PHY2215 - HIVER 2009

Cours 18 – Statistiques quantiques d'un gaz parfait

survol
- règles de symétrie pour des particules identiques
- gaz parfaits quantiques
  - fermions
  - bosons
- gaz de Fermi dégénéré

Lors des cours précédents, nous avons vu que l'approximation classique n'était plus valide dans la situation où $\overline{rp} \sim h$. Nous avions donné l'exemple des électrons dans un solide pour lesquels la densité (N/V ~ 10^{29}e-/m3) est grande, et la masse est très petite par rapport à celle des atomes (1/1800 fois celle d'un proton). Nous nous retrouvons donc dans une situation où

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} >> \frac{h}{\sqrt{3mkT}}$$

et nous devons dans ce cas effectuer un traitement quantique du problème.

Il y a ainsi trois régimes dans lesques:
- mécanique classique
  - particules distinguable (bien que nous tenions compte de l'indistinguabilité et de la taille h^{3N} de l'état du système dans l'espace des phases)
  - statistique de Maxwell-Boltzmann (MB)
- mécanique quantique
  - particules non distinguables
  - bosons
    - fonction d'onde symétrique
    - spin entier $s/\hbar = 0, 1, 2, ...$
    - statistique de Bose-Einstein (BE)
  - fermions
    - fonction d'onde antisymétrique
    - spin demi-entier $s/\hbar = 1/2, 3/2, ...$
    - statistique de Fermi-Dirac (FD)

Les deux classes de particules quantiques leur confèrent un comportement fort différent qui a une incidence considérable sur leur comportement. Au cours des trois prochain cours, nous examinerons une variété de systèmes qui peuvent (et doivent) être décrits par ces statistiques quantiques.

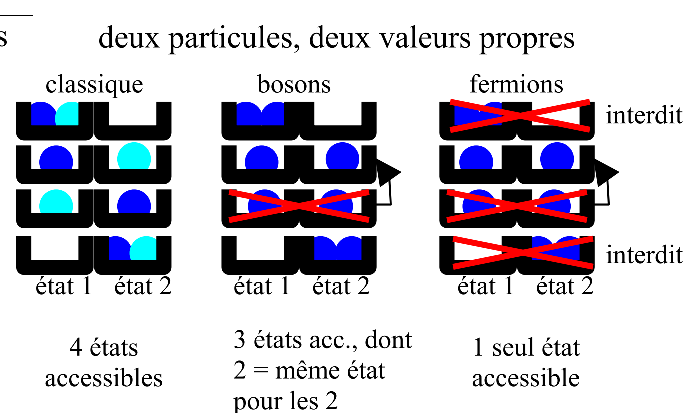
Règles de symétrie pour les particules identiques

La fonction d'onde associée aux deux classes de particules quantiques possède un caractère intimement lié à la valeur de leur spin. Soit Q_i une variable qui définit l'état quantique de la $i^{ème}$ particule d'un système (par exemple sa position, sa quantité de mouvement, son spin, son moment orbital), le système peut être décrit par une fonction d'onde qui dépend de l'état de chaque particule :

$$\Psi = \Psi(Q_1, Q_2, ..., Q_N)$$

Considérons les trois régimes décrits plus haut.

- classique:
  - Les particules sont distinguables.
  - Il n'y a aucune règle de symétrie particulière en ce qui concerne l'échange de particules : $\Psi(..., Q_i, ..., Q_j, ...) \neq \Psi(..., Q_j, ..., Q_i, ...)$
  - L'échange de particule constitue une nouvelle "fonction d'onde" et donc un nouvel état.
- bosons (spin entier) :
  - la fonction d'onde est symétrique: $\Psi(..., Q_i, ..., Q_j, ...) = \Psi(..., Q_j, ..., Q_i, ...)$
  - L'échange de deux particules dans le même état correspond à *la même* fonction d'onde.
  - Cela ne correspond donc pas à un nouvel état.
  - Plusieurs particules peuvent se retrouver dans le même état (même état propre de spin,...)
  - Il n'y a pas « d'exclusion ».
- Fermions (spin demi-entier)
  - la fonction d'onde est antisymétrique : $\Psi(..., Q_i, ..., Q_j, ...) = -\Psi(..., Q_j, ..., Q_i, ...)$
  - mais l'échange de deux particules identiques dans le même état devrait mener à la même fonction d'onde $\Psi(..., Q_i, ..., Q_j, ...) = \Psi(..., Q_j, ..., Q_i, ...)$
  - Il n'y a donc qu'une seule possibilité: ________
  - Ceci implique que deux particules identiques de spin demi-entier dans un système ne peuvent se retrouver dans le même état (position, quantité de mouvement, spin, moment orbital, etc.)
  - Ceci constitue le principe d'exclusion de Pauli.
  - e.g. dans un atome, pour la couche S, on aura un électron de chaque spin



