

Ministère de l'Education National

REPUBLIQUE DU MALI

Un Peuple - Un But - Une Foi

Direction Nationale de l'Enseignement
Supérieur et de la Recherche
Scientifique



Département de Physique-Chimie
Option : Physique

ECOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE BAMAKO

(ENSUP)



Exposé du groupe7 :

Gaz de Bosons et de Fermions

Présenté par :

<i>N° Matricule</i>	<i>Nom</i>	<i>Prénoms</i>	<i>Parcours</i>
<i>15C1M05058V</i>	<i>Traoré</i>	<i>Aboubacar Daouda</i>	<i>Master 1:Physique (S2)</i>
<i>15N1F15986K</i>	<i>Tabouré</i>	<i>Sitan Foune</i>	<i>Master 1:Physique (S2)</i>
<i>15N1M15983P</i>	<i>Sidibé</i>	<i>Ousmane</i>	<i>Master 1:Physique (S2)</i>

CLASSE : MASTER 1 PHYSIQUE ; SEMESTRE 2 (S2)

UE : Thermodynamique Statistique

Dirigé par : Mr Abdoulaye Coulibaly

BAMAKO, le 19/04/2019

Plan de l'exposé :

- I. Introduction
- II. Taux d'occupation d'une orbitale d'énergie, limite classique
- III. Energie du gaz d'électron dans l'état fondamental
 - IV. Condensation de Bose-Einstein
 - V. Exemple de gaz de Fermions
 - 1. L'électron de conduction dans un métal
 - 2. Température de Fermi
 - VI. Conclusion

I. Introduction

La thermodynamique est l'étude des systèmes matériels macroscopiques (formés d'un grand nombre de particules). Son but est double :

- Décrire les états d'équilibre des systèmes (température, pression, volume, énergie...)
- Prévoir le sens d'évolution des systèmes, donc les variations des grandeurs physiques, lorsque l'on modifie les conditions extérieures.

La thermodynamique "classique" a pu prévoir certaines propriétés globales de la matière, sans tenir compte de sa structure particulaire ; elle doit donc être complétée par l'étude de la thermodynamique "statistique".

Ainsi, la thermodynamique statistique (description microscopique de la matière) est la partie de la thermodynamique où l'on s'attache à retrouver les propriétés des corps et des fonctions de la thermodynamique en appliquant les méthodes statistiques, classiques ou quantiques, aux assemblages moléculaires que constituent ces corps.

En physique, il existe deux types de particules : les bosons et les fermions.

- Les bosons sont des particules de spin entier $S = n\hbar$ (où $n \in \mathbb{N}$) dont leur fonction d'onde est symétrique dans l'échange des particules (postulat de symétrisation), ils obéissent à la statistique de Bose-Einstein.

Exemples : ${}^{24}\text{He}$ a un spin $S = 0$; les photons, les mésons...

- Les fermions sont des particules de spin demi-entier $S = (n + \frac{1}{2})\hbar$ (où $n \in \mathbb{N}$) dont leur fonction d'onde est antisymétrique dans l'échange des particules (postulat d'antisymétrisation), il obéit à la statistique de Fermi-Dirac.

Exemples : les leptons : électron e^- , muon μ , neutrino ν ; les baryons : proton, neutron.

- ❑ Il ne peut y avoir qu'un fermion dans un état donné (principe d'exclusion de Pauli) c'est-à-dire que le nombre de particules par état est égal 0 ou 1.
- ❑ Il n'y a pas de limite au nombre de bosons dans un état donné.

I. Taux d'occupation d'une orbitale d'énergie, limite classique

Nous avons vu dans le chapitre précédent que la statistique de Fermi-Dirac a été introduite en 1926 par Enrico Fermi et Paul Dirac et qu'elle fut appliquée aux électrons dans un métal par Arnold Sommerfeld. Statistiquement, le nombre n_i de particules dans l'état d'énergie E_i est donné par l'expression empirique suivante :

$$n_i = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{K_B T}\right) + 1}$$

Avec :

- ☞ g_i est la dégénérescence de l'état d'énergie E_i , à savoir le nombre d'états possédant cette énergie ;
- ☞ μ est le potentiel chimique ;
- ☞ K_B est la constante de Boltzmann ;
- ☞ T est la température absolue.

