

IV- Système de Fermions

L'étude de gaz de fermions sans interaction (gaz parfait) est important car il permet une bonne description de problèmes aux divers que ceux qui concernent les électrons de conduction dans un métal, ou les nucléons qui constituent le noyau atomique. Ces systèmes, pour lesquels les effets quantiques sont importants, n'obéissent pas à la distribution de Boltzmann qui est purement classique. En effet, cette dernière suppose que les états de particules individuelle sont faiblement peuplés. Dans le cas d'un gaz de fermions ou de bosons proches de la température nulle, les niveaux individuelles sont au contraire fortement peuplés.

1- Gaz parfait de Fermions

Considérons un gaz constitué de N fermions de masse m qui s'interagissent pas entre eux. L'énergie est de nature purement cinétique. Elle vaut :

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \quad (1)$$

Le nombre de micro états à une particule contenus dans le volume élémentaire $dVdP$ de l'espace de phase vaut :

$$g \frac{dVdP}{h^3} \quad (2)$$

Où $g=2s+1$: est le facteur de dégénérescence dû au spin s des fermions, pour un gaz d'électron, on a : $s = \frac{1}{2}$.

La probabilité, pour une particule, d'occuper un micro état particulier d'énergie ε , est donnée par la distribution de Fermi Dirac : $\frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{KT}} + 1}$, où μ est le potentiel chimique du système.

Le nombre de particules dN dont le module de l'impulsion est compris entre P et $P+dP$ est :

$$dN = gV \frac{4\pi P^2 dP}{h^3} \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{KT}} + 1} \quad (3)$$

nous avons utilisés les coordonnées sphériques (p, θ, φ) et intégrant sur les angles :

$$dp = 4\pi p^2 dp \quad \text{et} \quad \varepsilon = \frac{p^2}{2m}$$

Le nombre total de particules contenues dans le volume V :

On a : $p^2 = 2m\varepsilon$, d'où $dp = \sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}} d\varepsilon$, et :

$$N = \frac{2\pi gV}{h^3} (2m)^{3/2} \int \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{KT}} + 1} d\varepsilon \quad (4)$$

Posons : $x = \frac{\varepsilon}{KT}$ et $\eta = \frac{\mu}{KT}$, alors :

$$N = 2\pi \frac{gV}{h^3} (2m)^{3/2} (KT)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{e^{x-\eta} + 1} dx \quad (5)$$

Si nous introduisons les intégrales $I_\nu(\eta)$ dites de Fermi, qui sont définie par :

$$I_\nu(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^\nu}{e^{x-\eta} + 1} dx \quad (6)$$

nous obtenons :

$$N = \frac{2\pi g V}{h^3} (2m)^{3/2} (KT)^{3/2} I_{1/2}(\eta) \quad (7)$$

La quantité $\rho = \frac{N}{V}$ est le nombre de particules par unité de volume. D'où :

$$\rho = \frac{2\pi g}{V} (2m)^{3/2} (KT)^{3/2} I_{1/2}(\eta) \quad (8)$$

L'énergie total du gaz :

$$\begin{aligned} E &= \int_0^\infty \varepsilon dN \\ &= \frac{2\pi g V}{h^3} (2m)^{3/2} (KT)^{5/2} I_{3/2}(\eta) \end{aligned} \quad (9)$$

La pression :

$$P = \frac{4\pi}{3} \frac{g}{h^3} (2m)^{3/2} (KT)^{5/2} I_{3/2}(\eta) \quad (10)$$

Le grand potentiel Ψ , vaut :

$$\Psi = -PV = -\frac{4\pi}{3} \frac{gV}{h^3} (2m)^{3/2} (KT)^{5/2} I_{3/2}(\eta) \quad (11)$$

L'entropie total du système est relié à Ψ par l'équation :

$$\begin{aligned} S &= -\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{V,\mu} \\ &= \frac{5}{2} K \left[\frac{4\pi}{3} \frac{gV}{h^3} (2m)^{3/2} (KT)^{3/2} I_{3/2}(\eta) \right] + \frac{4\pi}{3} \frac{gV}{h^3} (2m)^{3/2} (KT)^{5/2} \frac{dI_{3/2}(\eta)}{dT} \end{aligned} \quad (12)$$

