

IX - GAZ PARFAIT DE FERMIONS

Nous allons maintenant étudier des systèmes pour lesquels les effets de statistique quantique jouent un rôle important. Le critère de non dégénérescence n'est donc pas satisfait. En fait, le discriminant de dégénérescence semble un paramètre adapté à l'étude des propriétés des systèmes physiques. Quand $n\lambda^3 \rightarrow 0$, toutes les grandeurs tendent vers leurs équivalents classiques. Pour des valeurs de $n\lambda^3$ petites mais non négligeables, les quantités physiques peuvent être exprimées en puissances de ce paramètre. Quand $n\lambda^3$ devient de l'ordre de l'unité (ceci est obtenu pour des basses températures et des hautes densités), le comportement du système diffère de manière significative de celui d'un système classique : son comportement est purement quantique ; le système est dit statistiquement dégénéré. Dans ce cas, le comportement du système est aussi lié à la statistique à laquelle obéissent les particules qui le composent : il diffère suivant que nous ayons des fermions (particules de spin demi-entier en unités de \hbar !) ou des bosons (particules de spin entier).

Dans ce qui suit, nous allons étudier les systèmes de fermions dégénérés.

Nous avons vu précédemment que, pour un gaz de N fermions, dans un volume V , à la température T :

$$\begin{cases} \frac{PV}{kT} = \sum_{\varepsilon} g_{\varepsilon} \text{Log}(1 + z \exp(-\beta\varepsilon)) \\ N = \sum_{\varepsilon} \frac{g_{\varepsilon}}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon) + 1} \end{cases}$$

où :

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad \text{et} \quad z = \exp(\beta\mu), \quad \mu \text{ étant le potentiel chimique du système.}$$

La fugacité z peut prendre toutes les valeurs entre zéro et l'infini. Sachant que les volumes que nous considérons sont macroscopiques, les niveaux d'énergie sont très serrés ; nous pouvons remplacer la sommation sur les niveaux d'énergie par une intégrale sur l'espace des phases, en comptant un état par volume h^3 . Le nombre d'états d'impulsion comprise entre p et $p + dp$ est :

$$g(p)dp = \frac{gV4\pi p^2 dp}{h^3}$$

où g est un facteur de dégénérescence due au spin ($g = 2$ pour un spin $s = 1/2$).

Pour un gaz de particules non relativistes, la relation entre l'énergie et l'impulsion est :

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$$

Le nombre d'états d'énergie entre ε et $\varepsilon + d\varepsilon$ est :

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = g(p)dp = \frac{g2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon$$

En utilisant cette expression, nous avons

$$\frac{P}{kT} = \frac{g2\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \text{Log}(1 + z \exp(-\beta\varepsilon)) d\varepsilon$$

et :

$$\frac{N}{V} = \frac{g2\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon) + 1}$$

Faisons le changement de variable :

$$\beta\varepsilon = x$$

On aura alors :

$$\frac{P}{kT} = \frac{g2\pi}{h^3} (2mkT)^{3/2} \int_0^{\infty} x^{1/2} \text{Log}(1 + z \exp(-x)) dx = \frac{g}{\lambda^3} f_{5/2}(z)$$

$$\frac{N}{V} = \frac{g2\pi}{h^3} (2mkT)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2} dx}{z^{-1} \exp(x) + 1} = \frac{g}{\lambda^3} f_{3/2}(z)$$

où :

$\lambda = \frac{h}{(2\pi mkT)^{1/2}}$ est la longueur d'onde thermique moyenne et $f_n(z)$ la fonction de Fermi, telle que:

$$f_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1} \exp(x) + 1}$$

$\Gamma(n)$ est la fonction Gamma d'Euler.

L'expression finale de $\frac{P}{kT}$ a été obtenue après une intégration par parties. Les équations :

$$\begin{cases} \frac{P}{kT} = \frac{g}{\lambda^3} f_{5/2}(z) \\ \frac{N}{V} = \frac{g}{\lambda^3} f_{3/2}(z) \end{cases}$$

sont nos résultats de base.

En éliminant la fugacité z entre les équations de $\frac{P}{kT}$ et de N , nous aurons l'équation

d'état du gaz idéal de Fermi.

