

Chapitre 13

Le gaz parfait de fermions

Nous avons vu dans le chapitre précédent que le gaz parfait de fermions avait, à température nulle, une pression non nulle (et donc une énergie non nulle puisque $E = (3/2)pV$, voir l'exercice de la page précédente). Nous allons expliquer ici d'où vient cette propriété étonnante. Le gaz parfait de fermions à basse température présente un grand intérêt car ce modèle décrit de manière très satisfaisante la **physique des électrons de conduction dans un métal**¹, ainsi que d'autres situations plus exotiques comme les étoiles à neutron ou l'hélium-3 liquide.

13.1 Le taux d'occupation d'un état quantique

On a vu, équation (12.19), que le taux moyen d'occupation d'un état quantique θ dans la statistique de Fermi-Dirac était donné par

$$\bar{n}_\theta^{\text{FD}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\theta - \mu)} + 1}, \quad (13.1)$$

où ϵ_θ est l'énergie d'un fermion dans ce mode. On voit immédiatement que

$$0 \leq \bar{n}_\theta^{\text{FD}} \leq 1, \quad (13.2)$$

ce qui est heureux puisqu'il ne peut y avoir que zéro ou un fermion dans un état quantique donné.

L'allure du taux d'occupation est représenté sur la figure 13.1. Pour $\epsilon_\theta = \mu$, le taux d'occupation moyen vaut $1/2$. Il est caractérisé par deux échelles d'énergie, μ et $k_B T$; pour $\epsilon_\theta > \mu$, le taux d'occupation tend exponentiellement vers zéro et est presque nul dès que ϵ_θ vaut μ plus quelques $k_B T$. Pour $\epsilon_\theta < \mu$, le taux d'occupation tend exponentiellement vers un et est presque égal à un dès que ϵ_θ vaut μ moins quelques $k_B T$.

Le taux d'occupation passe donc de un à zéro en quelques $k_B T$. Dans la limite basse température, définie par $k_B T \ll \mu$, le taux d'occupation ressemble à une marche d'escalier et, pour $T = 0$, on obtient

$$\bar{n}_\theta^{\text{FD}} = \begin{cases} 1 & \text{pour } \epsilon_\theta < \mu, \\ 0 & \text{pour } \epsilon_\theta > \mu. \end{cases} \quad (13.3)$$

(Voir le graphe de droite sur la figure 13.1. Analytiquement, $\beta = +\infty$ et $e^{\beta(\epsilon_\theta - \mu)}$ vaut $+\infty$ si $\epsilon_\theta > \mu$ et 0 si $\epsilon_\theta < \mu$.) L'expression (13.3), particulièrement simple, permet de tout calculer à $T = 0$.

1. De manière peut-être surprenante, il est valide de considérer au premier ordre que les électrons n'interagissent ni entre eux, ni avec les atomes du réseau. En fait, toutes les interactions électromagnétiques sont écrantées.

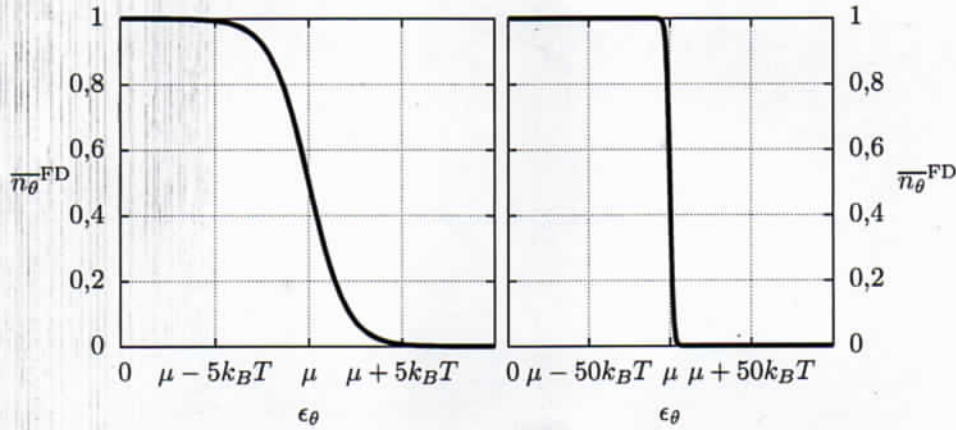


FIGURE 13.1 – Taux d'occupation d'un état quantique en fonction de son énergie. La figure de gauche est pour $\mu = 10k_B T$, alors que la figure de droite est pour $\mu = 100k_B T$.