De même, nous avons vu qu'avec la statistique de Bose-Einstein, introduite en 1924 par A. Einstein que le nombre de particules dans un métal se déplaçant avec une énergie E_i est donné par l'expression suivante :

$$n_i = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{K_B T}\right) - 1}$$

Les fermions de spin demi-entier et les bosons de spin entier ont respectivement comme taux d'occupation d'une orbitale d'énergie E_i correspondant à :

$$\begin{aligned} \text{☞ } f(E_i) &= \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{K_B T}\right) - 1} && \text{(les bosons)} \\ \text{☞ } f(E_i) &= \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{K_B T}\right) + 1} && \text{(les fermions)} \end{aligned}$$

Avec $f(E_i) = \frac{n_i}{g_i}$; n_i étant le nombre de particules et g_i la dégénérescence de l'état d'énergie E_i .

La limite classique est obtenue quand $K_B T$ tend vers 0, ou E_i grand. Dans ce cas, les deux fonctions ont la même limite :

$$f(E_i) = \exp \exp \left(\frac{\mu - E_i}{K_B T} \right) = \lambda \exp \exp \left(\frac{-E_i}{K_B T} \right) = \frac{n}{n_i} \exp \left(\frac{-E_i}{K_B T} \right) \ll 1 \text{ avec } \lambda = \exp \exp \left(\frac{\mu}{K_B T} \right)$$

Ce qui revient à dire que $n \ll n_i = \left(\frac{m K_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$

Donc à température ambiante, les électrons dans un métal sont dans un régime quantique.

Un gaz dans un régime quantique est dit dégénéré.

II. Energie du gaz d'électron dans l'état fondamental

1. Le gaz d'électrons libres à 3 dimensions. Etat fondamental ($T = 0$)

Dans le modèle du gaz d'électrons libres on fait l'hypothèse que les électrons se déplacent dans un potentiel effectif constant, qui résulte de l'interaction moyenne de l'électron considéré avec tous les autres électrons et tous les ions.

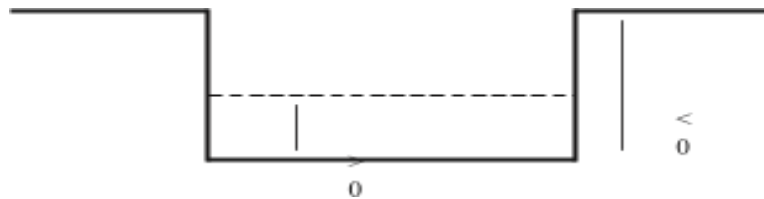


Figure 2.1 – U est le potentiel dans lequel les électrons se déplacent et E leur énergie cinétique mesurée à partir du fond du puits de potentiel

Il s'agit de déterminer les propriétés de l'état fondamental d'un système à N électrons confinés dans un volume V . Dans l'approximation des électrons indépendants on peut trouver l'état fondamental en déterminant les niveaux d'énergie d'un seul électron dans le volume V , puis en remplissant les niveaux d'énergie en accord avec le principe d'exclusion. Nous rappelons que le principe d'exclusion de Pauli affirme qu'il peut exister au plus un électron dans le même état quantique.

2. Etat quantique et niveaux d'énergie d'un électron. Conditions de bord périodiques

Il s'agit de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire à un électron,

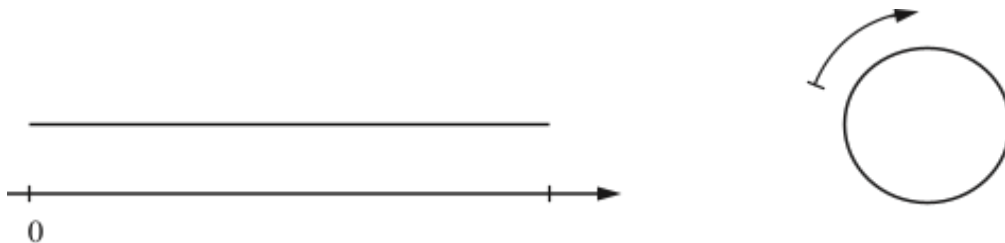
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (7.1)$$

où l'énergie cinétique est mesurée depuis le fond du puits de potentiel. On tient compte du confinement de l'électron dans le volume V par les conditions aux limites, qui dépendent de la barrière de potentiel U et de la forme géométrique de la surface délimitant le volume V .