L'énergie interne du système est donnée par :

$$E = -\frac{\partial \text{Log} L}{\partial \beta} = \frac{3}{2} kT \frac{gV}{\lambda^3} f_{5/2}(z)$$

Nous pouvons l'écrire sous la forme :

$$E = \frac{3}{2} NkT \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)}$$

Cette expression nous conduit à :

$$PV = \frac{2}{3} E$$

relation que nous avons déjà montrée pour un gaz de particules non relativistes, obéissant à la statistique de Maxwell-Boltzmann.

La capacité calorifique du gaz peut être obtenue en différentiant E par rapport à T , gardant N et V constants. En utilisant la propriété suivante des fonctions $f_n(z)$:

$$z \frac{\partial f_n(z)}{\partial z} = f_{n-1}(z)$$

nous en déduisons que :

$$\left. \frac{\partial z}{\partial T} \right|_{N,V} = -\frac{3z}{2T} \frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}(z)}$$

Ceci nous conduit à :

$$\frac{C_V}{Nk} = \frac{15}{4} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{f_{3/2}(z)}{f_{1/2}(z)}$$

L'énergie libre de Helmholtz du gaz est :

$$A = N\mu - PV = NkT \left(\text{Log} z - \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \right)$$

L'entropie est telle que :

$$S = \frac{E - A}{T} = Nk \left(\frac{5}{2} \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} - \text{Log} z \right)$$

Pour déterminer les propriétés thermodynamiques du gaz en fonction de la densité $n = N/V$ et de la température T , nous avons besoin de connaître la dépendance de z en fonction de n et de T ; cette dépendance est formellement contenue dans la relation :

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{\lambda^3} f_{3/2}(z)$$

Une étude détaillée nécessite une tabulation des fonctions $f_n(z)$ par le calcul numérique mais la compréhension physique peut se suffire des formes limites de ces fonctions. Lorsque la densité du gaz est faible et sa température élevée :

$$f_{3/2}(z) = \frac{n\lambda^3}{g} = \frac{nh^3}{g(2\pi mkT)^{3/2}} \ll 1$$

Ceci donne $z \ll 1$. Sachant que pour de faibles valeurs de z , nous pouvons utiliser le développement suivant des fonctions $f_n(z)$:

$$f_n(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^n} = z - \frac{z^2}{2^n} + \frac{z^3}{3^n} - \dots$$

A l'ordre un, nous avons : $f_n(z) \approx z$ ce qui donne :

$$P = \frac{NkT}{V} \quad E = \frac{3}{2} NkT \quad C_V = NkT$$

$$A = NkT \left(\text{Log} \left(\frac{n\lambda^3}{g} \right) - 1 \right) \quad S = Nk \left(\frac{5}{2} - \text{Log} \left(\frac{n\lambda^3}{g} \right) \right)$$

Ces relations sont celles d'un gaz parfait classique.

Si z est petit devant 1, mais non très petit, nous utiliserons les développements de $f_n(z)$ pour éliminer z dans les relations de P et de N . Nous intervertissons d'abord la relation

de N/V pour avoir le développement de z en fonction de $\frac{n\lambda^3}{g}$ puis nous substituons ce

développement dans la relation de $\frac{P}{kT}$; nous avons alors le développement du

Viriel suivant :

$$\frac{PV}{NkT} = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} a_l \left(\frac{n\lambda^3}{g} \right)^{l-1}$$

Les coefficients a_l sont tels que :

$$a_1 = 1$$

$$a_2 = \frac{-1}{4\sqrt{2}} = 0.177$$

$$a_3 = \left(\frac{2}{9\sqrt{3}} - \frac{1}{8} \right) = 0.003$$

.....

La chaleur spécifique du gaz est alors donnée par :

$$\frac{C_v}{Nk} = \frac{1}{Nk} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{3}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{5-3l}{2} (-1)^{l-1} a_l \left(\frac{n\lambda^3}{g} \right)^{l-1} = \frac{3}{2} \left[1 - 0.088 \left(\frac{n\lambda^3}{g} \right) + 0.007 \left(\frac{n\lambda^3}{g} \right)^2 - \dots \right]$$

Notons que la capacité calorifique du gaz est toujours plus faible que la valeur classique, vers laquelle elle tend, à haute température.