13.2 Le gaz parfait de fermions à température nulle

Reprenons l'expression (12.18) de N , et passons de la somme à l'intégrale :

$$N = \sum_{\theta} \bar{n}_{\theta}^{\text{FD}} = \frac{4\pi\omega V}{h^3} \int_0^{\infty} p^2 dp \bar{n}_{\theta}^{\text{FD}}. \quad (13.4)$$

Dans cette intégrale, à température nulle, $\bar{n}_{\theta}^{\text{FD}}$ vaut 0 dès que p est trop grand. Plus précisément :

$$\bar{n}_{\theta}^{\text{FD}} = \begin{cases} 1 & \text{pour } p < p_F, \\ 0 & \text{pour } p > p_F, \end{cases} \quad \text{avec } \frac{p_F^2}{2m} = \mu. \quad (13.5)$$

On a alors

$$N = \frac{4\pi\omega V}{h^3} \int_0^{p_F} p^2 dp = \omega \frac{V}{h^3} \frac{4}{3} \pi p_F^3. \quad (13.6)$$

Avant de passer à l'énergie, attardons-nous sur la signification de (13.6).

À $T = 0$, le système cherche à minimiser son énergie, sachant qu'on ne peut mettre qu'une particule par état quantique. L'énergie minimale d'un état quantique est atteinte pour $\mathbf{p} = 0$, mais on ne peut avoir que ω particules ayant cette impulsion (une pour chacune des ω valeurs possibles du spin. Rappelons que $\omega = 2$ pour des électrons). Après avoir rempli tous les états avec $\mathbf{p} = 0$, le système est contraint de mettre des particules dans des états plus énergétiques. Seront remplis en priorité les états de plus basse énergie où il y a encore de la place, puis des états encore un peu plus énergétiques, etc., jusqu'à ce que toutes les particules soient casées. **On voit donc que, même à température nulle, les particules d'un gaz de fermions ont une impulsion et une énergie non nulles.** Ceci explique, en particulier, que la pression ne s'annule pas à température nulle.

La manière la plus efficace (celle de plus basse énergie) de ranger les N fermions du système est de remplir tous les états quantiques dont l'impulsion a une norme inférieure à un certain p_F , et de laisser vide tous les autres états quantiques. Dans l'espace des impulsions sont donc occupés les états contenus dans la sphère de rayon p_F , c'est la **sphère de Fermi**. Le volume de cette sphère est $(4/3)\pi p_F^3$, le nombre de vecteurs d'onde autorisés dans cette sphère est V/h^3 fois ce volume, et pour chaque vecteur d'onde autorisé il y a ω états quantiques. Le nombre total d'états quantiques dans la sphère de Fermi doit être égal au nombre de fermions, et donc

$$\frac{4}{3}\pi p_F^3 \times \frac{V}{h^3} \times \omega = N, \quad (13.7)$$

ce qui est la même chose que (13.6).

On est donc amené à définir plusieurs quantités :

- **L'impulsion de Fermi** p_F , qui est le rayon de la sphère de Fermi et donc la norme maximale de l'impulsion d'un fermion quand le système est à température nulle. À partir de (13.7), on trouve

$$p_F = \left[\frac{3h^3}{4\pi\varpi} \frac{N}{V} \right]^{1/3} \quad (13.8)$$

- **L'énergie de Fermi** ϵ_F , qui est l'énergie maximale d'un fermion quand le système est à température nulle. On a

$$\epsilon_F = \frac{p_F^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left[\frac{3h^3}{4\pi\varpi} \frac{N}{V} \right]^{2/3} \quad (13.9)$$

- **La température de Fermi**, qui est la température caractéristique reliée à l'énergie de Fermi :

$$k_B T_F = \epsilon_F. \quad (13.10)$$

Les quantités p_F , ϵ_F et T_F ont une signification physique directe quand le système est à température nulle, mais on les définit à toute température par les relations (13.8), (13.9) et (13.10). (Autrement dit, on définit ϵ_F comme l'énergie maximale qu'aurait un fermion dans le système si la température était nulle.)