Pour un volume V assez grand, les propriétés du métal massif ne dépendent pas du choix particulier de la surface. On choisit en général un cube de côté $L = V^{1/3}$.

Il faut ensuite choisir des conditions aux limites sur les faces de ce cube tenant compte de ce que l'électron reste confiné dans le cube. Ces conditions ne devraient pas affecter les propriétés du métal massif. Un choix possible, correspondant à $|U| = \infty$, serait d'imposer que $\psi(\mathbf{r})$ s'annule sur les faces du cube. On obtiendrait des ondes stationnaires, peu compatibles avec la description des propriétés de transport des électrons. Il est plus commode, mais non indispensable, d'utiliser des **conditions de bord périodiques**, c'est-à-dire d'admettre qu'un électron qui atteint la surface sort du cube mais y revient immédiatement par l'autre face.

A une dimension cela revient à écrire que $\psi(x) = \psi(x + L)$.



A trois dimensions, bien que cela soit impossible à réaliser topologiquement, on écrit,

$$\begin{aligned} \psi(x, y, z + L) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x, y + L, z) &= \psi(x, y, z) \\ \psi(x + L, y, z) &= \psi(x, y, z) \end{aligned} \quad (7.2)$$

Les conditions (7.2) sont dites **conditions de bord périodiques** ou de **Bornvon Karman**.

Il s'agit donc de résoudre (7.1) avec les conditions de bord (7.2). Une solution de (7.1) est du type

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (7.3)$$

On peut aussi écrire l'énergie sous la forme bien connue de l'énergie cinétique,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = m \frac{v^2}{2}. \quad (2.8)$$

Remarquons de plus que la fonction d'onde dépendante du temps associée à $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ s'écrit

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t),$$

Où nous avons remplacé E par $\hbar\omega$. Un électron libre est ainsi représenté par une onde plane, progressive ou rétrograde (suivant le sens de $\mathbf{k}$). La densité de probabilité $\psi^* \psi$ est constante dans tout l'espace, ce qui est en accord avec le modèle d'un gaz d'électrons uniforme.

Les conditions de bord périodiques (2.2) imposent que,

$$\exp(ik_x L) = \exp(ik_y L) = \exp(ik_z L) = 1, \quad (2.9)$$

soit

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x; k_y = \frac{2\pi}{L}n_y; k_z = \frac{2\pi}{L}n_z; n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}_0 \quad (2.10)$$

Ainsi dans l'espace (k_x, k_y, k_z) les seules valeurs possibles de $\mathbf{k}$ se trouvent sur un réseau cubique de points de côté $\frac{2\pi}{L}$.

Représentation du réseau à deux dimensions dans la Fig. 2.2.

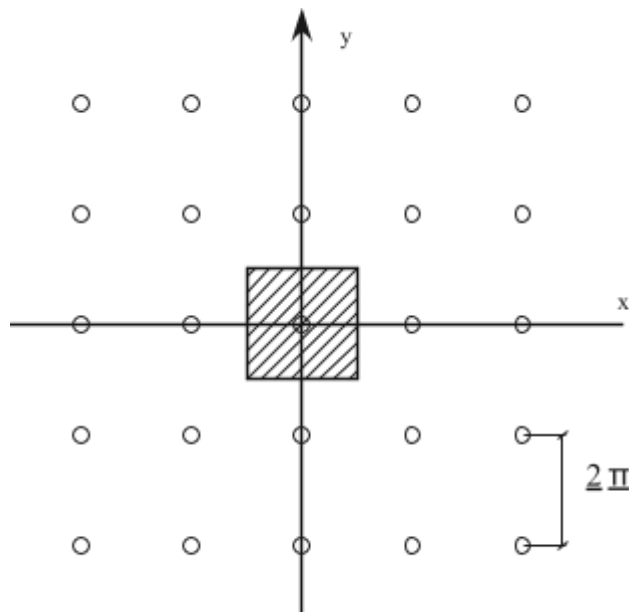


Figure 2.2 – Points dans un espace à 2 dimensions tels que $k_x = \frac{2\pi}{L}n_x, k_y = \frac{2\pi}{L}n_y$.