Or :

$$\begin{aligned} \frac{dI_{3/2}(\eta)}{dT} &= \frac{dI_{3/2}(\eta)}{d\eta} \cdot \frac{d\eta}{dT} = -\frac{\mu}{KT^2} \frac{dI_{3/2}}{d\eta} \\ \frac{dI_{3/2}}{d\eta} &= \frac{3}{2} I_{1/2}(\eta) \end{aligned} \quad (13)$$

Ce qui donne :

$$S = \frac{5}{3} \frac{E}{T} - \frac{\mu N}{T} \quad (14)$$

1.1- Le gaz de fermion à T=0

Un gaz de Fermi dont la température est nulle est dit complètement dégénéré. L'énergie totale est minimum. Les particules occupent les niveaux à une particule les plus bas. On va donc disposer les N particules sur les niveaux de particules individuelle en partant de l'état le plus bas et en respectant le principe d'exclusion de Pauli : On peut mettre $(2s+1)$ particules sur chaque niveau de particule individuelle. Le niveau d'énergie occupé le plus haut s'appelle le niveau de Fermi et l'énergie correspondante est l'énergie de fermi ε_F .

Le nombre moyen de particules dans un micro état donné lorsque $T \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \bar{n} &= 1, \text{ pour } \varepsilon < \mu \\ \bar{n} &= 0, \text{ pour } \varepsilon > \mu \end{aligned} \quad (15)$$

Le potentiel chimique :

$$\mu(T = 0) = \varepsilon_F = KT_F \quad (16)$$

Appelons p_F l'impulsion associée à l'énergie de Fermi.

$$\varepsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} \quad (17)$$

Le nombre total de particules est :

$$N = \int_0^{p_F} gV \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} = \frac{gV}{h^3} \frac{4\pi}{3} p_F^3 \quad (18)$$

Ce qui donne :

$$p_F = h \left(\frac{3}{4\pi g} \right)^{1/3} \rho^{1/3}, \rho = \frac{N}{V} \quad (19)$$

L'énergie de Fermi est explicitement :

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= \frac{p_F^2}{2m} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{4\pi g} \right)^{2/3} \rho^{2/3} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{g} \right)^{2/3} \rho^{2/3} \end{aligned} \quad (20)$$

L'énergie total est égal à :

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2m} \int_0^{p_F} p^2 dN = \frac{2\pi g V}{mh^3} \int_0^{p_F} p^4 dp \\ &= \frac{2\pi g V}{mh^3} \frac{p_F^5}{5} \end{aligned} \quad (21)$$

Ce qui, compte tenu de l'équation (19) donne :

$$\begin{aligned} E &= \frac{3}{5} \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3}{4\pi g} \right)^{2/3} \rho^{5/3} V \\ &= \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{6\pi^2}{g} \right)^{2/3} \rho^{5/3} V \end{aligned} \quad (22)$$

Soit, en utilisant la définition de l'énergie de Fermi :

$$E = \frac{3}{5} \varepsilon_F N \quad (23)$$

L'énergie moyenne par particule vaut donc :

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \quad (24)$$

L'équation d'état d'un gaz parfait de fermions, permet de calculer la pression du gaz :

$$p = \frac{2}{3} \frac{E}{V} = \frac{2}{5} \varepsilon_F \frac{N}{V} = \frac{2}{5} \varepsilon_F \rho \quad (25)$$

1.2- Gaz de Fermi à base température

La plupart des quantités thermodynamiques sont exprimées en fonction des intégrales de Fermi $I_\nu(\eta)$. Il n'est pas possible de calculer celles-ci analytiquement.

Lorsque la température n'est pas trop élevée ($KT \ll \varepsilon_F$), on peut utiliser un développement limité pour $I_\nu(\eta)$ qui permet d'obtenir des formules analytiques approchées.

