

Examen — 1^{re} session

Aucun document ni calculatrice ne sont autorisés

Durée de l'épreuve : 2h

Le sujet comprend 4 pages au total

I–Modèle simple de supraconducteur

Les supraconducteurs sont des matériaux dont la résistivité s'annule brutalement en deçà d'une température critique noté T_c . On souhaite proposer un modèle simple permettant de décrire ces propriétés supraconductrices. Pour cela, on suppose que les électrons libres du conducteur, de masse m_e , proches en énergie du niveau de Fermi ont la possibilité de s'associer par deux pour former un état lié appelé *paire de Cooper*. Ces paires de Cooper se comportent donc comme des particules de masses $2m_e$ et de spin $s = 1$.

Les deux premières parties de cet exercice rappellent quelques propriétés générales des gaz parfaits de fermions et de bosons. Dans la troisième partie on s'intéresse à la description de la phase supraconductrice.

1 Généralités sur un gaz de fermions

- 1/ Quelle est la distribution statistique adaptée à la description du gaz d'électrons libres d'un conducteur. Justifier votre réponse.
- 2/ Rappeler l'expression de la distribution de Fermi-Dirac $n_{FD}(\epsilon)$ et donner son allure en fonction de l'énergie ϵ pour différentes températures. Donner sans démonstration l'expression de l'énergie ϵ_k d'un état quantique de vecteur d'onde $\mathbf{k}$?
- 3/ On considère un gaz d'électron en dimension 3, occupant un volume V à la température T . Retrouver l'expression de la densité d'état en fonction de k , puis en fonction de l'énergie.
- 4/ On suppose que l'on peut se placer dans la limite $T = 0$. Que vaut le potentiel chimique dans cette approximation ? Donner la relation permettant de calculer le nombre d'électrons dans le système et en déduire l'expression de l'énergie de Fermi ϵ_F en fonction de la densité volumique d'électron n_e . Dans quelle gamme de température l'approximation $T = 0$ est-elle correcte (on donnera une estimation numérique pour un gaz d'électrons libres de masse $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg).

2 Généralités sur un gaz de bosons

On considère un gaz parfait de N bosons de masse m et de spin 1 en contact avec un thermostat à la température T .

- 1/ Rappeler l'expression de la distribution de Bose-Einstein $n_{BE}(\epsilon)$ et donner son allure en fonction de ϵ pour différentes températures. Quelle condition doit satisfaire le potentiel chimique ?
- 2/ Donner qualitativement l'allure du potentiel chimique en fonction de T . On notera T_B la température pour laquelle le potentiel chimique s'annule. Expliquer qualitativement ce qui se passe pour $T < T_B$. On rappelle que T_B est définie par la relation

$$\frac{N}{2V} \left(\frac{h^2}{2\pi m k_B T_B} \right)^{3/2} = 2,612.$$

3 Supraconductivité

La supraconductivité est interprétée dans un modèle simple comme la possibilité pour deux électrons proches du niveau de Fermi de former un état lié appelé *paire de Cooper*. On note Δ l'énergie de liaison d'une paire et on suppose que l'énergie d'une paire de Cooper de vecteur d'onde $\mathbf{k}$ est donnée par

$$E = 2E_F - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{4m_e},$$

où E_F est l'énergie de Fermi d'un gaz de N électrons.

On a donc la coexistence d'un gaz d'électrons libres (1) et d'un gaz de paires de Cooper (2). On supposera que le gaz d'électrons libres est composé de N_1 électrons de potentiel chimique μ_1 à la température T_1 , et que le gaz de paires de Cooper est composé de N_2 paires d'électrons de potentiels chimiques μ_2 à la température T_2 . On néglige les interactions entre électrons libres, entre paires de Cooper et entre électrons libres et paires de Cooper.

- 1/ Discuter l'expression de l'énergie des paires de Cooper. Pourquoi doit-on choisir $\Delta > 0$?
- 2/ Justifier que le gaz de paires de Cooper peut-être traité comme un gaz parfait de bosons.
- 3/ Écrire les relations entre T_1 , T_2 , μ_1 et μ_2 à l'équilibre thermodynamique.
- 4/ Justifier soigneusement que la condensation de Bose-Einstein pour les paires de Cooper se produit lorsque $\mu_2 = 2E_F - \Delta$. Quelle est alors la valeur du potentiel chimique μ_1 ?
- 5/ En supposant que l'on peut traiter les électrons libres comme un gaz de Fermi dégénéré et en utilisant l'expression de la densité d'état donnée en première partie, montrer que le nombre maximum d'électron libre N_e est donné par

$$N_e = N \left(1 - \frac{3\Delta}{4E_F} \right).$$

- 6/ Quel est le nombre de paires de Cooper ? En déduire que la température de condensation de Bose T_B des paires de Cooper est donnée par

$$2,612 \left(\frac{4\pi m k_B T_B}{h^2} \right)^{3/2} = \frac{3}{8} \frac{\Delta}{E_F} \frac{N}{V}.$$

II–Modèle de Ising et approximation de Bethe-Peierls

On considère un modèle d'Ising en dimension d , constitué de $N \gg 1$ spins de Ising $s_i = \pm 1$ à la température T , disposés aux noeuds d'un réseau hypercubique. On notera $\beta = 1/k_B T$, avec k_B la constante de Boltzmann. On appelle h le champ magnétique extérieur (en unité d'énergie) et on ne considère que des interactions entre plus proches voisins. Le hamiltonien du système s'écrit alors

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i,$$

où $\langle i,j \rangle$ représente une somme sur les plus proches voisins i et j , et où $J > 0$.