Statistiques quantiques d'un gaz parfait

Considérons un système constitué d'un gaz parfait quantique de volume V et à température T comportant N particules. Comme d'habitude avec les gaz parfaits, les interactions sont supposées négligeables, de manière à ne pas affecter le calcul de l'énergie, mais suffisantes pour assurer l'équilibre thermique. Ainsi, l'énergie, lorsque le système est dans l'état S, sera

$$E_S = n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + \ldots = \sum_s n_s\varepsilon_s, \qquad \sum_s n_s = N$$

où n_s est le nombre de particules se trouvant dans l'état s lorsque le système est dans l'état S.

Pour un gaz de bosons, toutes les particules peuvent être dans le même état. Ainsi, quand $T\to 0$, l'énergie d'un gaz de bosons tend vers $N\varepsilon_0$ où ε_0 est le niveau d'énergie le plus bas.

Pour un gaz de fermions, il ne peut y avoir qu'une seule particule par état. Certaines particules auront donc beaucoup plus d'énergie que ε_0 , et l'énergie totale du système sera beaucoup plus élevée que $N\varepsilon_0$.

Du point de vu de la mécanique statistique, puisqu'il s'agit d'un gaz parfait dans lequel les interactions sont négligeables, on peut calculer des moyennes dans le temps pour un des éléments du système et appliquer la moyenne à l'ensemble du système (ergodicité).

Considérons que l'état s est l'élément du système. Il est soit :

- inoccupé : $E = 0$
- occupé par une particule (fermions): $E = \varepsilon_s$
- occupé par n_s particules identiques (bosons) : $E = n_s\varepsilon_s$

Les particules qui peuvent occuper l'état s viennent du réservoir avec lequel cet état est en contact. Puisque l'équilibre thermique et d'échange de particules prévaut, on devra utiliser la grande fonction de partition (cours 14):

$$\mathcal{Z} = \sum_i e^{-\beta\left(E_i - \mu N_i\right)}$$

ici, on considère $i = s$ et $N_i = n_s$

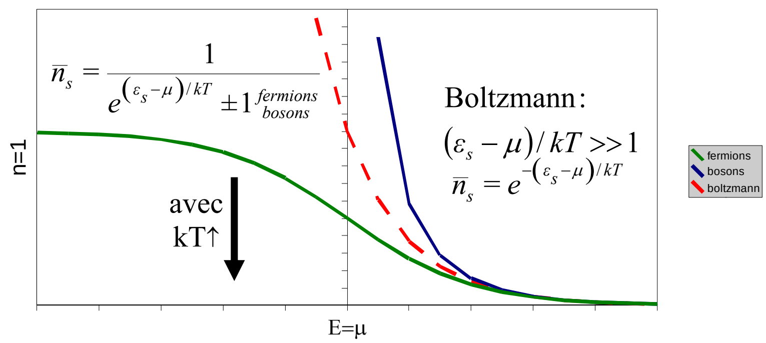
et $P_s = \dfrac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\left(\varepsilon_s n_s - \mu n_s\right)/kT} = \dfrac{1}{\mathcal{Z}} e^{-n_s\left(\varepsilon_s - \mu\right)/kT}$

avec $\mathcal{Z} = \sum_s e^{-\left(E_s - \mu n_s\right)/kT}$

Calculons {au tableau} la probabilité d'occupation de l'état pour des fermions et des bosons.