Considérons N fermions à température nulle. Leur nombre est relié à l'énergie de fermi par les équations (17) et (18). Si l'on chauffe légèrement le système, ce nombre de particules ne changent pas. Il est alors relié au potentiel chimique par l'intermédiaire de la relation (7) :

$$\frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2} = (KT)^{3/2} I_{1/2}(\eta) \quad (26)$$

avec $\eta = \frac{\mu}{KT}$. A basse température ($\eta \gg 1$), on peut utiliser pour $I_{1/2}(\eta)$ le développement suivant :

$$\int_0^\infty \frac{f(x)dx}{e^{x-\eta} + 1} = \int_0^\eta f(x)dx + \frac{\pi^2}{6} f'(\eta) + \frac{7\pi^4}{360} f''(\eta) + \dots \quad (27)$$

d'où :

$$I_{1/2}(\eta) = \frac{2}{3} \eta^{3/2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8\eta^2}\right), \text{ et } I_{3/2}(\eta) = \frac{2}{5} \eta^{5/2} \left(1 + \frac{5\pi^2}{8\eta^2}\right) \quad (28)$$

Soit :

$$\frac{2}{3} \varepsilon_F^{3/2} = (KT)^{3/2} \frac{2}{3} \left(\frac{\mu}{KT}\right)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{KT}{\mu}\right)^2\right] \quad (29)$$

donc :

$$\varepsilon_F^{3/2} = \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{KT}{\mu}\right)^2\right] \quad (30)$$

Le terme $\left(\frac{KT}{\mu}\right)^2$ est une correction par rapport à l'unité. Donc à l'ordre zéro, on a : $\varepsilon_F \propto \mu$.

A l'ordre deux en T il suffit donc de remplacer μ , dans le terme correctif, par ε_F , ce qui donne :

$$\varepsilon_F^{3/2} = \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{KT}{\varepsilon_F}\right)^2\right] \quad (31)$$

$$\mu = \frac{\varepsilon_F}{\left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{KT}{\varepsilon_F}\right)^2\right]^{2/3}} \approx \varepsilon_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{KT}{\varepsilon_F}\right)^2\right] \quad (32)$$

En utilisant cette équation, ainsi que les développements limités de $I_\nu(\eta)$, on trouve :

$$E = \frac{3}{5} N \varepsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{KT}{\varepsilon_F}\right)^2\right] \quad (33)$$

$$S = \frac{\pi^2}{2} NK \left(\frac{KT}{\varepsilon_F}\right) \quad (34)$$

$$p = \frac{2}{5} \frac{N}{V} \varepsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{KT}{\varepsilon_F}\right)^2\right] \quad (35)$$

ET,

$$C_V = \frac{\pi^2}{2} NK \left(\frac{KT}{\varepsilon_F}\right)$$

2- Gaz réel de Fermions

Considérons un gaz complètement ionisé (plasma, dont la température est suffisamment basse pour que sa composante électronique soit dégénérée) :

$$T \leq \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3}, \rho = \frac{N}{V} \quad (37)$$

Où m est la masse de l'électron. Grâce à la grande masse des ions, la composante ionique peut être loin de sa dégénérescence.

Le plasma dégénéré sera peut-être différent d'un gaz parfait :

$$\frac{mZ^{2/3}e^2}{\hbar^2 \rho^{1/3}} \ll 1 \quad (38)$$

e : la charge élémentaire.

Cette condition de la neutralité électronique du plasma : $\sum_a Z_a N_a = 0$, (39)

N_a : nombre de particules.

Z_a : nombre entier positif et négatif.

On a :

$$N_a = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_a} \quad (40)$$

Où : Ω : le grand potentiel.

μ_a : le potentiel chimique.

D'où :

$$\sum_a Z_a \frac{\partial \Omega}{\partial \mu_a} = 0 \quad (41)$$

Utilisons la formule :

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda}\right)_{T,V,\mu_a} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right\rangle \quad (42)$$

qui permet d'exprimer la dérivée de Ψ par rapport à un paramètre λ en fonction de la valeur moyenne de la dérivée de l'hamiltonien du système par rapport à ce même paramètre.

