

La physique statistique

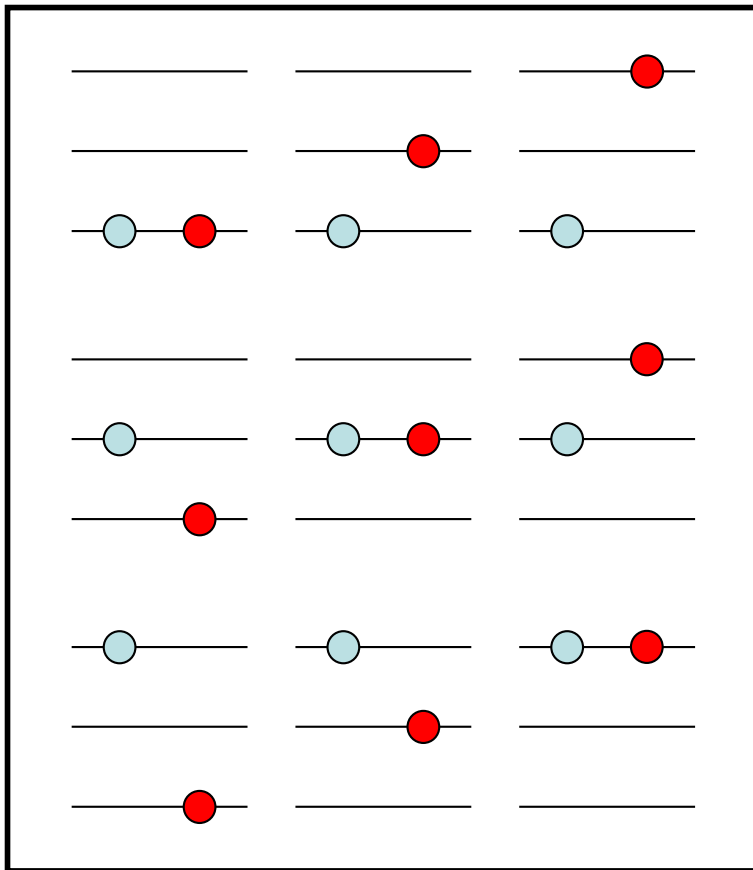
des systèmes quantiques

Le cadre théorique

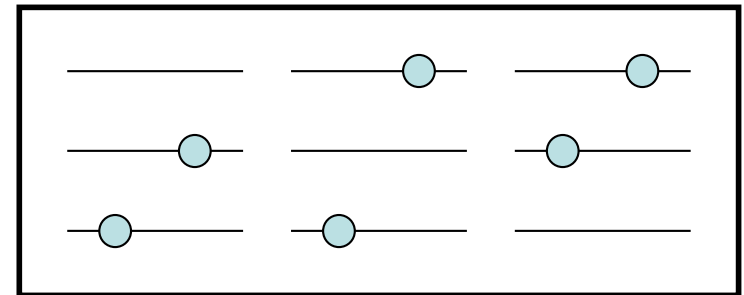
- Des particules quantiques identiques (bosons, fermions).
- Des niveaux d'énergie d'états individuels E_i (i est l'indice de l'état individuel et non de la particule).
- Dans la limite continue, les niveaux d'énergie d'états individuels sont remplacés par une densité d'états $g(E)$.
- Problème : décompter les micro-états (états du système total). Ces micro-états sont caractérisés par les indices α .

Dénombrement quantique (particules indépendantes)

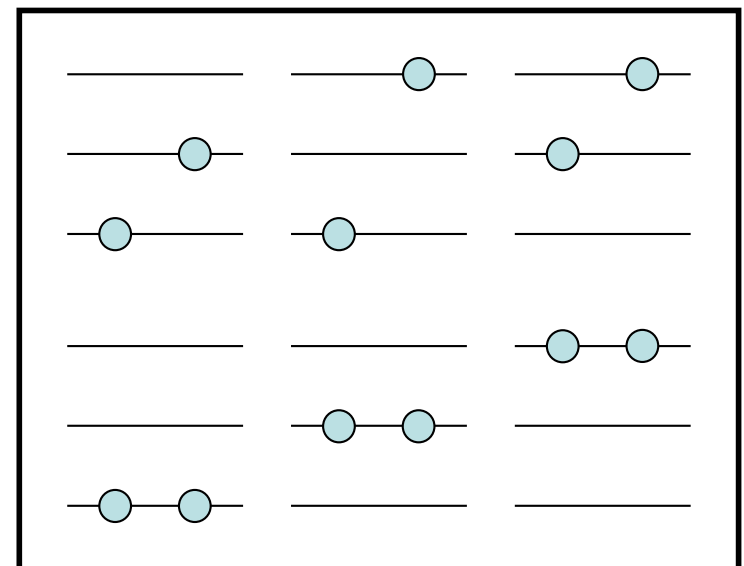
3 états, 2 particules **discernables**
 $3^2 = 9$ micro-états à deux particules



Fermions → 3 micro-états



Bosons → 6 micro-états



Statistiques de bosons et fermions

Au lieu de comptabiliser les états possibles, on introduit le **potentiel chimique μ** :

$$\Xi = \sum_{|\alpha\rangle} e^{-\beta U_\alpha + \beta \mu N_\alpha}$$

Micro-état $|\alpha\rangle \rightarrow \{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\}$

$$\begin{cases} N_\alpha = \sum_i n_i \\ U_\alpha = \sum_i n_i E_i \end{cases}$$

Si l'on a affaire à des fermions, les n_i valent 0 ou 1.

