

# "Physique Quantique et Statistique"

## PH1100

Le 30 juin 2014.

**Durée : 3h00** Contrôle **Sans** documents.

On pourra trouver utile la présence d'un **formulaire** en fin d'énoncé.

**Toutes les réponses devront être justifiées et rédigées avec soin.**

Les applications numériques ne sont **pas** facultatives.

Les calculatrices n'étant pas indispensables, elles ne sont pas autorisées.

Répondre sur les feuilles en dessous de chaque question. Utiliser le verso si nécessaire.

Nom et prénom : **CORRECTION :** \_\_\_\_\_

Pas de demi-points. Mettre une trace de passage partout. Rayer les espaces blancs. Si la réponse est correcte (quel que soit le raisonnement adopté, pour peu qu'il soit clair et correct) mettre la totalité des points. Le détail n'est utile que dans le cas où le résultat final est faux.

## 1 Tour de chauffe avec les ordres de grandeur

1. Donner l'énergie (en eV) d'un photon dans le domaine du visible

Solution (1 pt)

$$E \approx 1 - 2 \text{ eV}$$

2. La raideur de la liaison d'une molécule de di-oxygène  $^{16}\text{O}_2$  est d'environ 100 N/m. Donner la fréquence propre, l'énergie de vibration de l'état fondamental en eV et la température caractéristique de vibration de cette molécule.

Solution (3 pt)

La masse réduite est d'environ  $8 \times 10^{-3} / (6 \times 10^{23}) \approx 10^{-26} \text{ kg}$  (1pt)

. La fréquence propre de vibration est de l'ordre de  $10^{14} \text{ s}^{-1}$  (1pt)

. L'énergie est  $10^{-20} \text{ J}$  et 0,1 eV. Il est résulte que  $T \approx 1000 \text{ K}$  (1pt)

3. Donner l'ordre de grandeur de la température de Fermi d'un métal

Solution (1 pt)

$$T_f \approx 10^4 - 10^5 \text{ K}$$

### 1.1 Où l'on poursuit avec quelques connaissances de base.

1. A quelle condition sur la longueur d'onde de Broglie des particules d'un gaz la mécanique classique est-elle applicable ?

Solution (1 pt)

MC applicable si  $\lambda_{DB} \ll \bar{d}$  distance moyenne entre particules du gaz

2. Donner les énergies propres de l'oscillateur harmonique linéaire (1D) de fréquence propre  $\omega$ , ainsi que leur dégénérescence.

Solution (2 pt)

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

$n = 0 \dots \infty$  (1pt si expression correcte ET appartenance de  $n$ )

dégénérescence du niveau  $n = 1$  (pas dégénérescence) (1pt)

3. Peut-on mesurer simultanément le carré du moment cinétique orbital d'une particule  $\vec{L}^2$  et la projection de celui-ci selon  $x$ ,  $L_x$ ? Pourquoi? Peut-on mesurer simultanément la projection du moment cinétique orbital d'une particule selon  $x$ ,  $L_x$ , le carré de  $L$ ,  $\vec{L}^2$ , et la projection selon  $x$  de son spin  $S_x$ ? Pourquoi?

Solution (2 pt)

$\vec{L}^2, L_x$  : OUI car les deux opérateurs associés commutent. (1pt)

$\vec{L}^2, L_x, S_x$  : OUI car les opérateurs associés commutent deux à deux (1pt)

4. Un gaz d'électrons dans un solide (macroscopique) peut-il être à la limite classique? On donnera une justification en estimant la longueur d'onde de De Broglie des électrons à  $T=10$  K et à  $T=1000$  K. Qu'en est-il d'un gaz de molécules (ex :  $O_2$ ) dans un récipient macroscopique à température et pression ambiantes?

Solution (4 pt)

Dans un solide, la distance moyenne entre électrons  $\bar{d} \approx 1$  angstroem (1pt)

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m_e k_B T}} \approx 240 \text{ \AA} \text{ à } T=10K (1pt)$$

$\lambda_{DB} \approx 24$  angstroem à  $T=1000K \rightarrow$  On n'a JAMAIS la condition  $\lambda_{DB} << \bar{d}$  (1pt)

Le gaz d'électrons dans un solide n'est JAMAIS à la limite classique.

