jean-baptiste.moree@cea.fr

Fermions en nombre déterminé

Distribution à l'équilibre (Fermi-Dirac)

$$n_i^0 = \frac{g_i}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1}$$

où μ est le potentiel chimique (cf. résumé de cours n.1), reliable au multiplicateur de Lagrange associé à la conservation du nombre de particules. On note

$$\chi = \beta \mu$$

Fonction de Fermi, énergie et température de Fermi

La fonction de Fermi est définie par

$$\bar{n^0}(\epsilon_i) = \frac{n_i^0}{g_i} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1} \in [0, 1]$$

À T=0, on a

$$\bar{n^0}(\epsilon_i) = \begin{cases} 1 & \text{si } \epsilon_i < \mu \\ 0 & \text{si } \epsilon_i > \mu \end{cases}$$

et tous les niveaux d'énergie inférieure à μ sont occupés par 1 seule particule (au facteur de dégénérescence près), tous les autres sont inoccupés.

L'énergie de Fermi ϵ_f est la valeur du potentiel chimique μ à T=0. On définit la température de Fermi comme

$$\theta_f = \frac{\epsilon_f}{k}$$

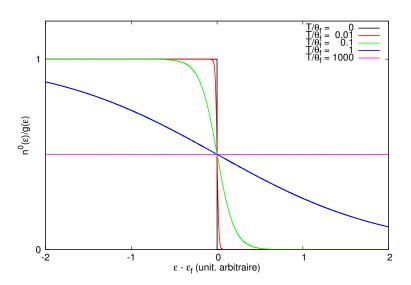


FIGURE 1 – Fonction de Fermi (dans la limite continue) pour différentes températures

2 possibilités

- $T \ll \theta_f$ (la densité est haute) : les effets quantiques sont importants, le principe d'exclusion de Pauli a un effet notable à l'échelle macroscopique. Le gaz est dit dégénéré. Contrairement aux bosons (qui se regroupent tous dans le même état en formant un condensat de Bose-Einstein), les N fermions s'empilent sur les N états de plus basse énergie. Cela crée une pression de dégénérescence quantique, qui empêche la densité d'augmenter encore plus.
- $T \gg \theta_f$ (la densité est basse) : les effets quantiques sont négligeables, le volume disponible permet aux particules de se répartir sans trop de contraintes. On se retrouve dans la limite classique : le système devient un gaz parfait dans la statistique de Maxwell-Boltzmann.

Densité d'états et énergie de Fermi (limite continue, gaz parfait de fermions non relativistes)

Pour les fermions non relativistes, on a

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

On note g_s la dégénérescence interne. La densité d'états s'obtient par un calcul similaire à celui pour le gaz parfait monoatomique. On obtient le nombre d'états d'énergie $\in [\epsilon, \epsilon + d\epsilon]$

$$g(\epsilon)d\epsilon = g_s \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon} d\epsilon$$
 (1)

On en déduit l'énergie de Fermi, en remarquant qu'à T=0

$$N = \int_0^{+\infty} n^0(\epsilon) d\epsilon = \int_0^{\epsilon_f} g(\epsilon) d\epsilon \qquad \boxed{\epsilon_f = \left(\frac{3N}{g_s 4\pi V}\right)^{2/3} \frac{h^2}{2m}}$$

Remarque Pour un type de fermions donné, ϵ_f ne dépend que de la densité $n=\frac{N}{V}$

Grandeurs thermodynamiques (limite continue)

L'entropie S (et donc beaucoup d'autres grandeurs thermodynamiques), hors limite continue, s'expriment en fonction de la somme

$$\sum_{i} g_i \ln[1 + e^{\chi - \beta \epsilon_i}]$$

En général, il n'est pas possible de calculer cette somme. Il faut donc passer à la limite continue.

En utilisant l'expression 1 de $g(\epsilon)d\epsilon$, on met en évidence une fonction permettant d'exprimer les grandeurs thermodynamiques

$$h(\chi) = g_s \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \sqrt{x} \ln[1 + e^{\chi - x}] dx h'(\chi) = \frac{N}{Z_{\text{GPCM}}} = \alpha$$

On obtient

$$U = \frac{3}{2}NkT\left[\frac{h(\chi)}{h'(\chi)}\right] \qquad S = Nk\left[\frac{5}{2}\frac{h(\chi)}{h'(\chi)} - \chi\right]$$

$$C_V = \frac{3}{2}Nk\left[\frac{h(\chi)}{h'(\chi)} - \frac{3}{2}\frac{h'(\chi)}{h''(\chi)}\right] \qquad F = NkT\left[\chi - \frac{h(\chi)}{h'(\chi)}\right] \qquad P = \frac{NkT}{V}\left[\frac{h(\chi)}{h'(\chi)}\right]$$

Remarque Les expressions des grandeurs thermodynamiques ci-dessus sont les mêmes que pour le gaz parfait de bosons en nombre déterminé dans la limite continue, en remplaçant la fonction f par la fonction h.

Grandeurs thermodynamiques à T=0 On peut calculer explicitement les grandeurs thermodynamiques à T=0.

$$U_0 = \frac{3}{5}N\epsilon_f \qquad S_0 = 0$$

$$C_{V0} = 0 F_0 = \frac{3}{5}N\epsilon_f P_0 = \frac{2}{5}\frac{N}{V}\epsilon_f$$

Grandeurs thermodynamiques à T basse $(T \ll \theta_f)$

Pour $T \ll \theta_f$, on pose $x_f = \frac{T}{\theta_f}$. Lorsque $T \to 0$, on a $\chi = \beta \mu \to +\infty$. On fait donc tendre χ vers $+\infty$ dans h, h', h''. On y fait un développement limité en χ^{-1} , on trouve

$$U = U_0 \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} x_f^2 + o(x_f^2) \right] \qquad S = Nk \frac{\pi^2}{2} \left[x_f + o(x_f) \right]$$

$$C_V = Nk\frac{\pi^2}{2}\left[x_f + o(x_f)\right] \qquad F = F_0\left[1 - \frac{5\pi^2}{12}x_f^2 + o(x_f^2)\right] \qquad P = P_0\left[1 + \frac{5\pi^2}{12}x_f^2 + o(x_f^2)\right]$$