La grande fonction de partition peut alors se factoriser :

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_{|\alpha\rangle} e^{-\beta \sum_i n_i E_i + \beta \mu \sum_i n_i} = \sum_{\{n_1, n_2, \dots\}} e^{\sum_i n_i (-\beta E_i + \beta \mu)} = \prod_i \sum_{n_i} \left(e^{-\beta E_i + \beta \mu} \right)^{n_i} \\ &= \prod_i f(\beta, \mu, E_i) \end{aligned}$$

Statistiques quantiques

Pour les fermions :

$$f(\beta, \mu, E) = \sum_{n=0}^1 \left(e^{-\beta E + \beta \mu} \right)^n = 1 + e^{-\beta(E-\mu)}$$

Pour les bosons :

$$f(\beta, \mu, E) = \sum_{n=0}^{+\infty} \left(e^{-\beta E + \beta \mu} \right)^n = \frac{1}{1 - e^{-\beta(E-\mu)}}$$

Nombre d'occupation moyen :

Pour les fermions :

$$\bar{n} = \frac{1}{f(\beta, \mu, E)} \sum_{n=0}^1 n \left(e^{-\beta E + \beta \mu} \right)^n = \boxed{\frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}}$$

Statistique de Fermi-Dirac

Pour les bosons :

$$\bar{n} = \frac{1}{f(\beta, \mu, E)} \sum_{n=0}^{+\infty} n \left(e^{-\beta E + \beta \mu} \right)^n = \boxed{\frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1}}$$

Statistique de Bose-Einstein

La statistique de Fermi-Dirac

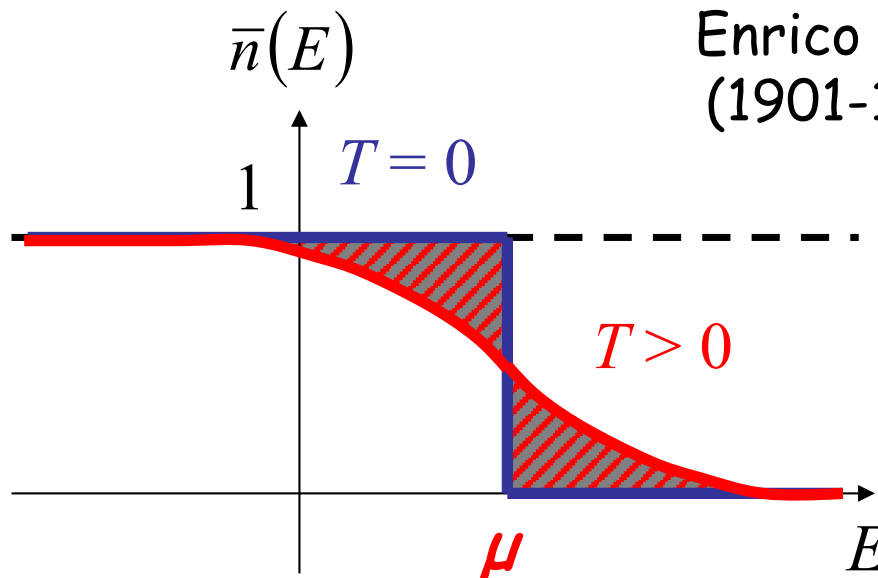
$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$$



Enrico Fermi
(1901-1954)



Paul Adrien Maurice Dirac
(1902-1984)



à $T=0$, seuls les états sous μ sont occupés.

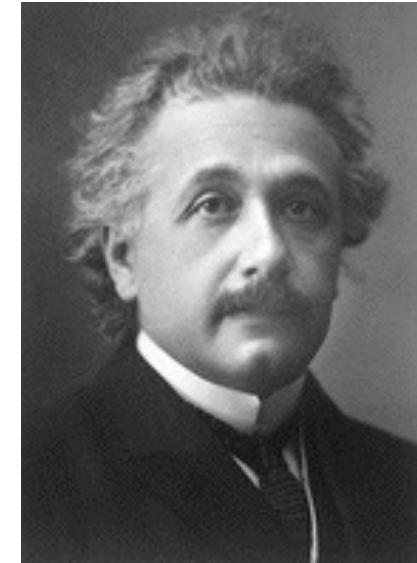
à $T>0$, les états au-dessus de μ ont une probabilité d'être occupés.