Quand le système est vraiment à température nulle, alors, en comparant (13.5) et (13.9),

$$\mu = \epsilon_F \quad (\text{à température nulle}). \quad (13.11)$$

La température de Fermi définit l'échelle de température sur laquelle les effets de la statistique quantique se manifestent. En effet, considérons un système avec $\mu \gg k_B T$. Tous les états quantiques avec $\epsilon_\theta < \mu - 5k_B T$ sont à peu près remplis (voir la figure 13.1), tous les états quantiques avec $\epsilon_\theta > \mu + 5k_B T$ sont à peu près vides, et les états quantiques pour les énergies intermédiaires sont partiellement remplis. *Mais ces états d'énergies intermédiaires sont minoritaires, puisqu'il correspondent à une « couche » d'épaisseur $10 k_B T$, toute petite comparée à μ .* Le système ressemble donc énormément au système à température nulle, avec quelques fluctuations juste à la surface de la sphère de Fermi. En particulier, on doit avoir $\mu \approx \epsilon_F = k_B T_F$, et la condition $k_B T \ll \mu$ revient à $T \ll T_F$.

On retiendra donc que si $T \ll T_F$, on peut considérer en première approximation que le système est à température nulle

Il est temps de calculer un ordre de grandeur pour le système physique qui nous intéresse, à savoir les électrons de conduction dans un métal. L'ordre de grandeur du nombre d'électrons dans un métal est de 10^{29} électrons par mètre cube. (Typiquement, il y a un électron de conduction par atome, quelques angströms entre deux atomes et donc un peu moins de 10^{30} atomes par mètre cube.) En reportant $N/V = 10^{29} \text{ m}^{-3}$ et $\varpi = 2$ dans l'équation (13.8), on trouve $p_F \approx 1,4 \cdot 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1}$. Avec $m \approx 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ dans (13.9), on obtient $\epsilon_F \approx 1,25 \cdot 10^{-18} \text{ J}$ et, enfin, on arrive avec (13.10) à $T_F \approx 9 \cdot 10^4 \text{ K}$.

À toute température où le métal est solide, on a bien, et largement, $T \ll T_F$. **C'est donc une très bonne approximation de supposer $T = 0$ pour le gaz d'électrons dans le métal.**

Écrivons maintenant l'énergie du gaz de fermions à température nulle. On a

$$E = \frac{\varpi V}{h^3} \int_0^{p_F} 4\pi p^2 dp \frac{p^2}{2m}. \quad (13.12)$$

On peut comprendre (13.12) en écrivant que E est la somme sur tous les états quantiques de $\epsilon_F \overline{n_F}^{\text{FD}}$, avec les taux d'occupations donnés par (13.3). On peut aussi lire directement l'équation : il y a $V/h^3 \times 4\pi p^2 dp$ vecteurs impulsion autorisés dont la norme est entre p et $p + dp$, et donc ϖ fois ce nombre d'états quantiques. Chacun de ces états quantiques a une énergie $p^2/(2m)$, et ils sont tous pleins si $p < p_F$ et tous vides sinon.

L'intégrale de p^4 est $p_F^5/5$, et donc

$$E = \frac{\varpi V}{h^3} \frac{4}{5} \pi p_F^3 \times \frac{p_F^2}{2m}. \quad (13.13)$$

Le deuxième terme est $\epsilon_F = k_B T_F$, et le premier terme est $3/5$ fois N , voir l'équation (13.6). On a donc, à température nulle,

$$E = \frac{3}{5} N k_B T_F. \quad (13.14)$$

Comme expliqué plus haut, le principe d'exclusion de Pauli fait que le gaz de fermions a une énergie cinétique non nulle même à température nulle. Pour les électrons dans un métal, on sait que $T_F \gg T$ et l'expression (13.14) donne une énergie bien plus élevée que le classique $E = (3/2) N k_B T$. On voit donc qu'on ne peut plus définir la température par l'énergie cinétique des particules, comme dans l'équation (1.3)!

La pression peut s'obtenir par la relation $E = (3/2) pV$, voir l'exercice du chapitre précédent.

13.3 Corrections à température non nulle

On vient de voir que l'énergie du système de fermions était importante, même à température nulle. Ça ne veut néanmoins pas dire que la chaleur spécifique est elle aussi importante!

Considérons une température non nulle, mais toujours telle que $T \ll T_F$. L'énergie d'excitation thermique disponible par particule est, comme d'habitude, d'ordre $k_B T$, mais *très peu de fermions peuvent en profiter!* En effet, les particules occupant un niveau de faible énergie, loin du niveau de Fermi ϵ_F , ne peuvent pas être thermiquement excités puisqu'il n'y a aucun état quantique libre ayant une énergie accessible avec l'apport thermique d'ordre $k_B T$. **Seuls les fermions proches du niveau de Fermi peuvent être excités et participent aux propriétés thermiques du matériau.**