statistiques quantiques d'un gaz parfait

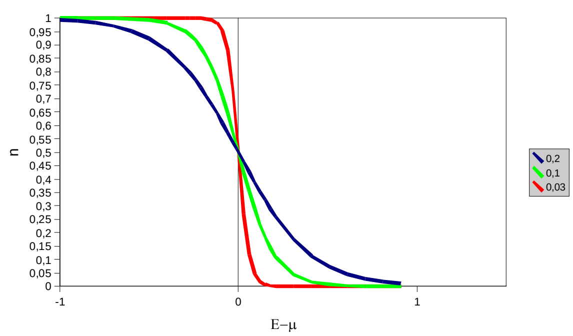
- gaz parfait quantique
  - le nombre moyen de particules occupant un état *s* est donc, selon la nature des particules



18

gaz de Fermi dégénéré

- gaz de Fermi dégénéré
  - lorsqu'on s'approche de T=0, les fermions tendent à occuper les niveaux d'énergie les plus bas possibles



19

Gaz parfait de fermions

Considérons N fermions dans un contenant cubique de côté L. Il s’agit d’un gaz parfait : les interactions sont suffisamment faibles pour ne pas perturber la valeur de l’énergie obtenus lorsqu’ils sont isolés, mais suffisamment intenses pour maintenir l’équilibre thermique. On peut donc calculer l’énergie de chaque fermion en utilisant la solution de l’équation de Schrödinger pour un puits quantique infini en 3D. Tel que vu en début de session, ces solutions prennent la forme de modes (ci-contre) qu’on peut décrire par un nombre d’onde

$\vec{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y} + k_z \hat{z}, \quad k_{x,y,z} = \dfrac{2\pi}{\lambda_{x,y,x}}, \quad \lambda_{x,y,z} = 2L_{x,y,z} / n_{x,y,z}$ o

ù $n_{x,y,z}$ = 1, 2, 3…

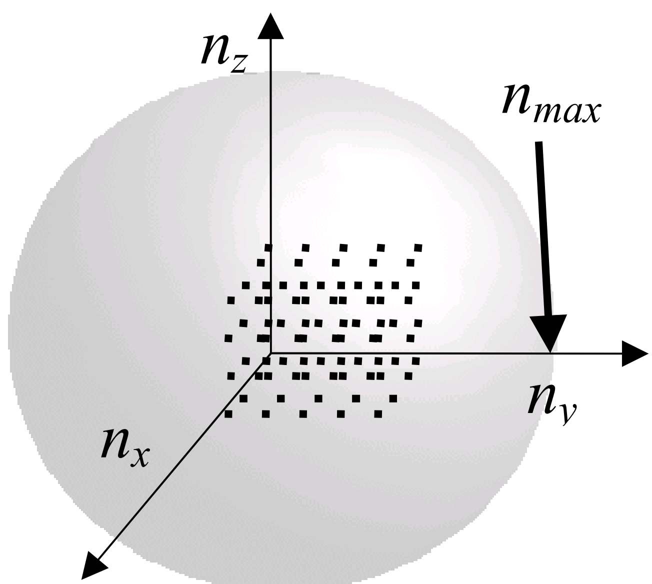
Selon de Broglie, les composantes de la quantité de mouvement $\vec{p}$ sont données par

$p_{x,y,z} = h / \lambda_{x,y,z} = n_{x,y,z} h / 2L_{x,y,z}$

et l’énergie associé à chaque état

$$\varepsilon = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{n_x^2 h^2}{4L^2} + \frac{n_y^2 h^2}{4L^2} + \frac{n_z^2 h^2}{4L^2} \right) = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \right)$$

chacun ce ces états étant décrits par un triplet de nombre entiers $n_{x,y,z}$.