La statistique de Bose-Einstein

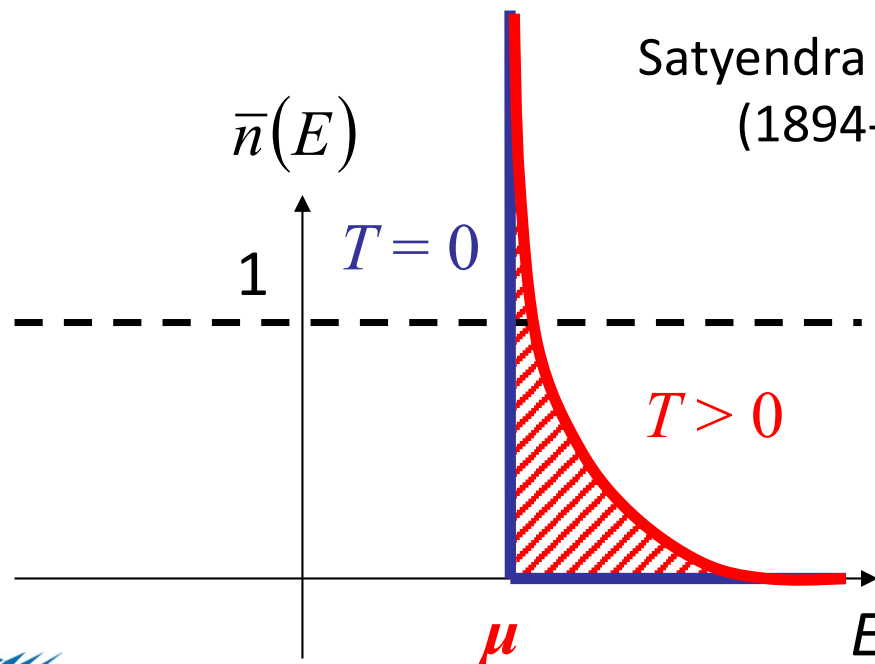
$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1}$$



Satyendra Nath Bose
(1894-1974)



Albert Einstein
(1879-1955)



à $T=0$, seuls les états exactement à μ sont occupés.

à $T>0$, les états au-dessus de μ ont une probabilité d'être occupés.

Formalisme d'états continus

Le nombre moyen et l'énergie moyenne du système s'écrivent sous la forme d'intégrales :

$$\bar{N} = \int_0^{+\infty} \bar{n}(E) g(E) dE \quad \bar{U} = \int_0^{+\infty} E \bar{n}(E) g(E) dE$$

$$\text{avec} \quad \bar{n}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} \pm 1}$$

$$N = \int_0^{+\infty} \frac{g(E)}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} \pm 1} dE$$

Dans le cas où les énergies sont très grandes devant le potentiel chimique :

$$\bar{n}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} \pm 1} \approx e^{-\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right)}$$

$$N = e^{\beta \mu} \int_0^{+\infty} e^{-\beta E} g(E) dE$$

On retrouve la statistique de Maxwell-Boltzmann

Systèmes quantiques de bosons

La condensation de Bose-Einstein

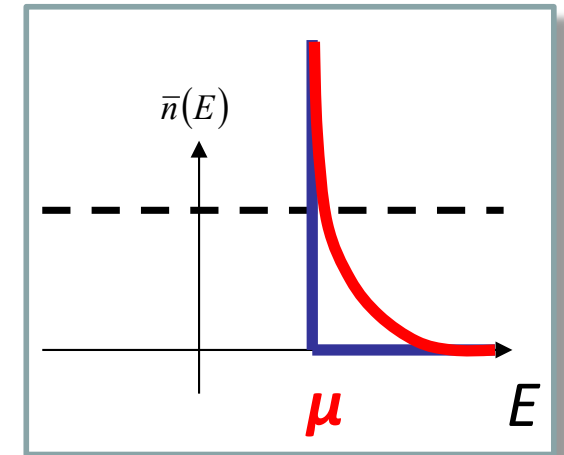
Pour un système de bosons avec des énergies débutant à $E=0$:

$$N = \int_0^{+\infty} \bar{n}(E) g(E) dE = \int_0^{+\infty} \frac{g(E)}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1} dE$$

Il faut donc que μ soit négatif.

Problème :

$$\lim_{T \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} \frac{g(E)}{e^{\frac{E}{k_B T}} - 1} dE = 0$$



Dans la limite des très basses températures, on ne peut plus considérer une densité d'états continue pour toute la population.

On sépare la population **en deux** :

$$N = \int_0^{+\infty} \frac{g(E)}{e^{\frac{E}{k_B T}} - 1} dE + N(E=0) \quad \longrightarrow$$

$$N = \int_0^{+\infty} \frac{g(E)}{e^{\frac{E}{k_B T_c}} - 1} dE$$

La condensation de Bose-Einstein

Température de condensation :
$$N = \int_0^{+\infty} \bar{n}(E) g(E) dE = K \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{E}}{e^{\frac{E}{k_B T_c}} - 1} dE$$