Ici nous prendrons pour paramètre λ le carré de la charge e^2 . D'où :

$$\left(\frac{\partial \Omega}{\partial e^2}\right)_{T,V,\mu_a} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right\rangle = \frac{1}{e^2} \langle \hat{U} \rangle \quad (43)$$

Le calcul de Ψ se ramène au calcul de la valeur moyenne $\langle \hat{U} \rangle$. Les corrections qu'il faut apporter aux grandeurs thermodynamiques d'un gaz parfait sont déterminées principalement par la partie des interactions électriques figurant dans l'opérateur \hat{U} . La méthode de seconde quantification convient le mieux au calcul de $\langle \hat{U} \rangle$.

Nous introduisons un système de fonctions d'ondes normalisées $\Psi_{p\sigma}$, décrivant les états des électrons libres se déplaçant dans le volume V avec des impulsions p et des projections du spin $\sigma (\sigma = \pm \frac{1}{2})$, et nous formons les opérateurs :

$$\hat{\Psi} = \sum_{p\sigma} \Psi_{p\sigma} \hat{a}_{p\sigma}, \hat{\Psi}^+ = \sum_{p\sigma} \Psi_{p\sigma}^* \hat{a}_{p\sigma}^+ \quad (44)$$

Où $\hat{a}_{p\sigma}^+$ et $\hat{a}_{p\sigma}$ les opérateurs de création et d'annihilation des électrons se trouvent dans les états $\Psi_{p\sigma}$.

L'interaction Coulombienne des particules s'écrit sous la forme de l'intégrale :

$$U = \frac{1}{2} \iint \hat{\Psi}^+(r_1) \hat{\Psi}^+(r_2) \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \hat{\Psi}(r_2) \hat{\Psi}(r_1) dV_1 dV_2 \quad (45)$$

On prend la moyenne de cette intégrale en deux étapes successives, d'abord par rapport à l'état quantique du système, puis par rapport à la distribution statistique d'équilibre sur les différents états quantiques. Le moyen nage quantique se ramène au calcul de l'élément de matrice diagonal correspond.

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \sum \langle p_1' p_2' | U_{12} | p_1 p_2 \rangle \hat{a}_{p_1'\sigma_1}^+ \hat{a}_{p_2'\sigma_2}^+ \hat{a}_{p_2\sigma_2} \hat{a}_{p_1\sigma_1}, \quad (46)$$

Où la sommation se fait sur toutes les impulsions et les projections du spin ;

$\langle p_1' p_2' | U_{12} | p_1 p_2 \rangle$ sont les éléments de matrice de l'énergie d'interaction de deux électrons :

$$U_{12} = e^2 / |r_1 - r_2|; \quad (47)$$

Comme l'interaction Coulombienne est indépendante des spins, on prend les fonctions purement orbitales :

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \quad (48)$$

Parmi tous les termes de la somme (46) ne possèdent des éléments de matrices diagonaux que les termes qui contiennent deux couples d'opérateurs $\hat{a}_{p\sigma}^+, \hat{a}_{p\sigma}$ ayant les mêmes indices. Le produit $\hat{a}_{p\sigma}^+ \hat{a}_{p\sigma}$ pouvant être remplacé par le nombre d'occupation de l'état quantique considéré des électrons.

En posant $\vec{p}_1 = \vec{p}_1', \vec{p}_2 = \vec{p}_2'$, on trouve les termes :

$$I_1 = \frac{e^2}{2V^2} \sum_{p_1 \neq p_2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} n_{p_1\sigma_1} n_{p_2\sigma_2} \int \frac{dV_1 dV_2}{|r_1 - r_2|} \quad (49)$$

et on pose $p_1' = p_2, p_2' = p_1, \sigma_1 = \sigma_2$; on trouve les termes :

$$I_2 = -\frac{e^2}{2V^2} \sum_{p_1 \neq p_2} \sum_{\sigma} n_{p_1\sigma} n_{p_2\sigma} \int e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/\hbar} \frac{dV_1 dV_2}{|r_1 - r_2|} \quad (50)$$

(le signe moins apparaît par suite de la permutation des opérateurs $\hat{a}_{p_1\sigma}^+$ et $\hat{a}_{p_2\sigma}$).