Si T=0, les fermions (qui doivent occuper des états différents) tendrons à remplir tous les niveaux d'énergie les plus petits possibles. En termes de $n_{x,y,z}$, les niveaux formeront 1/8 de sphère de rayon n_{max} de manière à minimiser $E = \sum \varepsilon_{n_{x,y,z}}$. L'énergie des états à la surface de la sphère sera

$$\varepsilon_F = \frac{h^2}{8\,mL^2} n_{max}^2 = \mu \, .$$

Puisqu'il y a N fermions, sachant le volume de 1/8 de sphère,

$$N = 2 \times \frac{1}{8} \times \frac{4}{3} \pi n_{max}^3 = \pi n_{max}^3 / 3$$

où le facteur 2 tient compte du fait qu’on peut en réalité mettre deux fermions de spin ½ dans le chaque état si leur spins sont opposés. En isolant n_{max} et en remplaçant dans l’expression de ε_F on obtient

$$\varepsilon_F = \frac{h^2}{8\,m}\left(\frac{3}{\pi} \frac{N}{V} \right)^{2/3}$$

où N/V est la concentration de fermions. De façon conventionnelle, on appelle ε_F le niveau de Fermi, une notion importante en physique de la matière condensée.

On peut calculer l'énergie totale d'un gaz de Fermi : pour un grand nombre de fermions, on peut approximer la somme sur les états $n_{x,y,z}$ par une intégrale sur l'énergie de chaque fermion sur le 1/8 de sphère,

$$E = \underbrace{2}_{spin} \int_0^\infty \frac{1}{8} 4\pi n^2 dn \underbrace{\varepsilon(n)}_{\substack{=0 \\ \text{si } n>n_{\max}}}$$

$$= \pi \int_0^{n_{max}} dn n^2 \frac{h^2}{8\, mL^2} n^2$$

$$= \frac{\pi h^2 n_{max}^5}{5 \cdot 8\, mL^2}$$

$$= \frac{\pi}{5} \frac{\overbrace{3N}^{n_{max}^3}}{\pi} \frac{h^2}{8\, m} \frac{\overbrace{(3N/\pi)^{2/3}}^{n_{max}^2}}{\underbrace{L^2}_{V^{2/3}}}$$

$$\Rightarrow E = \frac{3}{5} N\varepsilon_F$$

Gaz de Fermi dégénéré (T=0)

On a donc $\varepsilon_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3}{\pi}\frac{N}{V}\right)^{2/3}$ et $E = \frac{3}{5}N\varepsilon_F$

Considérons l'exemple des électrons de conduction dans un métal. Il apert (pour des raisons dont l'explication dépasse passablement le cadre de ce cours) que dans une très bonne approximation ces électrons délocalisés peuvent être considérés comme des électrons libres, c'est-à-dire qui n'interagissent ni entre eux, ni avec les ions pourtant tous présents en grand nombre et à de courtes distances. Cela permet d'expliquer de nombreuses propriétés de base, mais pas toutes! Il s'agit donc d'un gaz parfait de fermions.

Dans un tel gaz, constitué des électrons de valence, le niveau de Fermi est occupé par ce qu'on appelle les électrons de conduction. Leur énergie est proche de celle du niveau de Fermi. Puisque $N/V \approx 10^{23}\ e/cm^3\ = 10^{29}\ e/m^3$

$$\Rightarrow \varepsilon_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3}{\pi}\frac{N}{V}\right)^{2/3} \sim 8\,\mathrm{eV} >> kT \sim 25\,\mathrm{meV}$$

Du fait qu'ils soient des fermions, les électrons de conduction dans un métal ont donc une énergie considérable par rapport à l'énergie déduite par le théorème d'équipartition.

Il est à noter que le gaz de Fermi dégénéré s'applique non seulement aux électrons dans un métal mais également au noyau des atomes, aux naines blanches, aux étoiles à neutrons, et à l'^{3}He liquide.

À retenir

- signification d'un boson et d'un fermion
- implications
- $\bar{n}_s = \frac{1}{e^{(\varepsilon_s-\mu)/kT} \pm 1_{\substack{fermions\\bosons}}}$
- l'énergie de Fermi et sa signification $\varepsilon_F = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3}{\pi}\frac{N}{V}\right)^{2/3}$