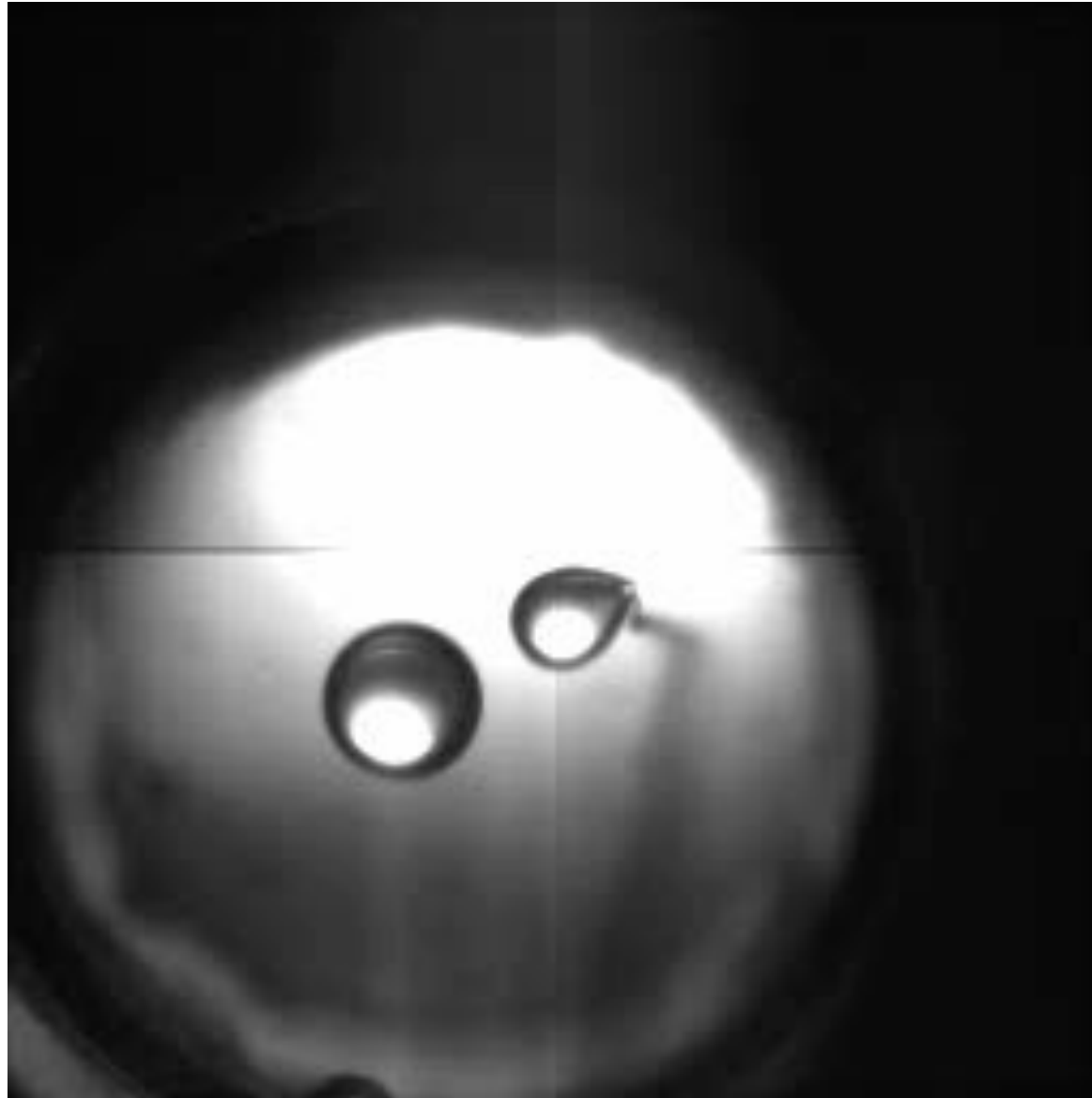
donc
$$N = \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2} M^{3/2} (k_B T_c)^{3/2} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{u}}{e^u - 1} du \quad 2,6 \times \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

On en déduit la température de « condensation » :

$$\frac{2\pi \hbar^2}{2,6^{2/3} M} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3} = k_B T_c = \frac{2\pi \hbar^2}{2,6^{2/3} M^{5/3}} \rho^{2/3}$$

A.N. :
$$T_c = \frac{1}{k_B} \frac{2\pi \hbar^2}{2,6^{2/3} M^{5/3}} \rho^{2/3} = \frac{1}{1,4 \cdot 10^{-23}} \frac{2 \times 3 \times (10^{-34})^2}{2 \times \left(\frac{4}{6 \cdot 10^{23}} 10^{-3} \right)^{5/3}} (0,125 \cdot 10^{-3} \cdot 10^6)^{2/3} \approx 3K !!!$$