En revanche, un gaz de molécules peut être à la limite classique (la longueur d'onde de De Broglie est plus petite et la distance entre molécules est plus grande). (1pt)

(1pt bonus si calcul de  $\lambda_{DB}$  pour une molécule)

5. Donner un exemple de système formé d'entités identiques DISCERNABLES.

Solution (1 pt)

Sites d'un cristal, d'une surface, ou spins d'un système magnétique (avec ions magnétiques bien localisés)

## 2 L'effet Zenon quantique

L'état d'une particule dans un double puits est décrit par  $|\Psi(t)\rangle$ . Cet état  $|\Psi(t)\rangle$  peut s'écrire sur la base formée par  $|g\rangle$  (particule dans le puits de gauche) et  $|d\rangle$  (particule dans le puits de droite). On dispose d'un appareil capable de mesurer la position de la particule :  $x = 0$  pour  $|g\rangle$  et  $x = 1$  pour  $|d\rangle$ . Les états  $|g\rangle$  et  $|d\rangle$  sont donc états propres de l'opérateur position  $\hat{x}$  avec les valeurs propres respectives 0 et 1. Les états  $|g\rangle$  et  $|d\rangle$  peuvent s'écrire dans la base des états propres de l'énergie  $|\phi_1\rangle$  et  $|\phi_2\rangle$  (de valeurs propres  $E_1$  et  $E_2$  respectivement, avec  $E_2 > E_1$ ) :

$$|g\rangle = \frac{|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|d\rangle = \frac{|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle}{\sqrt{2}}$$

où les kets sont tous normés.

1. Si l'état initial du système est  $|\Psi(t=0)\rangle = |d\rangle$ , quel sera l'état du système à un instant  $t$  ultérieur ? Exprimez-le sur la base  $\{|g\rangle, |d\rangle\}$  en introduisant  $\hbar\omega = 1/2(E_1 + E_2)$  et  $\hbar\Omega = 1/2(E_2 - E_1)$ . On suppose qu'aucune mesure de position n'est réalisée.

Solution (2 pt)

L'état initial du système est  $|\Psi(t=0)\rangle = (|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle)/\sqrt{2}$  dans la base des énergies, son évolution est donc donnée par :

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= [|\phi_1\rangle \exp(-iE_1t/\hbar) + |\phi_2\rangle \exp(-iE_2t/\hbar)]/\sqrt{2} \text{ (1pt)} \\ &= \frac{|d\rangle}{2} [\exp(-iE_1t/\hbar) + \exp(-iE_2t/\hbar)] + \frac{|g\rangle}{2} [\exp(-iE_1t/\hbar) - \exp(-iE_2t/\hbar)] \\ &= [|d\rangle \cos(\Omega t) + i|g\rangle \sin(\Omega t)] \exp(-i\omega t) \text{ (1pt)} \end{aligned}$$

2. On effectue une mesure de position à un instant  $t = \tau$  donné. Quelle(s) valeur(s) mesure-t-on ? Avec quelle(s) probabilité(s) ? Quel est l'état du système juste après cette mesure (à  $t = \tau^+$ ) ?

Solution (2 pt)

Le résultat de la mesure peut être uniquement 0 ou 1 :

- C'est  $x = 0$  avec une probabilité  $P(x = 0, t = \tau) = |\langle g | \Psi(\tau) \rangle|^2 = \sin^2(\Omega\tau)$  et alors  $|\Psi(\tau^+)\rangle = |g\rangle$ .
- C'est  $x = 1$  avec une probabilité  $P(x = 1, t = \tau) = |\langle d | \Psi(\tau) \rangle|^2 = \cos^2(\Omega\tau)$  et alors  $|\Psi(\tau^+)\rangle = |d\rangle$

(1pt pour les probabilités et 1pt pour les états après mesures)

3. Supposons que le résultat de cette mesure soit  $x = 1$ . On réalise une deuxième mesure à  $t = 2\tau$ . Quelle est la probabilité de mesurer de nouveau  $x = 1$  ?

