Physique Statistique

Chapitre 6
Statistiques Quantiques et Limite Classique

1 – Rappels de Mécanique quantique

Un résultat important de la mécanique quantique est que toutes les particules se divisent en deux catégories: fermions ou bosons. Ces particules se comportent de manière identique à faible concentration, c'est-à-dire quand la concentration est beaucoup plus faible que la concentration quantique: $n << n_Q = \left(\frac{8\pi m\tau}{\hbar^2}\right)^{3/2}$

On est dans ce cas dans le cas classique.

Si la densité est élevée, $n \geq n_Q$ on a affaire à un gaz quantique.

Si la concentration est fixée, la transition se produit en fonction de la température, soit:

$$\tau_0 = \left(\frac{\hbar^2}{8\pi m}\right) n_Q^{3/2}$$

On est dans le régime quantique quand: $\tau < \tau_0$

1.1 Système à une particule

Dans un système à une particule, on écrit l'équation de Schroedinger :

$$H\Phi_s = \varepsilon_s \Phi_s$$

Φ_s est la fonction d'onde (orbitale) d'une particule d'énergie ε_s .

A une énergie ε_s correspond une orbitale Φ_s

1.2 Système à N particules indépendantes

$$H\Psi_i = E_i \Psi_i$$

Ψ_i est le produit des Φ_s : $\Phi_s^1.\Phi_t^2.\Phi_u^3$......

1.3 Fermions et bosons

En mécanique quantique, on démontre que:

Les fermions ont un spin demi-entier :He-3, électron, proton
Les bosons ont un spin entier : He-4, d

On ne peut mettre qu'un fermion par orbitale (principe d'exclusion de Pauli)
On peut mettre plusieurs bosons sur la même orbitale

Ψ_i est anti-symétrique pour les fermions
Ψ_i est symétrique pour les bosons

Donc le nombre moyen de particules (taux d'occupation) d'un état d'énergie ε_s appelé $f \equiv \overline{N}(\varepsilon_s)$ est très différent suivant les fermins ou les bosons:

Pour les fermions : $0 \leq f \leq 1$
Pour les bosons : $0 \leq f \leq \infty$

Pour les fermions la fonction de partition devient :

$$Z = \sum_{N=0}^{N=1} \sum_s e^{\beta(N\mu - \varepsilon_s)} = \sum_{N=0}^{N=1} \sum_s \lambda^N e^{-\beta\varepsilon_s}$$

Avec : $\lambda = e^{\beta\mu}$ et $\beta = \dfrac{1}{kT}$

Pour les bosons la fonction de partition devient :

$$Z = \sum_{N=0}^{N=\infty} \sum_s e^{\beta(N\mu - \varepsilon_s)} = \sum_{N=0}^{N=\infty} \sum_s \lambda^N e^{-\beta\varepsilon_s}$$

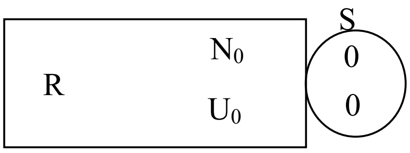
2 – Distribution de Fermi-Dirac

Objectif

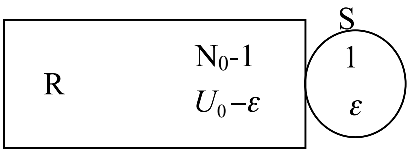
Trouver l'occupation moyenne d'une orbitale d'un système S obéissant à la statistique de Fermi-Dirac.

$$Z = \sum_{N=0}^{N=1} \sum_s e^{\beta(N\mu - \varepsilon_s)} = \sum_{N=0}^{N=1} \sum_s \lambda^N e^{-\beta\varepsilon_s}$$

Soit un système S composé d'une seule orbitale en équilibre diffusif avec un grand réservoir. Les états possibles sont :



0 fermion
énergie 0



1 fermion
énergie ε

Ce sont les deux états accessibles du système S (les orbitales)

La fonction de partition du système grand canonique S s'écrit :

$$Z = \sum_{N,s} \lambda^N e^{-\beta\varepsilon_s} = 1 + \lambda e^{-\beta\varepsilon}$$

Car pour N=0, on a $\varepsilon_s = 0$, et pour N=1 on a $\varepsilon_s = \varepsilon$

Le nombre moyen $\overline{N}(\varepsilon_s)$ de particules dans l'état d'énergie ε est donné par la relation :

$\overline{N} = \lambda \dfrac{\partial \ln Z}{\partial \lambda}$ vu au chapitre précédent

Donc ici $\overline{N}(\varepsilon_s) = f(\varepsilon) = \lambda \dfrac{\partial \ln Z}{\partial \lambda} = \dfrac{\lambda}{Z}\dfrac{\partial Z}{\partial \lambda}$

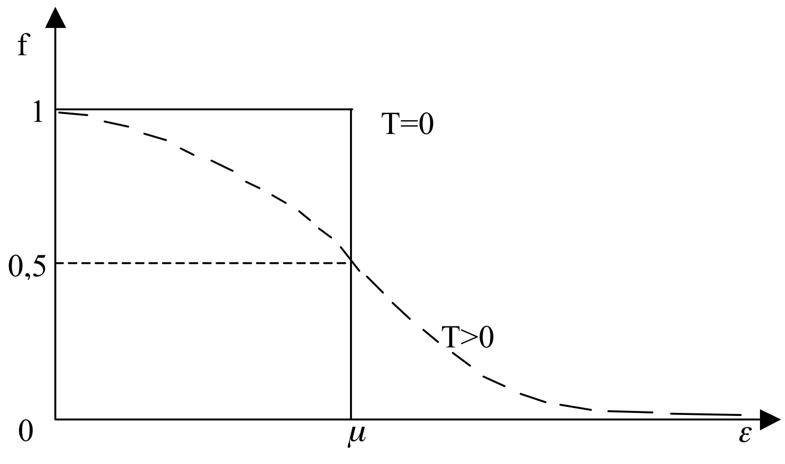
$$f(\varepsilon) = \frac{\lambda}{1+\lambda e^{-\beta\varepsilon}} e^{-\beta\varepsilon} = \frac{1}{\lambda^{-1} e^{\beta\varepsilon} + 1}$$

comme $\lambda = e^{\beta\mu}$ donc $\boxed{f_{FD}(\varepsilon) = \dfrac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}}$