Si la densité et la température du gaz sont telles que la paramètre $\frac{n\lambda^3}{g}$ est de l'ordre de l'unité, les développements précédents ne peuvent pas être utilisés ; nous devons avoir recours au calcul numérique. Mais dans le cas où $\frac{n\lambda^3}{g} \gg 1$, le gaz est dit dégénéré (au sens statistique) ; nous pouvons utiliser le développement des fonctions $f_n(z)$ en puissances de $(\text{Log}z)^{-1}$. Dans la limite $\frac{n\lambda^3}{g} \rightarrow \infty$, le gaz est dit complètement dégénéré ; les fonctions $f_n(z)$ prennent alors une forme simple.

Parce que ce cas est plus simple, nous allons commencer par l'étude du gaz parfait de fermions dans un état de dégénérescence complète. Lorsque $T \rightarrow 0$, ce qui entraîne que $\frac{n\lambda^3}{g} \rightarrow \infty$, les nombres moyens d'occupation

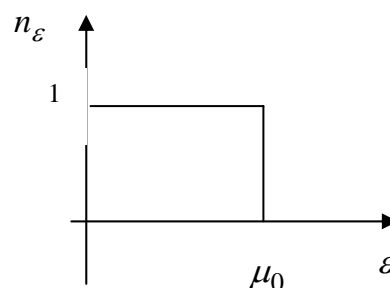
des niveaux d'énergie $\varepsilon(p)$ sont tels que :

$$n_\varepsilon = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon(p) - \mu}{kT}\right) + 1} = \begin{cases} 1 & \text{si } \varepsilon(p) < \mu_0 \\ 0 & \text{si } \varepsilon(p) > \mu_0 \end{cases}$$

où μ_0 est le potentiel chimique du système à cette température. Donc, à $T=0$, tous les états individuels d'énergie inférieure à μ_0 sont occupés par une particule chacun, alors que les états individuels d'énergie supérieure à μ_0 sont vides. L'énergie μ_0 est appelée énergie de Fermi ; elle sera notée ε_F . La valeur correspondante de l'impulsion de Fermi p_F est telle que :

$$N = \frac{\iint g n_\varepsilon d^3 p d^3 r}{h^3} = \frac{4\pi g V}{3h^3} p_F^3$$

La surface de Fermi engendrant cette sphère est très utilisée en physique du solide. En prenant $g = 2$, l'impulsion de Fermi s'écrit :



$$p_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \hbar$$

Donc, dans le cas non relativiste, l'énergie de Fermi a pour expression :

$$\varepsilon_F = (3\pi^2 n)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m}$$

Les valeurs de ε_F sont de quelques eV pour les électrons libres des métaux. Par exemple, pour le Sodium : $M = 23g/mole$, $\rho = 0.97g/cm^3$, 1 électron de conduction par atome.

On a : $\varepsilon_F \approx 3eV$.

On en déduit que la température de Fermi, définie par :

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k}$$

vaut : $T_F \approx 3.5 \cdot 10^4 K$.

Cette température est très élevée, comparée à la température ambiante $\left(\frac{T}{T_F} = 8 \cdot 10^{-3} \ll 1\right)$.

Les électrons de conduction ont une vitesse de Fermi v_F telle que :

$$v_F = \sqrt{\frac{2kT_F}{m}} \approx 10^6 m/s,$$

qui est grande, comparée à celle des particules constituant les gaz classiques ($500m/s$). Le principe de Pauli entraîne donc que les électrons de conduction ont de grandes vitesses, même à température nulle.

L'énergie E_0 du fondamental du système est telle que:

$$E_0 = \int_0^{\varepsilon_F} \frac{p^2}{2m} \frac{g 4\pi V p^2 dp}{h^3}$$

elle a pour expression :

$$E_0 = \frac{2\pi g V}{5mh^3} p_F^5$$

L'énergie par particule est :

$$\frac{E_0}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F$$

La pression dans l'état fondamental est :

$$P_0 = \frac{2E_0}{3V} = \frac{2}{5} n \varepsilon_F$$

En utilisant l'expression de ε_F trouvée précédemment, nous voyons que la pression P_0 du fondamental est proportionnelle à $n^{5/3}$. Nous constatons que les fermions sont en mouvement, même à la température $T = 0$. Ce mouvement dans l'état fondamental est dû au principe de Pauli. Cette pression est énorme. Pour le gaz d'électrons libres dans le sodium, on a :

$$P(0) \approx 10^9 Pa = 10^4 atm$$

Cette pression pourrait éjecter les électrons du métal si ce n'était l'attraction électrostatique que les ions du réseau (ayant chacun perdu un électron) exercent sur eux.