Solution (2 pt)

La deuxième mesure intervient dans des conditions équivalentes à la première car  $|\Psi(\tau^+)\rangle = |d\rangle$  (1pt)

et cet état évolue pendant un temps  $2\tau - \tau = \tau$  avant la mesure, donc  $P(x = 1, t = 2\tau) = P(x = 1, t = \tau) = \cos^2(\Omega\tau)$ . (1pt)

4. Si, en partant de  $|\Psi(t=0)\rangle = |d\rangle$ , on réalise la mesure  $N$  fois de suite à des intervalles  $\tau$ . Quelle est la probabilité de mesurer  $N$  fois  $x = 1$  ?

Solution (1 pt pt)

Pour la même raison qu'en 3), chaque mesure successive intervient dans des conditions équivalentes à la première, donc  $p = P(x = 1, t = N\tau) = \cos^2(\Omega\tau)$ .

La probabilité de mesurer  $N$  fois de suite  $x = 1$  est

$$p^N = \cos^{2N}(\Omega\tau)$$

(1pt)

5. Que devient cette probabilité lorsque  $\tau$  devient très court ? Quelle condition sur  $\tau$  permet d'affirmer qu'il s'agit d'un temps très court ?

Solution (2 pt pt)

Si l'argument du cosinus devient petit  $p^N \approx 1 + O((\Omega\tau)^2)$ . (1pt)

Donc au premier ordre, on est certain de mesurer toujours  $x = 1$  et de rester dans  $|d\rangle$ .

La condition pour que l'argument soit petit est que  $\tau \ll 2\pi/\Omega$ . (1pt)

6. Concluez : quel est le comportement du système quand on ne fait pas de mesure ? Quelle est la conséquence d'observer très fréquemment l'état du système ?

Solution (2 pt)

Si le système n'est pas mesuré il oscille entre ses états avec une période  $2\pi/\Omega$  (1pt)

L'observation fréquente de l'état du système fige celui-ci dans son état de départ  $|d\rangle$  et l'empêche d'évoluer, car avant que la composante sur  $|g\rangle$  atteigne une amplitude significative, la fonction d'onde est projetée sur  $|d\rangle$  par la mesure. La dynamique du système est donc bloquée par son observation. (1pt)

### 3 Modèle de Debye de capacité calorifique des isolants

Les questions des différentes sections, si elles sont thématiquement reliées, ne nécessitent pas d'être traitées dans l'ordre et peuvent être considérées indépendamment.

#### 3.1 Où l'on commence à s'intéresser aux gaz parfaits

Après avoir rappelé les conditions permettant de traiter une assemblée d'atomes identiques comme un gaz parfait à 3 dimensions, démontrer, en partant de la fonction de partition d'un atome, que la capacité calorifique d'un gaz parfait est une constante proportionnelle au nombre d'atomes contenus dans l'enceinte. On trouvera la constante de proportionnalité en supposant que le système est en équilibre avec un thermostat à température  $T$ .

On donne :  $\int_0^{+\infty} e^{-x^2} x^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4}$

Solution (5 pt)

On attend ici une véritable démonstration à partir de la fonction de partition. C'est-à-dire de reprendre le cours in-extenso en détaillant les étapes.

- Les particules sont libres et indépendantes. De ce fait l'énergie totale est constituée de la somme des énergies individuelles et un état de l'ensemble est la juxtaposition des états individuels :

$$Z = \sum_s e^{-\beta E_s} = \sum_s e^{-\sum_i \beta \epsilon_i} = \frac{1}{N!} \prod_i \sum_{s_i} e^{-\beta \epsilon_i} = \frac{\zeta^N}{N!}$$

où l'on a pas oublié la correction de Gibbs pour les particules indiscernables d'un gaz d'atomes identiques. (2pt ou 1pt si pas Gibbs)

- On calcule la fonction de partition mono-atomique en passant par l'approximation classique :

$$\zeta = \int e^{-\beta p^2/2m} \frac{1}{h^3} p^2 dp dr^3 = \frac{V}{\Lambda^3}$$

et  $\Lambda = \sqrt{\beta \frac{2\pi\hbar^2}{m}}$ . (1pt)

- On calcule l'énergie moyenne :

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{3}{2} N k_B T \text{ (1pt)}$$

- On en tire la capacité calorifique :