C'est la distribution de Fermi-Dirac. C'est aussi le taux d'occupation de l'orbitale d'énergie ε

Si T→0, alors $e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} \to \infty$ si $\varepsilon - \mu > 0$ alors $f(\varepsilon) \to 0$

$e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} \to 0$ si $\varepsilon - \mu < 0$ alors $f(\varepsilon) \to 1$



Lorsque T>0, on transfère les fermions de la partie $\varepsilon < \mu$ vers $\varepsilon > \mu$

Pour un électron de conduction dans un métal : $T = \dfrac{\mu}{k} = 50000K$

Le niveau de Fermi est : $\mu(T=0) \equiv \varepsilon_F$

A T=0K :
Seuls les états d'énergie $\varepsilon < \mu(=\varepsilon_F)$ sont occupés. Les états $\varepsilon > \mu(=\varepsilon_F)$ sont vides.

A T>0K :
Certains états d'énergie $\varepsilon > \mu(=\varepsilon_F)$ ont des chances d'être occupés.

A $\varepsilon = \mu$, alors pour toutes les températures : $f(\mu) = \frac{1}{2}$

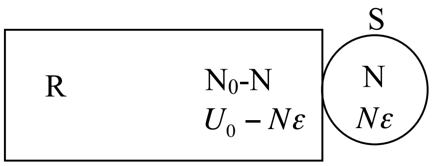
Exemple de Fermions :
Les électrons dans un métal
Les trous dans un semi-conducteur

3– <u>Distribution de Bose-Einstein</u>

Les bosons ont un spin entier. Leurs orbitales peuvent être occupées par N bosons avec $N \geq 0$.
Les bosons ont des propriétés très différentes des fermions.

Exemple :
La condensation de Bose-Einstein. L'hélium-4 devient superfluide à T<2,17K

Soit un système S constitué d'une seule orbitale ε en équilibre avec un réservoir R, contenant un très grand nombre de particules.



Le système S est en équilibre diffusif avec R. Il peut être occupé par 0, 1, 2,…..N bosons provenant de R.

L'énergie du système S pourra être :
$\varepsilon_s = 0, \varepsilon, 2\varepsilon, 3\varepsilon, ...N\varepsilon$ selon l'état d'occupation des bosons.

La fonction de partition Z du système S devient :

$$Z = \sum_{N=0}^{N_0} e^{\beta(N\mu - N\varepsilon)} = \sum_{N=0}^{N_0} \lambda^N . e^{-\beta N\varepsilon} = \sum_{N=0}^{N_0} (\lambda . e^{-\beta\varepsilon})^N \quad \text{avec} \quad \lambda = e^{\beta\mu}$$

N_0 étant un très grand nombre, on peut le supposer égal à l'infini.

On pose $x = \lambda e^{-\beta\varepsilon}$

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} x^N = \frac{1}{1-x} = \frac{1}{1-\lambda e^{-\beta\varepsilon}}$$

Le nombre moyen de bosons est :

$$\overline{N}(\varepsilon) = f(\varepsilon) = \lambda \frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda} = \frac{\lambda}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \lambda}$$

$$f(\varepsilon) = -\lambda(1-\lambda e^{-\beta\varepsilon})(1-\lambda e^{-\beta\varepsilon})^{-2}(-e^{-\beta\varepsilon})$$

$$f(\varepsilon) = \frac{\lambda e^{-\beta\varepsilon}}{1-\lambda e^{-\beta\varepsilon}} = \frac{1}{\lambda^{-1}e^{\beta\varepsilon}-1}$$

$$\boxed{f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}}$$

C'est la distribution de Bose-Einstein.
C'est le taux d'occupation de l'orbitale d'énergie ε

Les deux fonctions sont très semblables à un signe près, par contre les propriétés sont très différentes ;

$$\boxed{f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}} \qquad \text{et} \qquad \boxed{f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}}$$

4 – <u>Limite classique deFermi-Dirac et Bose-Einstein</u>

Pour ε grand, nous obtenons :

$$f_{FD} \approx f_{BE} \approx 0$$

Quand $\frac{\varepsilon-\mu}{kT} \to \infty$ Donc $\varepsilon-\mu >> kT$

C'est le cas des gaz parfaits dont la concentration $n = \frac{N}{V}$ est faible devant la concentration quantique : $n_Q = \left(\frac{8\pi mkT}{\hbar^2}\right)^{3/2}$

Puisque $\varepsilon-\mu >> kT$

$$f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \approx \exp\frac{\mu-\varepsilon}{kT}$$

$$f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} \approx \exp\frac{\mu-\varepsilon}{kT}$$

$$\boxed{f_{FD}(\varepsilon) \approx f_{BE}(\varepsilon) \approx \lambda e^{\frac{-\varepsilon}{kT}}} \qquad \text{avec} \qquad \lambda = e^{\beta\mu}$$

C'est une distribution proportionnelle au facteur de Boltzmann