Le nombre de valeurs de $\mathbf{k}$ incluses dans un volume Ω , de l'espace réciproque, que l'on suppose grand par rapport aux dimensions d'une cellule de volume $(2\pi/L)^3$, est donné par :

$$\frac{\Omega}{(2\pi/L)^3} = \frac{\Omega V}{8\pi^3}$$

III. Condensation de Bose-Einstein :

La condensation de Bose-Einstein est l'apparition d'un état particulier d'un gaz quantique à très basse température.

Prédite en 1924 par Einstein suite à un travail du physicien indien Bose, elle repose sur le principe selon lequel des bosons (particules de spin entier) peuvent occuper le même état quantique, contrairement aux fermions qui suivent le principe d'exclusion de Pauli. Plus précisément, ce qu'Einstein a découvert, est que pour un gaz de bosons donné, il existe une température critique en dessous de laquelle un nombre macroscopique de particules quantiques peuplent l'état de moindre énergie, formant un condensat de Bose-Einstein.

Dans un tel état, toutes les particules perdent leur individualité et le condensat doit être décrit dans son ensemble comme un objet quantique macroscopique. En particulier, l'aspect ondulatoire de la matière, dévient visible à grande échelle, comme c'est également le cas dans un superfluide, le superfluide étant toutefois différent d'un condensat du fait des fortes interactions entre ses constituants. La fonction d'occupation des états quantiques d'impulsion $\mathbf{k}$, à l'équilibre thermodynamique, est donnée par la distribution de Bose-Einstein :

$$b_{eq}(\xi_k^\sigma) = \frac{1}{e^{\beta \xi_k^\sigma} - 1}, \text{ pour un état de spin } \sigma \text{ donné, où } \xi_k^\sigma = E_{ik} - \mu_\sigma \text{ est}$$

l'énergie d'une particule avec $E_{ik} = \frac{k^2}{2m}$ son énergie libre et μ_σ le potentiel chimique. Par ailleurs, $\beta = (K_B T)^{-1}$ est la température inverse habituellement

définie (K_B la constante de Boltzmann). En effet, la température minimale d'observation d'un état quantique macroscopique est donnée par l'expression suivante :

$$T_B = \frac{1}{K_B} \frac{2\pi\hbar^2}{m} \left[\frac{\rho_{eq}}{2S+1} \frac{1}{\Gamma(\frac{3}{2})\zeta(\frac{3}{2})} \right]^{\frac{2}{3}} \quad \text{où } \rho_{eq} \text{ est la densité des particules,}$$

$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \approx 2.612$ sont respectivement les fonctions Γ d'Euler et ζ de Riemann, $\hbar$ la constante de Planck réduite et m la masse d'une particule du système.

Il a été difficile d'atteindre ces températures expérimentalement, qui sont généralement de l'ordre du nano kelvin. Il a ainsi fallu attendre les travaux de Cohentannoudji, Chu et Philips sur le refroidissement d'atomes par technique laser, puis les expériences de Cornell, Wieman et enfin de Ketterle en 1995 afin d'observer pour la première fois un Condensat Bose-Einstein dans un gaz constitué d'atomes de rubidium, piégé par des méthodes optiques.

IV. Exemple de gaz de fermions ; électron de conduction dans un métal ; température de Fermi

1. Electron de conduction dans un métal

Il existe différents modèles de conduction des électrons dans un métal parmi lesquels on distingue :

a. Premier modèle : Théorie classique des métaux (Drude-Lorentz)

Le modèle de Drude (du nom du physicien Paul Drude), parfois appelé **modèle de l'électron amorti**, est une adaptation effectuée en 1900 de la théorie cinétique des gaz aux électrons des métaux (découverts 3 ans plus tôt, en 1897 par J.J. Thomson). En considérant les électrons d'un métal comme des particules classiques ponctuelles confinées à l'intérieur du volume défini par l'ensemble des atomes de l'échantillon, on obtient un gaz qui est entraîné dans un mouvement d'ensemble (lequel se superpose aux mouvements individuels des particules) par des champs électriques (force électrique : $F = eE$) et magnétiques (force magnétique : $F = ev\wedge B$) et freiné dans ce mouvement par

des collisions. Les collisions envisagées par Drude sont les collisions sur les cœurs d'atomes. Bien que se basant sur des hypothèses démenties depuis (description purement classique du mouvement des électrons), il permet de rendre compte de plusieurs propriétés des métaux comme la conductivité électrique, la conductivité thermique et l'effet Hall.