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3}{2} N k_B \text{ (1pt)}$$

### 3.2 Où l'on décrit les vibrations d'un solide par un ensemble de pseudo-particules

Les propriétés thermiques des solides isolants trouvent leur origine dans le mouvement des atomes. L'existence de ces vibrations mécaniques peut être représentée par des (pseudo-) particules que l'on nomme "phonons". Du point de vue thermique, l'isolant peut alors être considéré simplement comme un gaz quantique de phonons libres, sans interaction. Le phonon est donc le représentant des vibrations acoustiques du solide au même titre que le photon est celui des ondes électromagnétiques : un phonon correspond à un quantum d'énergie d'une onde de vibration harmonique du solide, c'est-à-dire qu'il est caractérisé par un vecteur d'onde  $\vec{q}$ , une polarisation de vibration  $\vec{\sigma}$  et une pulsation  $\omega_{\vec{q},\vec{\sigma}}$ . Nous résumerons l'état d'un phonon par le ket  $|\vec{q}, \vec{\sigma}\rangle$ . Un phonon dans l'état quantique  $|\vec{q}, \vec{\sigma}\rangle$  porte donc la différence d'énergie entre deux états consécutifs d'un oscillateur harmonique  $\hbar\omega_{\vec{q},\vec{\sigma}}$ . Tout comme les photons, les phonons sont des bosons dont nous supposons le potentiel chimique nul.

1. Expliquer pourquoi il peut exister plusieurs phonons de même vecteur d'onde et de même polarisation.

Solution (1 pt)

Les phonons sont des bosons, il leur est donc possible de partager un même état quantique.

2. Quelle est la fréquence propre d'un oscillateur dont l'excitation minimale est portée par un phonon d'énergie 1/40 eV ?

Solution (2 pt)

La relation à utiliser est  $E = \hbar\omega \approx \frac{1,6 \times 10^{-19}}{40} \approx 4 \times 10^{-21} \text{ J}$  (1pt)

Soit  $\omega \approx 4 \times 10^{13} \text{ rad/sec.}$  (1pt)

3. Dans un cristal tri-dimensionnel, une onde de vibration peut être longitudinale (le vecteur déplacement/déformation est co-linéaire à la propagation) ou transversale (le vecteur déplacement/déformation est perpendiculaire à la propagation). Expliquer pourquoi il existe alors trois états de polarisation possibles (on pourra faire un schéma explicatif). Par la suite, on notera un état quantique vibrationnel associé au vecteur d'onde  $\vec{q} : |\vec{q}, 0\rangle, |\vec{q}, 1\rangle, |\vec{q}, 2\rangle$ , selon son état de polarisation. "0" fait référence à une polarisation longitudinale.

Solution (1 pt)

Il n'existe qu'une seule manière d'être longitudinal mais pour un vecteur d'onde donné, il existe deux directions perpendiculaires. Ceci donne donc un total de 3 polarisations possibles de l'onde déformation.

4. Quelle est l'énergie vibrationnelle totale du cristal s'il existe seulement 2 phonons de l'état  $|\vec{q}_a, 0\rangle$  et 3 phonons de l'état  $|\vec{q}_b, 1\rangle$  ?

Solution (2 pt)

L'énergie de chaque phonon étant donnée par l'énergie de l'oscillateur harmonique associé à la fréquence propre :

$$E = \frac{5}{2} \hbar \omega_{\vec{q}_a, 0} + \frac{7}{2} \hbar \omega_{\vec{q}_b, 1}$$

(1pt pour chaque composante)

5. Pourquoi, quelle que soit la taille du cristal, importe-t-il peu que l'ensemble représentatif choisi soit canonique ou grand-canonique ?

Solution (1 pt)

Le potentiel chimique est supposé nul, de ce fait les fonctions partition sont identiques. Ceci n'a donc rien à voir avec la limite thermodynamique.

6. Montrer que la fonction de partition du gaz de phonons dans le cristal peut s'écrire :

$$\Xi = \prod_{i=0,1,2} \prod_{\vec{q}} \frac{1}{2 \sinh[\beta \hbar \omega_{\vec{q}, i} / 2]}$$

où l'on rappelle (s'il en était besoin) :  $\sinh x = (e^x - e^{-x}) / 2$ .