L'hélium-4 superfluide



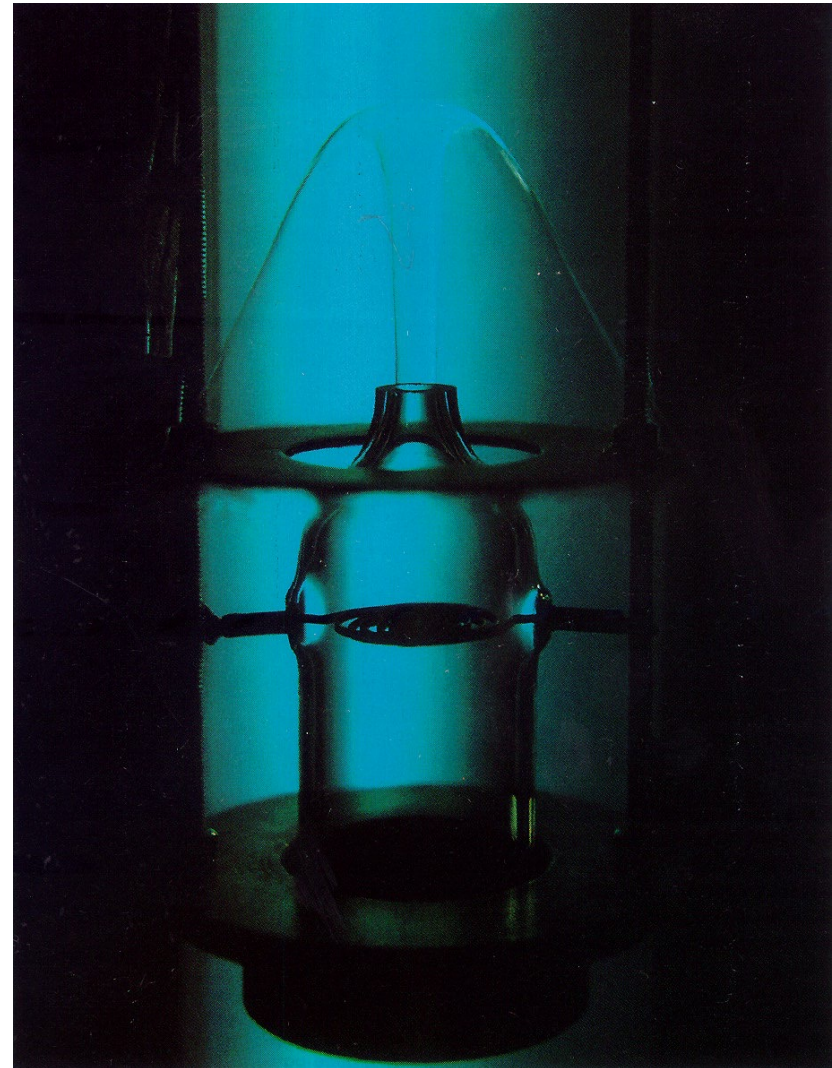
La superfluidité de l'hélium liquide

Découverte en 1937

Kapitza

Allen et Misener

Le liquide ne se comporte pas comme un ensemble de molécules classiques mais comme un « **condensat** » unique



Effet « fontaine »

L'effet « fontaine »



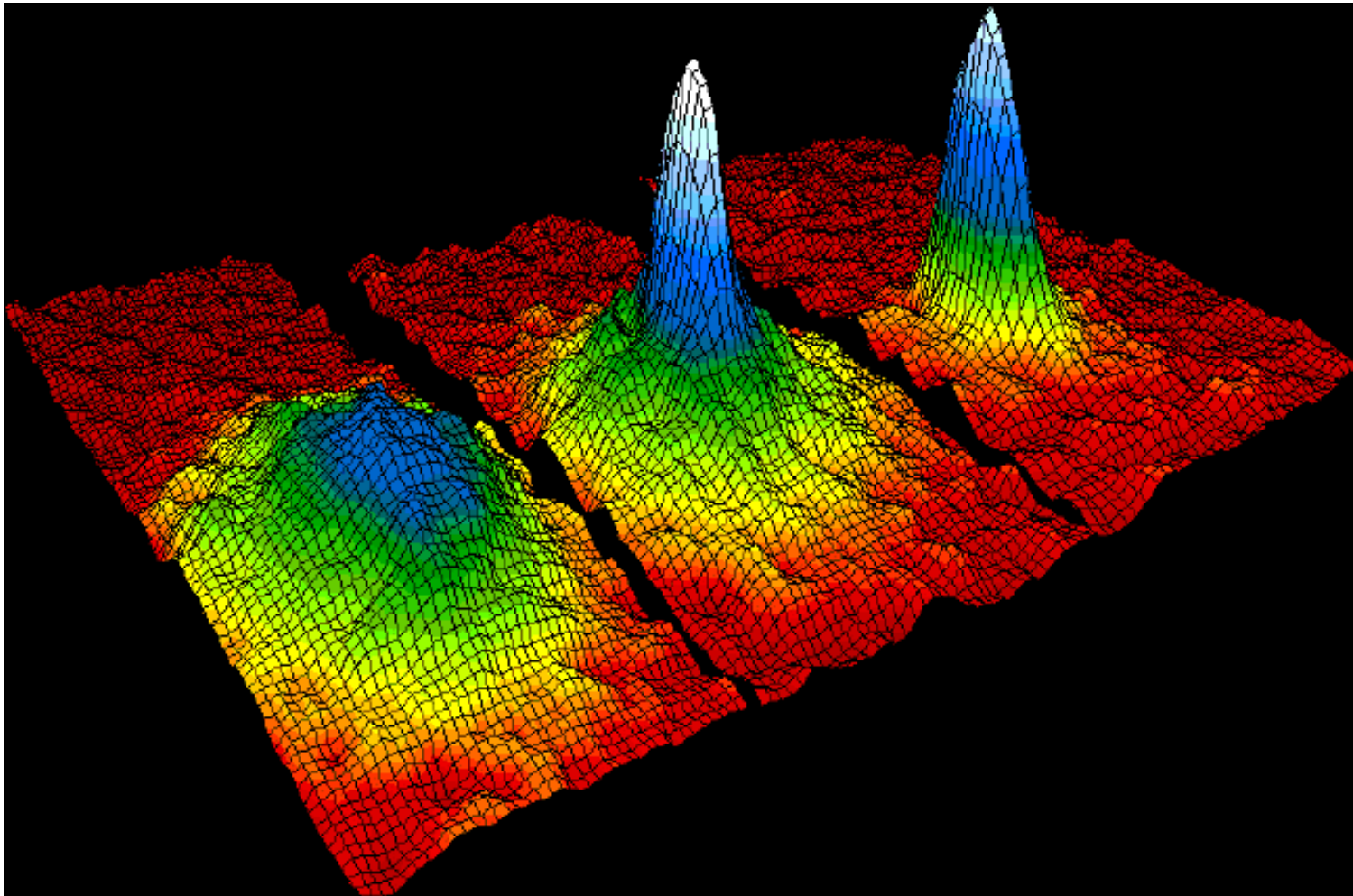
On peut observer le trajet d'électrons individuels !