Il n'y a pas d'interactions électron-électron : c'est l'approximation des électrons indépendants.

Il n'y a pas d'interactions électron-ion : c'est l'approximation des électrons libres.

Par conséquent, chaque électron a une accélération dans la direction du champ:

$$a = \frac{F}{m} = \frac{eE}{m}$$

De plus, le métal contient des impuretés. Chaque électron rentre en collision avec une impureté en moyenne après une durée τ (temps de libre parcours). Après chaque collision, l'électron est diffusé dans une direction aléatoire. Donc, entre deux collisions, sa vitesse instantanée $v = at$ atteint la valeur

$$v_{max} = \frac{eE\tau}{m}$$

La vitesse moyenne de l'électron est $\langle v \rangle = \frac{eE\tau}{m}$

Si n est la densité volumique d'électrons, la densité de courant est donc :

$$j = ne \langle v \rangle = \frac{ne^2 E \tau}{m}$$

☐ Conductivité

Par définition de la conductivité σ : $j = \sigma E$

Alors le modèle de Drude donne : $\sigma = \frac{ne^2 \tau}{m}$: conductibilité

☐ Conductibilité de la chaleur

D'après la théorie cinétique des gaz, le flux de chaleur à travers une surface est (bilan énergie vers droite et gauche): $Q = -K \frac{dT}{dx}$ avec $K = \frac{1}{2} n v K L$

(n : densité ; v : vitesse ; L : libre parcours moyen)

Dépend de L comme σ . Ainsi :

$$\frac{\sigma T}{K} = \frac{2e^2 T}{m K v^2} \frac{2e^2}{3 K^2} \text{ ne dépend plus du matériaux } (\frac{1}{2} m v^2 = \frac{3}{2} K T)$$

Donc :

$$\frac{K}{\sigma T} \approx 1,2 \times 10^{-8} W \Omega K^{-2}$$

Montre la relation de Wiedeman-Franz (1853), sur la proportionnalité.

b. Deuxième modèle : Modèle quantique de Sommerfeld (1928)

Dans le modèle de Sommerfeld, les électrons de conduction sont traités dans le cadre de la théorie quantique mais considérés comme des électrons libres :

$$H\psi = \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_2} \psi = E\psi \text{ (équation de Schrödinger)}$$

Ces électrons sont traités par la distribution de Fermi-Dirac :

$$f(E_i) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_i - \mu}{K_B T}\right)} \text{ avec } \mu : \text{ le potentiel chimique ; } T : \text{ la température ;}$$

K_B : Constante de Boltzmann

☐ Conditions aux limites :

Conditions aux limites périodiques : $\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + N_j \vec{a}_j)$ avec $j=1,2,3$; N_j : nombre de cellules élémentaires dans la direction j et $N = N_1 N_2 N_3$

☐ Capacité calorifique électronique

$$\text{Elle est donnée par la relation : } C_l = \frac{\pi^2}{2} n K_B \frac{K_B T}{K_F} = \frac{\pi^2}{2} n K_B \frac{T}{T_F}$$

☐ Conductivité thermique. Loi de Wiedemann-Franz.

Ainsi pour une démonstration analogue en a), on aura :

$$\frac{K}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{K_B}{e} \right)^2 = 2,44 \times 10^{-8} \text{ W}\Omega\text{K}^{-2}$$

☐ Corrections par rapport au modèle de Drude :

- $C_l \propto T$
- C_l : réduction du facteur $\frac{T}{T_F} \sim 10^{-2}$
- $v_F \sim 10 v_{Therm}$ d'où une correction de 10^2

Ces deux erreurs expliquent le succès apparent du modèle de Drude concernant la loi de Wiedemann-Franz.