Solution (2 pt)

$$\Xi = \sum_s e^{-\beta E_s} = \sum_{\{n_{\vec{q}}\}} e^{-\sum_{\vec{q}} \sum_{i=0,1,2} \beta(n_{\vec{q},i} + 1/2) \hbar \omega_{\vec{q},i}} = \sum_{\{n_{\vec{q}}\}} \prod_{i=0,1,2} \prod_{\vec{q}} e^{-\beta(n_{\vec{q},i} + 1/2) \hbar \omega_{\vec{q},i}} \quad (1\text{pt})$$

par la vertu de la célèbre permutation des sommes et des produits :

$$\Xi = \prod_{i=0,1,2} \prod_{\vec{q}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1/2) \hbar \omega_{\vec{q},i}} = \prod_{i=0,1,2} \prod_{\vec{q}} \frac{e^{-\beta \hbar \omega_{\vec{q},i}/2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega_{\vec{q},i}}} = \prod_{i=0,1,2} \prod_{\vec{q}} \frac{1}{2 \sinh[\beta \hbar \omega_{\vec{q},i}/2]} \quad (1\text{pt})$$

7. Montrer que  $U$ , l'énergie moyenne (macroscopique) vibrationnelle du cristal, s'écrit comme une somme de termes indépendants, chaque terme s'exprimant seulement à partir de la température du thermostat et de la fréquence propre associée à un vecteur d'onde et une polarisation.

Solution (2 pt)

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi$$

Même si ce n'est pas nécessairement le plus simple, on trouve alors :

$$U = \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{i=0,1,2} \sum_{\vec{q}} \ln \{2 \sinh[\beta \hbar \omega_{\vec{q},i}/2]\} \quad (1\text{pt})$$

La dérivée de  $\sinh$  donne un  $\cosh$ , soit pour la dérivée logarithmique, un  $\tanh$  :

$$U = \sum_{i=0,1,2} \sum_{\vec{q}} \frac{\hbar \omega_{\vec{q},i}/2}{\tanh[\beta \hbar \omega_{\vec{q},i}/2]} \quad (1\text{pt})$$

8. D'après les statistiques quantiques, quel est le nombre moyen  $\bar{N}_{\omega_{\vec{q},i}}$  de bosons associés à une fréquence propre  $\omega_{\vec{q},i}$  donnée (on ne demande pas la démonstration) ? En transformant l'expression obtenue ci-dessus, ré-écrivez alors l'énergie moyenne trouvée à la question précédente en fonction de  $\bar{N}_{\omega_{\vec{q},i}}$  et interpréter physiquement le résultat ainsi obtenu.

**Solution (3 pt)**

Le nombre de moyen de bosons dans un état d'énergie fixée est donné par la statistique de Bose-Einstein pour un potentiel chimique nul :

$$\bar{n}_{B.E.}(\vec{q}, i) = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega_{\vec{q}, i}} - 1} \text{ (1pt)}$$

Si l'on ré-écrit la tanh sous la forme :

$$\frac{1}{\tanh x/2} = \frac{e^{x/2} + e^{-x/2}}{e^{x/2} - e^{-x/2}} = \frac{e^x + 1}{e^x - 1} = \frac{e^x - 1 + 2}{e^x - 1} = 1 + \frac{2}{e^x - 1} = 2 \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^x - 1} \right)$$

donc, finalement :

$$2 \left( \frac{1}{2} + \bar{n}_{B.E.}(\vec{q}, i) \right) \text{ (1pt)}$$

et l'on trouve :

$$U = \sum_{i=0,1,2} \sum_{\vec{q}} \left( \frac{1}{2} + \bar{n}_{B.E.}(\vec{q}, i) \right) \hbar \omega_{\vec{q}, i} \text{ (1pt)}$$

L'énergie totale est donc la somme des énergies moyennes de chaque oscillateur harmonique, où la statistique de B.E. fournit le degré moyen d'excitation.

9. Montrer que la capacité calorifique à volume constant<sup>1</sup> est une fonction de la forme :

$$C_v = k_B \sum_{i=0,1,2} \sum_{\vec{q}} (\beta \hbar \omega_{\vec{q}, i})^2 \frac{e^{\beta \hbar \omega_{\vec{q}, i}}}{(e^{\beta \hbar \omega_{\vec{q}, i}} - 1)^2}$$

On rappelle que  $\partial_x (1/\tanh x) = -1/\sinh^2 x$ .

