) de longueur L.

$$E = \sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \text{ Avec } \vec{K} = \left|\begin{matrix} k_1 \\ k_2 \\ \cdots \\ k_i \\ k_N \end{matrix}\right. \text{ vecteur à N dimensions}$$

$$\Phi(E_0) = \frac{2^N}{N!}\frac{\frac{\pi^{N/2}K_0^N}{\frac{N}{2}!}}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^N} = \frac{1}{N!}\frac{L^N K_0^N}{\left(\frac{N}{2}\right)!\,\pi^{N/2}} = \frac{1}{N!}\left(\frac{L}{\hbar}\right)^N\frac{(2mE_0)^{\frac{N}{2}}}{\left(\frac{N}{2}\right)!\,\pi^{N/2}}$$

$$\rho(E) = \frac{\mathrm{d}\Phi(E)}{dE} = \frac{1}{N!}\left(\frac{L}{\hbar}\right)^N\frac{(2m)^{\frac{N}{2}}}{\left(\frac{N}{2}-1\right)!\,\pi^{N/2}}E^{\frac{N}{2}-1}$$

2- Description du fil contenant N électrons dans l'ensemble microcanonique

a- Rappeler la définition d'un ensemble microcanonique.

Système isolé de contraintes externes E,V,N. Le nombre de micro-états accessibles est donc $\Omega(E,V,N)$. **Les micro-états accessibles sont tous équiprobables, leur probabilité est donc $\boldsymbol{P = 1/\Omega(E,V,N)}$**. Le potentiel thermodynamique associé est l'entropie $S = kln\Omega(E,V,N)$

b- Déterminer le nombre de micro-états du système.

$$\Omega(E,V,N) = \rho(E)\Delta E$$

On prend pour ΔE la discrétisation en énergie. Sachant que

$$E = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \sum_{i=1}^{N}(n_{ix}^2 + n_{iy}^2 + n_{iz}^2)$$

On peut écrire que ΔE a pour autre de grandeur $\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$

Alors

$$\Omega(E,V,N) = \frac{1}{N!}\left(\frac{L}{\hbar}\right)^N \frac{(2m)^{\frac{N}{2}}}{\left(\frac{N}{2}-1\right)!\,\pi^{N/2}} E^{\frac{N}{2}-1} \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \approx \frac{1}{N!}\left(\frac{L}{\hbar}\right)^N \frac{(2m)^{\frac{N}{2}}}{\left(\frac{N}{2}-1\right)!\,\pi^{N/2}} \frac{\hbar^2}{2m} E^{\frac{N}{2}}$$

Car $L^2 \ll L^N$ et $(2\pi)^2 \ll \pi^{N/2}$

c- Donner l'expression de l'entropie (faire les approximations adéquates).

$$S = k\ln\Omega(E,V,N) = k\ln\left(\frac{1}{N!}\left(\frac{L}{\hbar}\right)^N \frac{(2m)^{\frac{N}{2}}}{\left(\frac{N}{2}-1\right)!\,\pi^{N/2}} \frac{\hbar^2}{2m} E^{\frac{N}{2}}\right)$$

$$\approx k\left(-N\ln N + N - \left(\frac{N}{2}\right)\ln\left(\frac{N}{2}\right) + \left(\frac{N}{2}\right) + N\ln\left(\frac{L}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{\pi}}\right) + \ln\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) + \frac{N}{2}\ln E\right)$$

$$\approx k\left(-N\ln N - \left(\frac{N}{2}\right)\ln(N) + (N)\ln(\sqrt{2}) + \frac{3N}{2} + N\ln\left(\frac{L}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{\pi}}\right) + \frac{N}{2}\ln E\right)$$

$$= k\left(-\frac{3N}{2}\ln N + \frac{3N}{2} + N\ln\left(2\frac{L}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{\pi}}\right) + \frac{N}{2}\ln E\right)$$

d- En déduire l'énergie totale du système en fonction de la température et du nombre de particule, ainsi que l'énergie moyenne d'un électron en fonction de la température.

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = k\frac{N}{2E} \rightarrow E = N\frac{kT}{2} \rightarrow \varepsilon = \frac{E}{N} = \frac{kT}{2}$$

3- Description du fil dans l'ensemble canonique

a- Rappeler la définition d'un ensemble canonique.

Système en contact avec un thermostat de contraintes externes T,V,N. **Un micro-état *i* a une probabilité donnée par $\frac{1}{Z}exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$ avec Z la fonction de partition du système $Z = \sum_i exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)$.** Le potentiel thermodynamique associé est l'énergie libre $F = -kT\ln Z(T,V,N)$

b- Calculer la fonction de partition pour **1 électron** dans le fil.

$$Z = \int_0^\infty \rho(E) exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE = \int_0^\infty \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\frac{1}{\sqrt{E}} exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE$$

On pose $X = \frac{E}{kT}$

$$Z = \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{kTX}} exp(-X) kT dX = \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\sqrt{kT}\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{X}} exp(-X) dX = \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar}\sqrt{kT}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$= \frac{L\sqrt{2m}}{\hbar\sqrt{\pi}}\sqrt{kT} = \frac{L\sqrt{2m}}{\hbar\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{1}{\beta}}$$

c- En déduire l'énergie moyenne de l'électron et comparer avec le résultat de la question 2-d.

$$\langle\varepsilon\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta} lnZ = \frac{\partial}{\partial\beta}\left(-ln\frac{L\sqrt{2m}}{\hbar\sqrt{\pi}} + ln\sqrt{\beta}\right) = \frac{1}{2}kT$$

On retrouve bien le même résultat qu'à la question 2-d. L'équilibre est identique lorsque le système est porté à une température *T* donnée. De plus on peut spécifier que l'énergie s'écrit sous forme quadratique. On a un degré de liberté lorsque l'électron se déplace à 1D, le résultat est en accord avec le théorème d'equipartition de l'énergie.

d- Déduire de 3-b la fonction de partition pour **N électrons** et calculer l'énergie moyenne du système à N électrons, comparer avec le résultat de la question 2-d.

$$Z_N = \frac{1}{N!}Z^N = \frac{1}{N!}\left(\frac{L\sqrt{2m}}{\hbar\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{1}{\beta}}\right)^N$$

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta} lnZ_N = -\frac{\partial}{\partial\beta} ln\left(\frac{1}{N!}Z^N\right) = \frac{N}{2}kT$$

On retrouve bien le même résultat qu'à la question 2-d pour les mêmes raisons évoquées précédemment. De plus on peut spécifier que l'énergie s'écrit sous forme quadratique. On a N degré de liberté lorsque les N électrons se déplacent à 1D, le résultat est en accord avec le théorème d'equipartition de l'énergie.

On rappelle :

- Volume de l'hypersphère à n dimensions :

$$pour\ n\ pair\ V_{hs} = \frac{\pi^{n/2}R^n}{\frac{n}{2}!}\ et\ pour\ n\ impair\ V_{hs} = 2^{(n+1)/2}\frac{\pi^{n-1/2}R^n}{1\times 3\times 5 \ldots \times n}$$

- Formule de Stirling : $\lim_{N\to\infty} N! = NlnN - N$

- Fonction Gamma

$$\Gamma(n) = \int_0^\infty x^{n-1}e^{-x}dx\ ;\ \Gamma(n) = (n-1)\Gamma(n-1)\ ;\ \Gamma(1) = 1\ ;\ \Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$$