Conclusion :

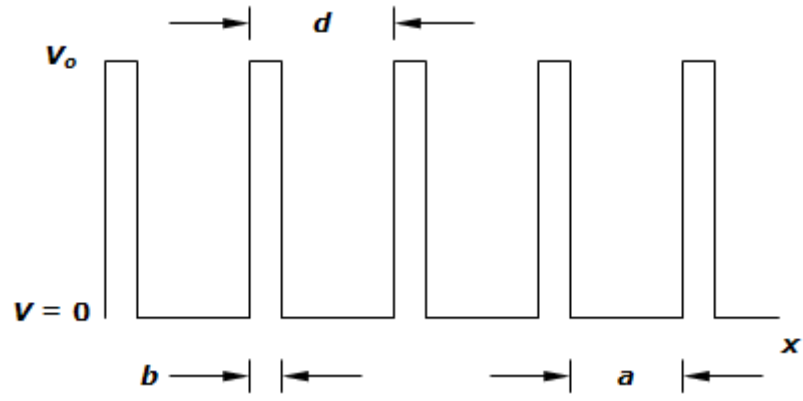
Le modèle de Sommerfeld explique certaines propriétés des métaux.

Mais il n'explique pas la distinction "Métaux, Isolants, Semi-conducteurs" ni le signe de la constante de Hall de certains métaux.

c. Troisième modèle plus élaboré : Modèle quantique d'électrons dans un potentiel périodique de Kronig-Penney :

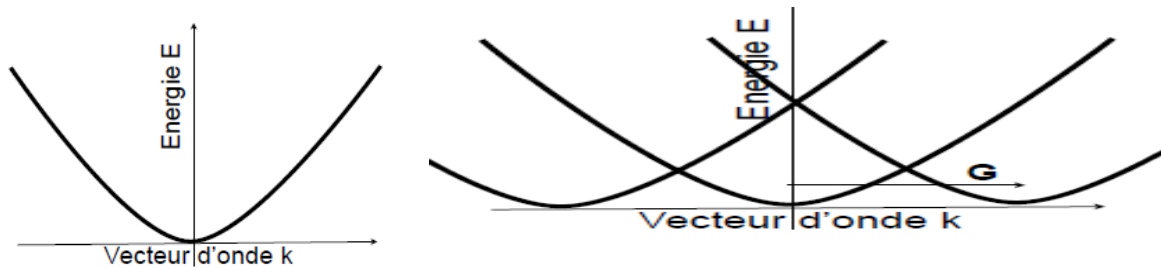
Le modèle de Kronig-Penney, développé par Ralph Kronig et William Penney en 1931, est un modèle simple, idéalisé d'un système de mécanique quantique constitué d'une infinité de puits quantiques, tous de la même taille a , séparés

par des barrières de potentiel rectangulaires de largeur b et de hauteur V_0 , chaque « cellule » (puits+une barrière) ayant une longueur d ($d=a+b$).



La solution générale de l'équation de Schrödinger pour ce type de problème, avec un potentiel fini et constant est : $\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}$ avec k , vecteur d'onde de l'électron et E son énergie vérifiant $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$ et C_1, C_2 des constantes.

Après résolution du système en prenant en compte les conditions aux limites, on aura :



2. Température de Fermi

A $T = 0K$, la fonction $f(E_F) = 1$ pour $E_F < \mu$. Toutes les orbitales sont occupées. Le niveau de Fermi est donné par $\mu = E_F$.

On appelle température de Fermi $T_F = \frac{E_F}{K_B}$. C'est la température en-dessous (ou autour) de laquelle les effets quantiques sont significatifs.

E_F : énergie de fermie et $K_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$ constante de Boltzmann.

V. Conclusion :

Jusqu'à aujourd'hui, toutes les expériences avec des particules quantiques sont compatibles avec la notion voulant que : les particules quantiques sont indiscernables, n'interagissent pas (particules indépendantes) comme dans le cas du condensat de Bose-Einstein dont son observation se fait à températures minimales. Leur état est, soit symétrique, soit antisymétrique, lors d'un échange de particules.

De plus, les particules classiques sont discernables et elles n'interagissent pas. Aucune contrainte sur le nombre de particules par état.

Merci pour votre aimable attention !!!