**Solution (2 pt)**

Il suffit ici de dériver l'expression obtenue pour l'énergie par rapport à  $T$  :

$$C_v = \sum_{i=0,1,2} \sum_{\vec{q}} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\hbar \omega_{\vec{q}, i}/2}{\tanh[\beta \hbar \omega_{\vec{q}, i}/2]} = \sum_{i=0,1,2} \sum_{\vec{q}} \left[ \frac{\hbar \omega_{\vec{q}, i}/2}{k_B T^2} \right] \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{-1}{\tanh[\beta \hbar \omega_{\vec{q}, i}/2]} \text{ (1pt)}$$

Soit, après dérivation :

$$C_v = \frac{k_B}{4} \sum_{i=0,1,2} \sum_{\vec{q}} \left[ \frac{\hbar \omega_{\vec{q}, i}}{k_B T} \right]^2 \frac{1}{\sinh^2[\beta \hbar \omega_{\vec{q}, i}/2]} \text{ (1pt)}$$

Ce qui après factorisation d'une exponentielle pour l'amener au numérateur fait apparaître l'expression demandée.

### 3.3 Où l'on appelle Debye à la rescousse

L'expression de la capacité calorifique que l'on a obtenue à la section précédente reste souvent difficile à calculer pour une première approche, notamment pour les régimes de températures intermédiaires.

Debye a alors proposé un modèle simplifié dans lequel on postule que les phonons obéissent à une relation de dispersion linéaire  $\omega_{\vec{q}, i} = c_i |\vec{q}|$  où les coefficients  $c_i$  sont des constantes dont les valeurs sont supposées connues pour un solide donné.

On supposera dans toute cette section que l'approximation classique est satisfaite. On utilisera donc à bon escient la densité de vecteurs d'onde  $g(\vec{q}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$ . On rappelle que  $g(\vec{q})d^3q$  est le nombre d'états dont le vecteur d'onde est compris entre  $\vec{q}$  et  $\vec{q} + d\vec{q}$ .

<sup>1</sup>. La capacité calorifique est la quantité d'énergie que l'on doit apporter (ici à volume constant) au système pour en accroître la température d'un degré.



1. On admet que, dans la limite des très hautes températures, l'énergie thermique  $k_B T$  est toujours bien supérieure à  $\hbar\omega$  et qu'alors tout se passe comme si l'on pouvait négliger les liaisons entre atomes du cristal. Les propriétés du solide deviennent dans ce cas celles d'un gaz parfait. La théorie de Debye prévoit qu'alors, pour que ce comportement asymptotique soit correctement pris en compte dans le modèle, il est nécessaire que les vecteurs d'onde ne puissent avoir un module supérieur à une valeur donnée  $q_D$ .

Montrer, en comparant la capacité calorifique du gaz parfait et celle du solide dans la limite  $k_B T \gg \hbar\omega$ , que  $q_D = (3\pi^2 \times N/V)^{1/3}$ .

On remplacera la somme sur les vecteurs d'onde par une intégrale en utilisant l'approximation classique.

Solution (2 pt)

La capacité calorifique du gaz parfait est  $3Nk_B/2$ . Pour le cristal, lorsque  $\beta\hbar\omega \ll 1$ , les conditions d'application de l'approximation classique sont automatiquement satisfaites :

$$C_v = \frac{k_B}{4} \sum_{i=0,1,2} \int_0^{q_D} 4\pi q^2 \frac{V}{(2\pi)^3} \left[ \frac{\hbar\omega_{\vec{q},i}}{k_B T} \right]^2 \frac{1}{\sinh^2 [\beta\hbar\omega_{\vec{q},i}/2]} dq \text{ (1pt)}$$

$$\approx k_B \sum_{i=0,1,2} \int_0^{q_D} 4\pi q^2 \frac{V}{(2\pi)^3} dq$$

On trouve donc, pour le cristal :

$$C_v = k_B q_D^3 \frac{V}{2\pi^2} \text{ (1pt)}$$

qui doit s'égaliser avec  $3Nk_B/2$ . On en tire alors, la valeur de  $q_D$  :

$$q_D = \left( 3 \frac{N}{V} \pi^2 \right)^{1/3} \text{ (1pt)}$$

(1pt)

2. Pour fixer les idées, supposons que le cristal étudié soit constitué d'un réseau d'atomes placés périodiquement, dans les 3 directions de l'espace, tous les 1 Å. On nomme "température de Debye", la température  $T_D$  telle que  $k_B T_D$  corresponde à l'énergie maximale d'un phonon de ce système. Estimer  $T_D$  pour le cristal alors que  $c_0 \approx c_1 \approx c_2 \approx 1500 \text{ m/s}$  représente la vitesse du son dans le solide.