Journal of Low Temperature Physics, avril 2007

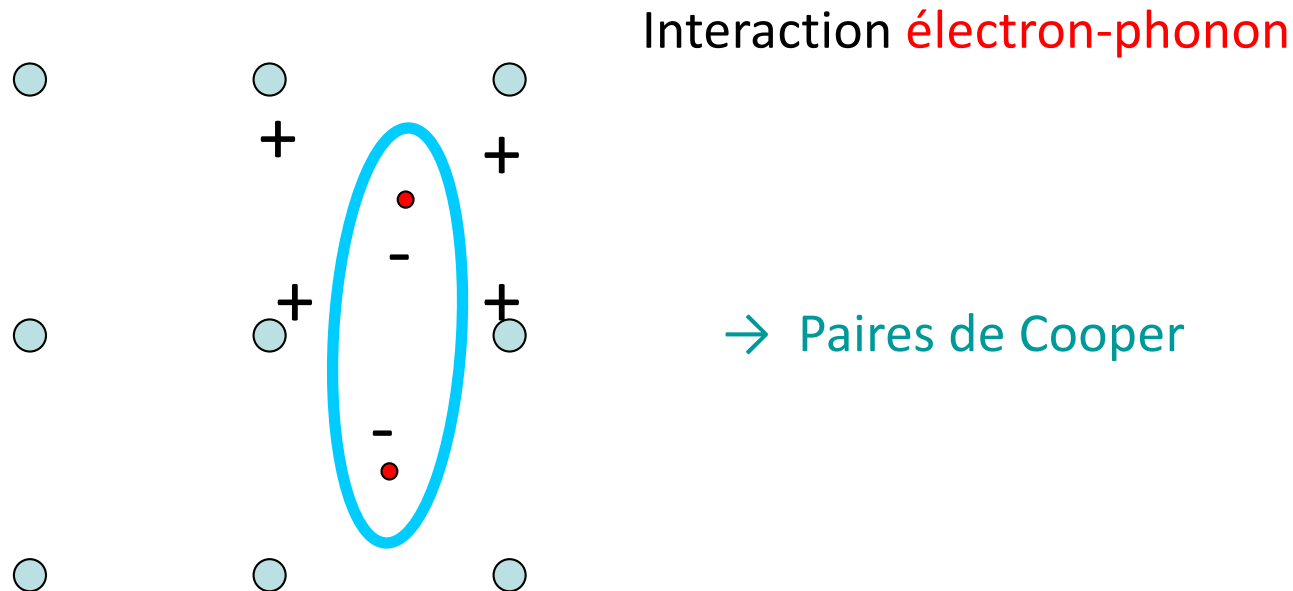
<http://physics.brown.edu/physics/researchpages/cme/bubble/cavexp.html>

Première observation directe d'un condensat de Bose-Einstein (1995)



By NIST/JILA/CU-Boulder - NIST Image, Public Domain,
<https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=403804>

La supraconductivité



Leon N. Cooper
(1930 -)

Phonon : onde collective de mouvement cristallin

Ce sont des quasi-particules auxquelles on peut associer une impulsion.

$$\hat{H} = \sum_k \hbar \omega_k \hat{n}_k$$

opérateur

Théorie BCS
(Bardeen – Cooper – Schrieffer)

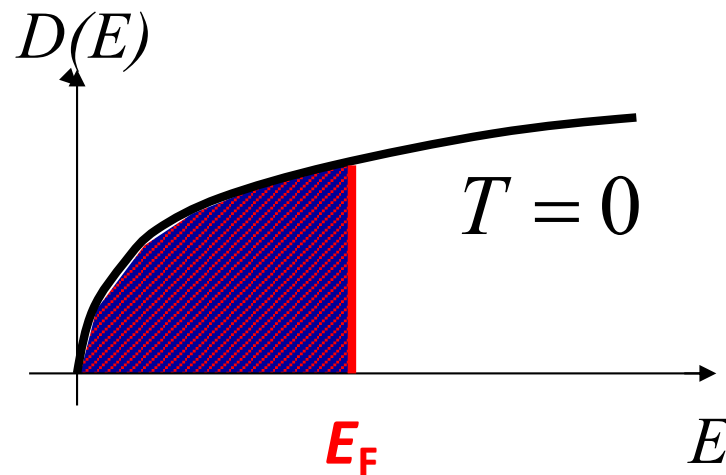
Systèmes quantiques de fermions

Le gaz de fermions

L'énergie maximale correspond à cette impulsion est :

