Série 2

Cette série propose de manipuler des outils mathématiques récurrents dans les calculs de mécanique statistique : intégrales et développements limités. Le premier exercice est purement mathématique ; le second propose de calculer les premières corrections quantiques à la loi des gaz parfaits – calcul qui sera posé plus tard dans le cours.

1 Rappels mathématiques

1. Evaluer l'intégrale gaussienne
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-ax^2}\mathrm{d}x$$
où $a \in \mathbb{R}_+^*$. Une méthode possible consiste à considérer le carré de l'intégrale, puis à passer en coordonnées polaires.
2. Evaluer l'intégrale paramétrique
$$\int_0^{+\infty} x^m \mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x$$
avec $m \in \mathbb{N}$. Cette intégrale peut être calculée par parties, ou à l'aide de la technique de Feynman. Cette dernière méthode consiste à introduire un paramètre $\alpha = 1$ dans l'argument de l'exponentielle, pour exprimer l'intégrande en tant qu'une dérivée par rapport à α. On peut ensuite commuter l'intégrale et la dérivée, pour finalement remplacer α par 1 au terme du calcul.
3. En déduire la valeur de
$$\int_0^{+\infty} x^m \mathrm{e}^{-\sigma x}\mathrm{d}x \qquad \text{pour} \qquad \sigma \in \mathbb{R}^{+*}$$
4. Calculer les développements limités à l'ordre 3, autour de 0, de
$$f(x) = \frac{1}{1-x} \quad \text{et} \quad g(x) = \frac{1}{1+e^x}.$$
$g(x)$ s'appelle la distribution de Fermi-Dirac.
5. Proposer un développement asymptotique autour de 0^+ de
$$h(x) = \frac{1}{e^x - 1}$$
$h(x)$ s'appelle la distribution de Bose-Einstein.

2 Premières corrections quantiques pour un gaz électronique

On montrera dans le cours que la pression d'un gaz d'électrons dans un volume $V = L^3$ s'exprime comme

$$P = \frac{2}{\beta V} \ln \left(\prod_{\vec{k}} (1 + \exp[\beta(\mu - E(\vec{k}))]) \right)$$

où $\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$, μ est le potentiel chimique du gaz et les $E(\vec{k})$ sont les niveaux d'énergie d'une particule dans une boîte : $E(\vec{k}) = \hbar^2 k^2/2m$, avec $k = ||\vec{k}|| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ et $k_i = n_i\pi/L$ pour $n_i \in \mathbb{N}$ et $i = x, y, z$.

Ici, on propose de montrer que cette expression se réduit à la loi des gaz parfaits dans la limite classique $z = e^{\beta\mu} \to 0$, puis de calculer la première "correction quantique" à cette loi. Une autre façon d'exprimer la limite classique est $n\Lambda_T^3 \to 0$, où $n = N/V$ est la densité du gaz et $\Lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_{\mathrm{B}}T}$ est appelée la longueur d'onde de de Broglie thermique de l'électron. On cherchera en fait la correction à la loi des gaz parfaits obtenue à l'ordre le plus bas non nul en $n\Lambda_T^3$.

1. Montrer que dans la limite thermodynamique $L \to \infty$, le produit sur $\vec{k}$ peut être approché par une intégrale, et exprimer cette intégrale.
2. Grâce à un changement de variable approprié, montrer que
$$P = \frac{1}{\beta} \frac{4}{\sqrt{\pi}\Lambda_T^3} \int_0^{+\infty} \mathrm{d}x\, x^{1/2} \ln(1 + ze^{-x}).$$
3. A l'aide d'une intégration par parties, montrer que
$$P(z) = \frac{2}{\beta\Lambda_T^3} f_{5/2}(z) \qquad \text{où} \qquad f_m(z) = \frac{1}{(m-1)!} \int_0^{\infty} \frac{\mathrm{d}x\, x^{m-1}}{z^{-1}\mathrm{e}^x + 1}$$
Indice : $(3/2)! = (3/2)\sqrt{\pi}/2$.
Par une procédure similaire, on trouve pour la densité du gaz
$$n(z) = \frac{2}{\Lambda_T^3} f_{3/2}(z)$$
4. On se place dans la limite classique $z \to 0$. Développer $f_m(z)$ jusqu'à l'ordre 2 en z.
5. A partir des développements de P et n en fonction de z, déterminer l'expression de P en fonction de n au premier ordre en $n\Lambda_T^3$. Commenter.
Indice : exprimer z en fonction de n et z, puis remplacer les termes en z dans le membre de droite par leur expression en fonction de n et z ordre par ordre.