Faisons un calcul d'ordre de grandeur. Seuls les fermions dont l'énergie est comprise entre $\epsilon_F - \alpha k_B T$ (avec α d'ordre 1) et ϵ_F peuvent profiter des excitations thermiques et être excités; cela correspond aux fermions très proches du niveau de Fermi, et on se convainc facilement² que cela correspond à une fraction de l'ordre de T/T_F du nombre total de particules. Chacun de ces fermions reçoit alors une énergie d'excitation d'ordre $k_B T$, et la nouvelle énergie du système ressemble alors à

$$E(T) = E(0) + AN \frac{T}{T_F} k_B T + \dots, \quad (13.15)$$

où $E(0)$ est l'énergie à température nulle donnée par (13.14), A est un nombre d'ordre 1 et les points de suspensions sont là pour rappeler l'existence de termes correctifs d'ordre supérieur.

On en déduit, en dérivant, la capacité calorifique

$$C = 2AN k_B \frac{T}{T_F} + \dots, \quad (13.16)$$

qui tend gentiment vers zéro à température nulle.

2. On peut faire le calcul si on veut, mais c'est un nombre sans dimension qui est clairement proportionnel à T . La seule échelle de température à mettre au dénominateur est alors T_F .

En travaillant un peu à partir des équations (12.29), on peut faire le développement limité exact de toutes les quantités thermodynamiques (c'est le développement de Sommerfeld), et on trouve, « after some algebra »,

$$C = Nk_B \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F} + \dots \quad (13.17)$$

On peut comparer cette chaleur spécifique en T/T_F à la chaleur spécifique due aux vibrations du réseau cristallin dans un métal. À haute température³, pour $T \gg T_D$, on a

$$c_{\text{électrons}} \approx k_B \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F}, \quad c_{\text{vibrations}} \approx 3k_B. \quad (13.18)$$

Théoriquement, ces deux contributions commencent à être comparables pour T d'ordre T_F , mais à cette température, le solide est depuis longtemps fondu et notre théorie des vibrations du cristal devient complètement fautive ! Aux températures comparables ou grandes devant T_D pour lesquelles le système est solide, on a bien $c_{\text{électrons}} \ll c_{\text{vibrations}}$.

À basse température, pour $T \ll T_D$, on a, voir équation (11.33),

$$c_{\text{électrons}} \approx k_B \frac{\pi^2}{2} \frac{T}{T_F}, \quad c_{\text{vibrations}} \approx k_B \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{T}{T_D} \right)^3. \quad (13.19)$$

Ces deux contributions sont égales si

$$T \approx T_D \sqrt{\frac{5}{24\pi^2} \frac{T_D}{T_F}}. \quad (13.20)$$

Ce nombre est très petit devant T_D , puisque $T_D \ll T_F$. Pour des valeurs typiques $T_D = 250$ K et $T_F = 10^5$ K, on trouve que la température pour laquelle $c_{\text{électrons}} = c_{\text{vibrations}}$ est de l'ordre de 2 K. Il faut donc descendre à des températures très basses, de l'ordre du kelvin, pour que la chaleur spécifique des électrons de conduction du métal ne soit pas négligeable devant la chaleur spécifique due aux vibrations.

13.4 Conclusion

Les électrons de conduction dans un solide peuvent être vus par un gaz parfait de fermions à température quasi-nulle. Ce problème se traite facilement en considérant la **sphère de Fermi** et donne des résultats satisfaisants. Ce modèle fonctionne parce que la charge des électrons est très bien écrantée par le réseau cristallin, ce qui permet de négliger les interactions entre particules. Cependant, on peut aller plus loin et supposer que le gaz d'électrons évolue dans un potentiel non nul, attractif là où sont les atomes du réseau (ils sont chargés positivement) et donc périodique. Cette étude conduit à deux résultats :

- Tout d'abord, le modèle que nous avons développé dans ce chapitre est essentiellement correct au premier ordre, mais il faut peut-être, pour obtenir un bon accord numérique, changer de quelques dizaines de pourcent la masse de l'électron dans les formules finales.
- Le second résultat est important : il existe des bandes de conduction, c'est-à-dire des niveaux d'énergie où peuvent se trouver les électrons, et des bandes interdites, c'est à dire des valeurs de l'énergie où il ne peut y avoir aucun électron. Comprendre ces bandes autorisées et interdites permet d'expliquer pourquoi certains matériaux sont isolants, conducteurs, ou semi-conducteurs.

Mais, avant de vous lancer dans les calculs compliqués qui mènent aux résultats que l'on vient d'énoncer, assurez-vous d'avoir bien compris la sphère de Fermi...

3. Haute température pour le cristal. Les électrons sont toujours dans la limite basse température.