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} = k_B \Theta_F$$

Énergie de Fermi de l'ordre de quelques eV -> **Température de Fermi $\approx 10\,000\text{ K}$!**



$$\begin{cases} N = K \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{2}{3} K E_F^{3/2} \\ U = K \int_0^{E_F} E \sqrt{E} dE = \frac{2}{5} K E_F^{5/2} \end{cases}$$



$$U = \frac{3}{5} N E_F$$

Le gaz quantique de fermions : les électrons

On considère un gaz d'électrons dans un solide conducteur. Les électrons sont des fermions de spin $\frac{1}{2}$. La densité d'états à une particule à 3D est proportionnelle à \sqrt{E} .

$$N = \int_0^{+\infty} \bar{n}(E) g(E) dE = K \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{E}}{1 + e^{\frac{E-\mu}{k_B T}}} dE$$
$$= K (k_B T)^{3/2} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{u}}{1 + e^{\frac{-\mu}{k_B T}} e^u} du = K (k_B T)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} f\left(\frac{\mu}{k_B T}\right)$$

$$f(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{u}}{1 + e^{-x} e^u} du$$

Remarque :

$$\text{si } x \ll -1 \quad f(x) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \sqrt{u} e^x e^{-u} du = e^x \frac{4}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} v^2 e^{-v^2} dv = e^x$$

Le gaz d'électrons des métaux

La densité d'états libres à une particule donne :

$$K = (2J + 1) \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi p^2 dp}{\sqrt{E} dE} \quad \text{avec} \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

On en déduit donc :

$$N = 2V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} f\left(\frac{\mu}{k_B T} \right)$$

On introduit le niveau de Fermi déjà vu précédemment :

$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$$

$$\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{E_F}{k_B T} \right)^{3/2} = f\left(\frac{\mu}{k_B T} \right)$$

Comme
$$f(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{u}}{1 + e^{-x} e^u} du$$

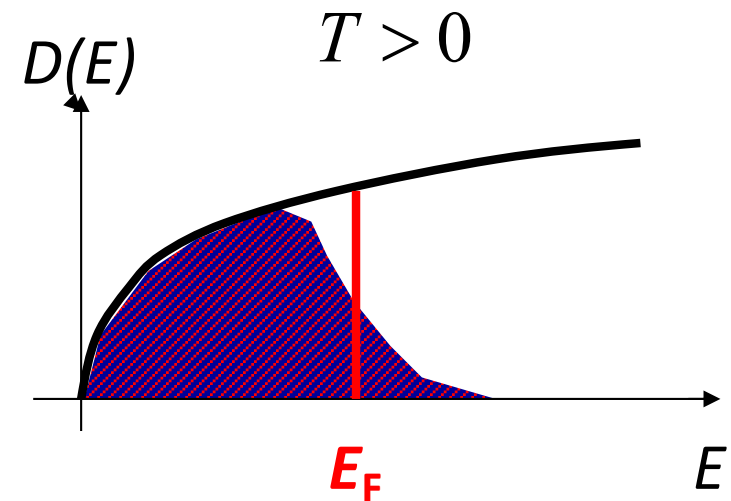
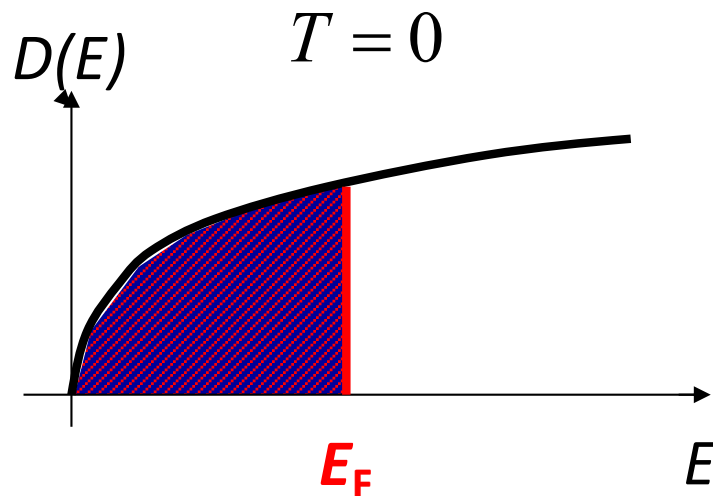
$$\frac{E_F}{k_B T} \gg 1 \Rightarrow \frac{\mu}{k_B T} \gg 1$$