Solution (2 pt)

On doit avoir :

$$k_B T_D = \hbar\omega_D = \hbar c \left( 3 \frac{N}{V} \pi^2 \right)^{1/3} \approx 10^{-34} \times 1,5 \times 10^3 \times (3^3 \times 10^{30})^{1/3} \approx 4,5 \times 10^{-21} \text{ J}$$

On en tire :  $T_D \approx 300 \text{ K}$ .

(1pt pour la partie littérale, 1pt pour la valeur numérique)

3. Expliquer le comportement qualitatif à basse température de la capacité calorifique représentée sur la figure 1. Lorsque la température tend vers 0, la capacité calorifique décroît comme

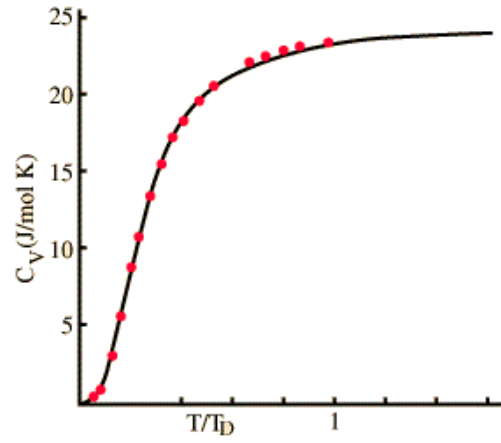


FIGURE 1 – Capacité calorifique. Les points représentent les valeurs expérimentales et la ligne continue le modèle de Debye.  $T_D$  est la température de Debye définie à partir de l'énergie du phonon associé à la fréquence maximale  $\omega_D$

$T^\alpha$ . Donner la valeur de  $\alpha$ .

On supposera que, même à basse température, l'approximation classique est justifiée. On pourra poser que la température est suffisamment basse pour que  $\int_0^{\beta\hbar\omega_D} x^4 e^{-x} dx \approx 24$ .

Solution (3 pt)

A basse température  $\beta\hbar\omega_D \gg 1$ . Seuls les phonons de très faible fréquence seront activés. La capacité calorifique de Debye suit la loi :

$$C_v = \frac{k_B}{4} \sum_{i=0,1,2} \sum_{\vec{q}} \left[ \frac{\hbar\omega_{\vec{q},i}}{k_B T} \right]^2 \frac{1}{\sinh^2 [\beta\hbar\omega_{\vec{q},i}/2]} \approx k_B \sum_{i=0,1,2} \sum_{\vec{q}} \left[ \frac{\hbar\omega_{\vec{q},i}}{k_B T} \right]^2 e^{-\beta\hbar\omega_{\vec{q},i}} \quad (1\text{pt})$$

Soit en introduisant l'approximation classique et  $\omega_i = c_i q$

$$C_v \approx k_B \sum_{i=0,1,2} \int_0^{q_D} \frac{V}{(2\pi)^3} \left[ \frac{\hbar c_i q}{k_B T} \right]^2 e^{-\beta\hbar c_i q} 4\pi q^2 dq$$

On pose  $y = \hbar c_i q / (k_B T)$  (1pt)

:

$$C_v \approx k_B \sum_{i=0,1,2} \left( \frac{k_B T}{c_i \hbar} \right)^3 \int_0^{\hbar\omega_D/(k_B T)} \frac{V}{(2\pi)^3} y^2 e^{-y} 4\pi y^2 dy$$

Aux très basses températures, on peut remplacer la borne supérieure de l'intégrale par  $\infty$ . L'intégrale vaut donc 24 et la capacité calorifique dans le cadre du modèle de Debye :

$$C_v \approx T^3 \frac{12\pi V k_B^4}{h^3} \sum_{i=0,1,2} \frac{1}{c_i^3}$$

On trouve donc  $\alpha = 3$ . (1pt)

## 4 Formulaire

On donne les informations suivantes (toutes ne sont pas nécessairement utiles!!) :