1 Approximation de champ moyen

- 1/ À quoi correspondent les différents termes de cet hamiltonien ? On notera z le nombre de premier voisin d'un site. Exprimer z en fonction de la dimension de l'espace d .
- 2/ On commence par négliger les interactions entre spins. Calculer la fonction de partition et l'énergie libre du système. En déduire l'aimantation moyenne $m = \langle s \rangle$ par site. Représentez m en fonction du champ.
- 3/ On prend maintenant en compte les interactions entre spins. Montrer que le champ effectif vu par un spin dans l'approximation de champ moyen s'écrit $h_{\text{eff}} = h + h_m$, où $h_m = zJm$ est appelé champ moléculaire. Justifier brièvement cette dénomination. Montrer que l'aimantation moyenne $m = \langle s \rangle$ par site est solution d'une équation d'autocohérence que l'on explicitera.
- 4/ On se place à champ magnétique extérieur nul ($h = 0$). Montrer 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. Que prévoit l'approximation pour le cas $d = 1$? Pour le cas $d = 2$?

2 Approximation de Bethe-Peierls

Pour améliorer les résultats de l'approximation de champ moyen, Bethe et Peierls ont proposé en 1935 une approche un peu plus sophistiquée. On considère un sous-système $\mathcal{C}$ du réseau de spins, constitué d'un spin que l'on notera s_0 et de sa couronne de proches voisins notés s_i avec $i = 1, \dots, z$. On note n_+ le nombre de spin de cette couronne qui sont dans l'état $s_i = +1$ et n_- le nombre de ceux dans l'état $s_i = -1$.

On décrit le hamiltonien du système de la façon suivante :

- Les interactions entre le spin s_0 et ses proches voisins sont décrites de manières exactes.
- Les interactions entre les spins s_i ($i = 1, \dots, z$) et le reste du système sont décrites comme en champ moyen par un champ moléculaire h_m que l'on ne connaît pas.

- 1/ Donner une relation simple entre n_+, n_- et z .
- 2/ Montrer que l'énergie $\mathcal{H}_{\mathcal{C}}$ du sous-système $\mathcal{C}$ peut se mettre sous la forme $-\beta \mathcal{H}_{\mathcal{C}}(n_+, n_-, s_0) = (H + H_m + Ks_0)(n_+ - n_-) + Hs_0$, où l'on a défini les grandeurs sans dimension $K = \beta J, H = \beta h$ et $H_m = \beta h_m$.
- 3/ On définit la probabilité jointe $P(s_0 = s, n_+ = n)$ pour avoir à la fois $s_0 = s$ et $n_+ = n$. Calculer la fonction de partition $Z_{\mathcal{C}}$ de $\mathcal{C}$ et montrer que l'on a

$$P(s_0 = s, n_+ = n) = \frac{z!}{n!(z-n)!} \frac{1}{Z_{\mathcal{C}}} e^{(H+H_m+Ks)(2n-z)+Hs}. \quad (1)$$

- 4/ Montrer que l'on a $\langle s_0 \rangle = \sum_{n=0}^z [P(s_0 = +1, n_+ = n) - P(s_0 = -1, n_+ = n)]$.

5/ On cherche maintenant à exprimer l'aimantation moyenne sur un site en fonction des probabilités jointes $P(s_0 = s, n_+ = n)$. On définit pour cela la grandeur $\mathcal{S}$ comme $\mathcal{S} = \sum_{i=1}^z s_i$.

- (i) Montrer que $\langle \mathcal{S} \rangle = z \langle s_0 \rangle$. On le justifiera soigneusement.
- (ii) Exprimer $\mathcal{S}$ en fonction de n_+ et z . En déduire une expression de la valeur moyenne de $\mathcal{S}$ ($\langle \mathcal{S} \rangle$) en fonction des $P(s_0 = s, n_+ = n)$ (on ne cherchera pas à calculer la somme discrète apparaissant dans le résultat).
- (iii) Déduire des deux relations précédentes l'équation

$$z \sum_{n=0}^z P(s_0 = 1, n_+ = n) = \sum_{n=0}^z n [P(s_0 = +1, n_+ = n) + P(s_0 = -1, n_+ = n)]. \quad (2)$$

6/ En utilisant l'équation (2) et l'expression des probabilités jointes (1), montrer que le champ moléculaire H_m doit satisfaire la relation

$$\frac{H_m}{z-1} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\cosh(H_m + H + K)}{\cosh(H_m + H - K)} \right).$$

7/ On suppose maintenant que le champ magnétique extérieur est nul ($H = 0$). Discuter graphiquement les solutions de l'équation auto-cohérente sur le champ moléculaire h_m . Montrer en particulier qu'il existe une transition de phase pour une température critique T_c donnée par

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln \left(\frac{d}{d-1} \right)}.$$

8/ On rappelle que la résolution exacte du modèle d'Ising en dimension $d = 2$ donne $k_B T_c / J = 2 / \ln(1 + \sqrt{2})$. Les méthodes numériques permettent de calculer des valeurs précises de $k_B T_c / J$ données dans le tableau 1. Compléter ce tableau et discuter les résultats obtenus.

TABLE 1 – Valeurs de $k_B T_c / J$ en fonction de d pour un réseau hypercubique.

d	Valeur exacte	Champ moyen	Bethe-Peierls
1			
2			
3	4,54545		
4	20/3		

9/ Discutez brièvement l'approximation de champ moyen (nature, validité...).

Formulaire mathématique

- $\tanh x \simeq x - x^3/3$ pour $x \ll 1$
- $\tanh^{-1} x = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+x}{1-x} \right)$.
- $\sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} x^n y^{N-n} = (x+y)^N$ (formule du binôme)
- $\sum_{n=0}^N \frac{N!}{n!(N-n)!} n x^n y^{N-n} = Nx(x+y)^{N-1}$