Les termes (49) représentent simplement l'énergie de l'interaction Coulombienne directe des électrons uniformément répartis dans l'espace. Ces termes s'éliminent identiquement avec les termes analogues représentent l'énergie d'interaction d'autres particules (ions) entre elles et avec les électrons.

Les termes (50) contient les éléments de matrice non diagonaux.

On peut passer de la sommation sur p_1, p_2 à l'intégration sur $V^2 \frac{d^3 p_1 d^3 p_2}{(2\pi\hbar)^6}$.

L'intégrale figurant dans (50) vaut :

$$V \int e^{i(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)\vec{r}/\hbar} \frac{dV}{r} \quad (51)$$

par changement de variable, $\vec{r}' = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$, $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$.

Pour intégrer par rapport à \vec{r} , on utilise la formule de transformation de Fourier :

$$\int e^{-i\vec{k}\vec{r}} \frac{dV}{r} = \frac{4\pi}{k^2} \quad (52)$$

$$I_2 = -2\pi e^2 V \sum_{\sigma} \iint \frac{n_{p_1\sigma} n_{p_2\sigma}}{(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2} \frac{d^3 p_1 d^3 p_2}{(2\pi)^6 \hbar^4} \quad (53)$$

On prend la moyenne statistique : $\langle n_{p_1\sigma} n_{p_2\sigma} \rangle = \overline{n_{p_1\sigma}} \overline{n_{p_2\sigma}}$ (54)

Où :

$$\overline{n_{p\sigma}} = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/KT} + 1} \quad (55)$$

d'où :

$$\delta\Omega = -\frac{4\pi e^2}{\hbar^4} V \iint \frac{n_{p_1\sigma} n_{p_2\sigma}}{(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2} \frac{d^3 p_1 d^3 p_2}{(2\pi)^6} \quad (56)$$

Dans le cas limite d'une dégénérescence forte du gaz électronique : $T \ll \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$

$$\overline{n_p} = 1, \text{ pour } p < p_F, \overline{n_p} = 0, p \geq p_F \quad (57)$$

donc :

$$\delta\Omega = -\frac{4\pi e^2 V}{\hbar^4} \iint \frac{d^3 p_1 d^3 p_2}{(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2 (2\pi)^6}, p_1, p_2 \leq p_F \quad (58)$$

On pose $p_1 - p_2 = q$ et $(p_1 + p_2)/2 = s$, on obtient :

$$I = \int \frac{d^3 p_1 d^3 p_2}{(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)^2} = \iint q^{-2} d^3 q d^3 s \quad (59)$$

cette intégrale étendu à une domaine $|s \pm \frac{q}{2}| \leq p_F$.

$$\int d^3 s = \frac{4\pi}{3} h^2 (3p_F - h), \text{ avec } h = p_F - \frac{q}{2}.$$

En intégrant ensuite sur $d^3 q$ dans le domaine $0 < q < 2p_F$, on obtient :

$$I = 4\pi^2 p_F^4 \quad (60)$$

Soit :

$$\delta\Omega = -V \frac{e^2 p_F^4}{4\pi^3 \hbar^4} = -V \frac{e^2 m^2 \mu_e^2}{\pi^3 \hbar^4} \quad (61)$$

On a :

$$\mu_e = \varepsilon_F = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \rho_e^{2/3} \quad (62)$$

avec $\rho_e = N_e/V$, d'où :

$$\delta\Omega = -N_e \frac{3^{4/3}}{4\pi^{1/3}} e^2 \rho_e^{1/3} \quad (63)$$

La correction dû à l'énergie total et l'énergie libre :

$$(\delta E)_{S,V,N} = (\delta F)_{T,V,\mu} = (\delta\Omega)_{T,V,\mu} \quad (64)$$

d'où :

$$\delta F = -N_e \frac{3^{4/3} e^2}{4\pi^{1/3}} \rho_e^{1/3} \quad (65)$$