- Masse de l'électron :  $m_e \approx 10^{-30}$  kg
- Masse du proton :  $m_p \approx 10^{-27}$  kg
- Masse du Soleil :  $M_\odot \approx 1,9891 \cdot 10^{30}$  kg
- Masse de la Lune :  $m_L \approx 7,35 \times 10^{22}$  kg
- Masse de la Terre :  $M_T \approx 6 \times 10^{24}$  kg
- Masse molaire de l'oxygène :  $A \approx 16$  g/mol
- Masse molaire du carbone :  $A \approx 12$  g/mol
- Masse molaire de l'or :  $A = 197$  g/mol
- Nombre d'Avogadro (nombre d'atomes par mole) :  $N_A = 6,02 \cdot 10^{23}$
- Constante de Boltzmann :  $k_B \approx 1,38 \cdot 10^{-23}$  J.K $^{-1}$
- Hauteur de la Tour Eiffel :  $h_{TE} = 324$  m (antenne comprise)
- Distance Terre Lune :  $R_{T-L} \approx 3,84 \times 10^8$  m
- Constante gravitationnelle :  $G \approx 6,67 \times 10^{-11}$  m $^3$ kg $^{-1}$ s $^{-2}$
- Champ magnétique terrestre  $B \approx 47 \times 10^{-6}$  T
- Charge de l'électron :  $q_e \approx 1,6 \cdot 10^{-19}$  C
- Quelques rapports gyromagnétiques.
  - \* Electron :  $\gamma_e \approx -1,76 \times 10^{11}$  rad s $^{-1}$  T $^{-1}$ ,
  - \* proton :  $\gamma_p \approx 267,5 \times 10^6$  rad s $^{-1}$  T $^{-1}$ ,
  - \* neutron :  $\gamma_n \approx 183 \times 10^6$  rad s $^{-1}$  T $^{-1}$ ,
  - \* deuton :  $\gamma_d \approx 41 \times 10^6$  rad s $^{-1}$  T $^{-1}$
- Equation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)$$

- Opérateur énergie cinétique :  $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
- Opérateur création  $\hat{a}^\dagger = \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}}{\sqrt{2}}$
- Opérateur annihilation  $\hat{a} = \frac{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\hat{p}}{\sqrt{2}}$
- Charge de l'électron :  $q_e = -e = -1,6 \cdot 10^{-19}$  C
- Constante de Planck :  $\hbar = h/(2\pi) \approx 10^{-34}$  J.s.
- Énergie cinétique de rotation d'un corps rigide de moment d'inertie  $I$  et de moment cinétique  $\vec{L}$  :  $E_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2I}$
- Relation entre moment magnétique et moment cinétique :  $\vec{\mu} = \gamma\vec{L} + 2\gamma\vec{S}$  avec  $\gamma$ , le rapport gyromagnétique de la particule.
- Dipole d'une distribution de charges ponctuelles :  $\vec{D} = \sum_i q_i \vec{r}_i$
- Force,  $\vec{f}(\vec{r},t)$ , dérivant d'un potentiel,  $V(\vec{r},t)$  :  $\vec{f}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}_{\vec{r}} \cdot V(\vec{r},t)$
- $\ln(2) = 0,69$ , de même que  $\ln(3) = 1,1$  ou encore  $\ln(5) = 1,6$  et en plus  $\ln(7) = 1,9$  puis enfin  $\ln(10) = 2,3$
- Approximation de Stirling  $\ln(N!) \approx N \ln(N) - N$  si  $N \gg 1$ .
- En grand canonique, l'énergie moyenne s'écrit  $\bar{E} = \mu\bar{N} - \frac{\partial}{\partial\beta} \ln \Xi$
- En représentation canonique, le potentiel chimique est donné par  $\mu = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial N}$
- La "fonction delta" aussi connue sous le nom de "Distribution de Dirac" est notée  $\delta(x)$  et définie sur  $\mathbb{R}$  de telle sorte que pour toute fonction d'essai continue en  $x = x_0$ ,  $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0)f(x)dx = f(x_0)$ .
- On a aussi :  $\int_0^{+\infty} x^n \exp(-x)dx = n!$
- Et puis aussi :  $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\alpha x^2)dx = \sqrt{\pi/\alpha}$
- $\int_0^L x^2 \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{L^3}{12} \left(2 - \frac{3}{\pi^2}\right)$