Pour étudier les grandeurs telles que l'entropie et la capacité calorifique, nous devons considérer des températures basses, mais finies. Commençons par une étude qualitative.

L'écart par rapport à la situation de température nulle ne sera sensible que pour des énergies ε proches de ε_F (soit $\frac{(\varepsilon - \mu)}{kT}$ proche de 1).

Nous en concluons que l'échauffement des particules ne prend place que dans un intervalle de largeur $O(kT)$ et localisé autour de $\varepsilon = \varepsilon_F$. La fraction de particules excitées thermiquement est donc $O\left(\frac{kT}{\varepsilon_F}\right)$, la majeure partie du système restant non influencée par l'élévation de température. Le nombre de particules excitées thermiquement est :

$$N \frac{kT}{\varepsilon_F}$$

Chaque particule excitée thermiquement transporte une énergie kT ; l'énergie thermique du système de N particules est donc

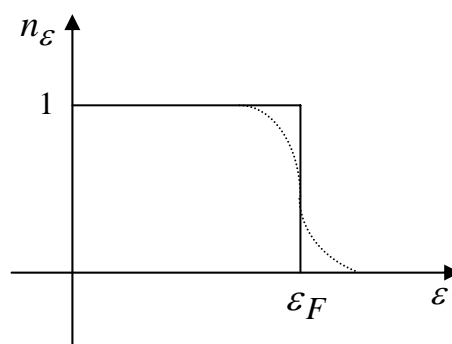
$$O\left(\frac{Nk^2T^2}{\varepsilon_F}\right) \text{ et la capacité calorifique est}$$

$$O\left(Nk \frac{kT}{\varepsilon_F}\right). \text{ On constate que la capacité}$$

calorifique des systèmes de fermions à basse

température diffère complètement de la valeur classique $\frac{3}{2}Nk$; elle est nettement plus

faible en valeur, et elle est proportionnelle à la température ; ceci est une propriété caractéristique des systèmes de fermions à basse température.



Le tableau suivant donne les valeurs de n_ε pour des énergies proches du niveau de Fermi.

Valeurs de n_ε pour $\varepsilon = \varepsilon_F + jkT$						
	$j = -4$	$j = -3$	$j = -2$	$j = 2$	$j = 3$	$j = 4$
n_ε	0.982	0.950	0.880	0.119	0.047	0.018

Pour une étude analytique du gaz de Fermi aux basses températures, nous utiliserons le développement des fonctions $f_n(z)$ en fonction de $(\text{Log}(z))^{-1}$, sachant que z est grand et donc $\text{Log}(z)$ aussi ; $(\text{Log}(z))^{-1}$ est petit ; nous avons, en particulier, jusqu'au second ordre :

$$f_{5/2}(z) = \frac{8}{15\pi^{1/2}} (\text{Log}(z))^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} (\text{Log}(z))^{-2} + \dots \right]$$

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\pi^{1/2}} (\text{Log}(z))^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\text{Log}(z))^{-2} + \dots \right]$$

$$f_{1/2}(z) = \frac{2}{\pi^{1/2}} (\text{Log}(z))^{1/2} \left[1 - \frac{\pi^2}{24} (\text{Log}(z))^{-2} + \dots \right]$$

Nous avons ainsi:

$$\frac{N}{V} = \frac{4\pi g}{3} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} (kT \text{Log}(z))^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} (\text{Log}(z))^{-2} + \dots \right]$$

Cette équation en μ sera résolue par approximations successives. Dans l'approximation d'ordre zéro, elle donne :

$$kT \text{Log}(z) = \mu \approx \left(\frac{3N}{4\pi g V} \right)^{2/3} \frac{h^2}{2m} = \varepsilon_F$$

Ce résultat est celui obtenu à la température $T = 0$. Dans l'approximation suivante, nous avons :

$$kT \text{Log}(z) = \mu \approx \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 \right]$$

La relation qui donne l'énergie par particule est :