Le gaz d'électrons des métaux

$$f(x) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+x} \frac{\sqrt{u}}{1 + e^{-x} e^u} du = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \times \frac{2}{3} x^{3/2}$$

$$\frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{E_F}{k_B T} \right)^{3/2} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{\mu}{k_B T} \right)^{3/2}$$

$$\mu \approx E_F$$



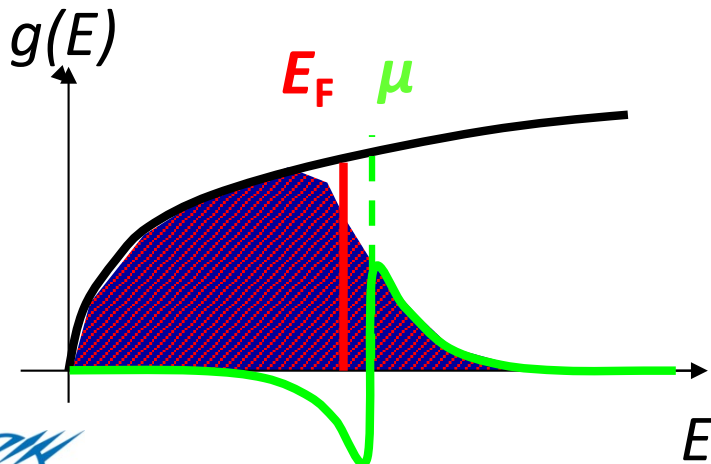
L'énergie interne du gaz d'électrons

$$\left\{ \begin{array}{l} N = K \int_0^{E_F} \sqrt{E} dE = \frac{2}{3} K E_F^{3/2} \\ \bar{U} = K \int_0^{E_F} E \sqrt{E} dE = \frac{2}{5} K E_F^{5/2} \end{array} \right. \longrightarrow \left\{ \begin{array}{l} N = K \int_0^{+\infty} \sqrt{E} \bar{n}(E) dE \\ \bar{U} = K \int_0^{+\infty} E \sqrt{E} \bar{n}(E) dE \end{array} \right.$$

Technique de calcul : on sépare les intégrales en deux parties, une pour $E < \mu$ et l'autre pour $E > \mu$.

$$\int_0^{+\infty} g(E) \bar{n}(E) dE = \int_0^{\mu} g(E) dE + \Delta I$$

$$\Delta I = \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{dg}{dE} \right|_{\mu}$$



$$\left\{ \begin{array}{l} N = N \left(\frac{\mu}{E_F} \right)^{3/2} + \frac{\pi^2}{4} \frac{N (k_B T)^2}{E_F^{3/2}} \frac{1}{2\sqrt{\mu}} \\ \bar{U} = \frac{3}{5} N E_F \left(\frac{\mu}{E_F} \right)^{5/2} + \frac{\pi^2}{4} \frac{N (k_B T)^2}{E_F^{3/2}} \frac{3}{2} \sqrt{\mu} \end{array} \right.$$

La chaleur spécifique du gaz d'électrons

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 = \left(\frac{\mu}{E_F} \right)^{3/2} + \frac{\pi^2}{4} \frac{(k_B T)^2}{E_F^{3/2}} \frac{1}{2\sqrt{\mu}} \\ \frac{\bar{U}}{N} = \frac{3}{5} E_F \left(\frac{\mu}{E_F} \right)^{5/2} + \frac{\pi^2}{4} \frac{(k_B T)^2}{E_F^{3/2}} \frac{3}{2} \sqrt{\mu} \end{array} \right.$$

$$\mu = E_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]$$
$$\bar{U} = \frac{3}{5} N E_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F} \right)^2 \right]$$

$$C_e = \frac{\pi^2}{2} R \nu \frac{k_B T}{E_F}$$

La chaleur spécifique électronique est très différente de la valeur pour un gaz classique qui serait $3R/2$! Le **principe de Pauli** « gèle » les degrés de liberté électroniques.

Le gaz d'électrons des semiconducteurs

On a toujours la relation :

$$N = 2V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} f\left(\frac{\mu}{k_B T} \right)$$

Dans le cas des semiconducteurs, les états de conduction sont très peu remplis : $\mu < 0$.

$$n = \frac{N}{V} = 2 \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu}{k_B T}} = N_c e^{\frac{\mu}{k_B T}}$$

En fait, le potentiel cristallin dessine un nouveau de paysage comportant des **bandes d'énergie interdites**. Les électrons participant à la conduction sont dans la bande dite « de **conduction** » qui est vide à température nulle.

$$n = N_c e^{\frac{\mu - E_c}{k_B T}} \quad \text{et} \quad p = N_v e^{\frac{E_v - \mu}{k_B T}}$$

Licence d'usage dans un contexte public, sans modification

La licence confère à l'utilisateur un droit d'usage sur le document consulté ou téléchargé, totalement ou en partie, dans les conditions définies ci-après et à l'exclusion expresse de toute utilisation commerciale.

Le droit d'usage défini par la licence autorise un usage à destination de tout public qui comprend :

- Le droit de reproduire tout ou partie du document sur support informatique ou papier,
- Le droit de diffuser tout ou partie du document au public sur support papier ou informatique, y compris par la mise à la disposition du public sur un réseau numérique.

Aucune modification du document dans son contenu, sa forme ou sa présentation n'est autorisée. Les mentions relatives à la source du document et/ou à son auteur doivent être conservées dans leur intégralité.

Le droit d'usage défini par la licence est personnel, non exclusif et non transmissible. Tout autre usage que ceux prévus par la licence est soumis à autorisation préalable et expresse de l'auteur.