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} kT \text{Log}(z) \left[1 + \frac{\pi^2}{2} (\text{Log}(z))^{-2} + \dots \right]$$

En utilisant l'expression précédente du potentiel chimique μ , nous obtenons :

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right]$$

La pression du gaz est :

$$P = \frac{2E}{3V} = \frac{2}{5} n \varepsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right]$$

Les termes principaux de l'énergie par particule et de la pression P sont identiques à ceux obtenus pour $T = 0$: on est à très basse température. Le terme suivant mesure l'écart par rapport à la situation de température nulle. Connaissant l'expression de l'énergie E du système, nous pouvons déterminer la capacité calorifique à basse température du gaz :

$$\frac{C_V}{Nk} = \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\varepsilon_F} + \dots$$

On a ainsi :

$$\frac{C_V}{Nk} = \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} + \dots$$

Nous retrouvons le résultat qualitatif que C_V est proportionnel à la température. Cette relation est bonne pour $T \ll T_F$. Nous avons ainsi une température de comparaison qui nous permet de savoir quand un système de fermions est statistiquement dégénéré : c'est lorsque sa température est inférieure à la température de Fermi .

L'énergie libre de Helmholtz prend la forme suivante :

$$\frac{A}{N} = \mu - \frac{PV}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \left[1 - \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right]$$

L'entropie est donnée par la relation :

$$\frac{S}{Nk} = \frac{E + PV}{NkT} - \frac{\mu}{kT} = \frac{\pi^2}{2} \frac{kT}{\varepsilon_F} + \dots$$

Nous constatons que l'entropie tend vers zéro quand la température tend vers zéro, en accord avec le troisième principe de la thermodynamique.

INTEGRALES DE FERMI-DIRAC

Dans l'étude des systèmes de fermions, nous rencontrons des intégrales du type :

$$f_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1} \exp(x) + 1} \quad \text{avec } 0 \leq z \leq \infty$$

où $\Gamma(n)$ est la fonction Gamma d'Euler.

Pour z petit, cette fonction peut être développée en puissances de z :

$$f_n(z) = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} \frac{z^l}{l^n} = z - \frac{z^2}{2^n} + \frac{z^3}{3^n} + \dots$$

On voit que, pour $z \ll 1$, $f_n(z)$, pour tout n , se comporte comme z .

Les fonctions $f_{n-1}(z)$ et $f_n(z)$ sont reliées par la relation de récurrence :

$$f_{n-1}(z) = z \frac{\partial}{\partial z} f_n(z)$$

Pour étudier le comportement des intégrales de Fermi-Dirac pour de grandes valeurs de z , il est judicieux d'introduire la variable : $\xi = \log z$

On a alors :

$$f_n(\xi) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} dx}{\exp(x - \xi) + 1}$$

Pour de grandes valeurs de ξ , l'intégrale est contrôlée par le facteur $(\exp(x - \xi) + 1)^{-1}$. La séparation entre les valeurs limites 0 (pour $x \rightarrow \infty$) et 1 (pour $x \rightarrow 0$) se fait au voisinage de $x = \xi$. La largeur de cette région est nettement plus petite que le domaine d'intégration. Dans la plus basse approximation, nous avons :

$$f_n(\xi) = \frac{\xi^n}{\Gamma(n+1)}$$

A des ordres d'approximation plus élevés, $f_n(\xi)$ s'écrit sous la forme :

$$f_n(\xi) = \frac{\xi^n}{\Gamma(n+1)} \left[1 + n(n-1) \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{\xi^2} + n(n-1)(n-2)(n-3) \frac{7\pi^4}{360} \frac{1}{\xi^4} + \dots \right]$$

On peut aussi montrer que :

$$\int_0^{\infty} \frac{\varphi(x) dx}{\exp(x - \xi) + 1} = \int_0^{\xi} \varphi(x) dx + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{d\varphi}{dx} \right)_{x=\xi} + \frac{7\pi^4}{360} \left(\frac{d^3\varphi}{dx^3} \right)_{x=\xi} + \frac{31\pi^6}{15120} \left(\frac{d^5\varphi}{dx^5} \right)_{x=\xi} + \dots$$

où $\varphi(x)$ est une bonne fonction, au sens mathématique. On remarque que les coefficients du développement sont tous proches de 2.