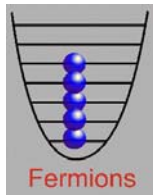
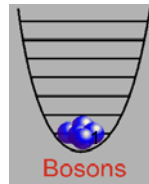


Les gaz parfaits quantiques



Gilles Montambaux

27 avril 2020



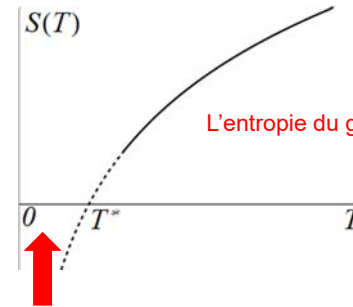
3) Problème à basse température

Rappel de l'amphi 4

$$\frac{S(T)}{k} = N \left(\ln \frac{V}{N\lambda_T^3} + \frac{5}{2} \right)$$

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}$$

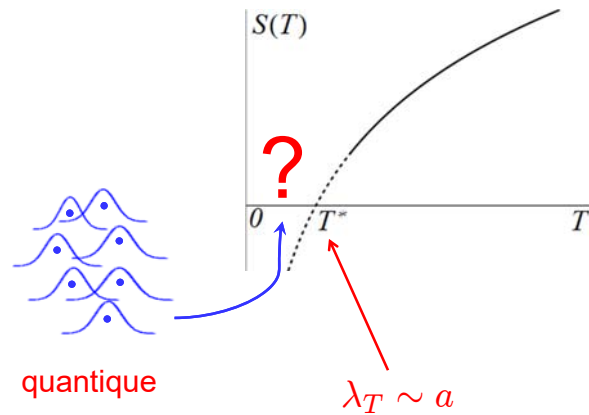
Entropie du gaz parfait classique



L'entropie du gaz classique devient négative à basse température !

On a un problème ! si $\lambda_T > a = \left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}$ → Mécanique quantique

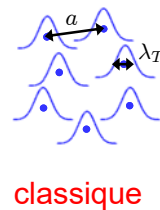
Le gaz parfait à plus basse température...



$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}$$

quantique

$$kT^* \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}$$



classique

Physique statistique

Mécanique quantique

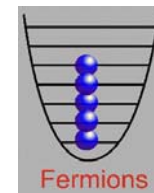
Monde macroscopique

Décrire le comportement macroscopique d'un grand nombre de constituants microscopiques $N \sim 10^{23}$

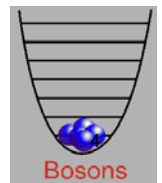
Et si ces constituants sont indiscernables?

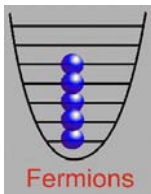
Fermions

Bosons



rôle essentiel sur la thermodynamique





Pourquoi y a-t-il des métaux, des isolants, des semi-conducteurs ?

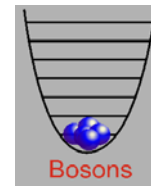


Propriétés magnétiques :

Exemple : la spintronique

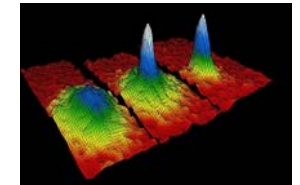
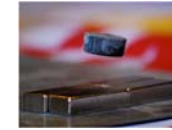


Physique stellaire :
naines blanches, étoiles à neutrons



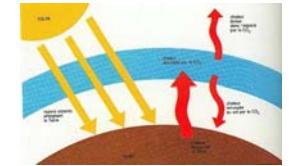
Atomes froids, condensation de Bose

Suprafluidité, supraconductivité



Physique du rayonnement :

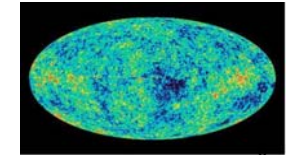
rayonnement solaire, effet de serre



rayonnement cosmologique 3K



lasers



Physique statistique

Pour un système isolé à l'équilibre,
tous les microétats accessibles sont équiprobables

Ensembles « canoniques »

$$S = k_B \ln W$$

Retrouver les lois de la thermodynamique classique

Comportement microscopique de systèmes connus (gaz parfait)

Systèmes simples :

Raréfaction atmosphère

Systèmes à deux niveaux

Élasticité entropique

Vibrations des solides

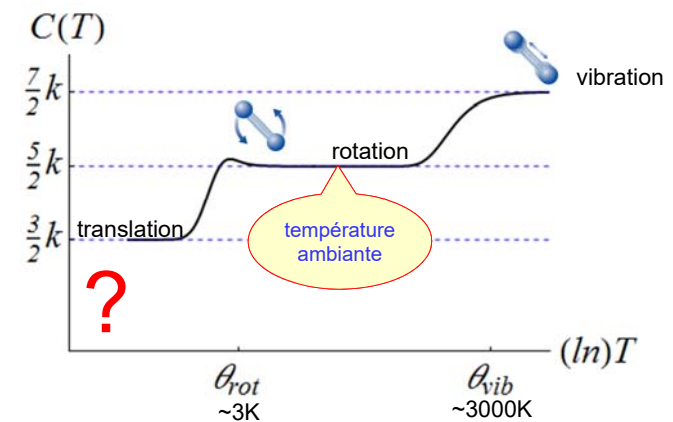
Adsorption

Capacité thermique des gaz
(gel des degrés de liberté)

Paramagnétisme

Capacité thermique d'un gaz diatomique

$$C(T) = \frac{\partial U}{\partial T}$$



$T \gg \theta_{caract.}$ → Problème classique, th. équipartition

$T \ll \theta_{caract.}$ → Problème quantique, gel des degrés de liberté

Message :

Pour savoir si un problème est classique ou quantique,
il faut comparer $k_B T$
à l'énergie caractéristique du problème.

$$kT^* \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}$$

9

Les gaz parfaits quantiques

W. Pauli



Principe d'exclusion

cf. amphi 8, PHY430, Manuel Joffre
« Particules identiques en physique quantique »

Thermodynamique d'un ensemble de
particules identiques indiscernables



Fermions

Bosons



P.A.M. Dirac
W. Heisenberg

Le postulat de symétrisation

Le postulat de symétrisation

contraint la symétrie des états quantiques des particules indiscernables

$|\psi\rangle$: fonction d'onde à N particules

Bosons particules de spin entier, photons...

$|\psi\rangle$ symétrique par l'échange de deux particules

$$P_{12}|\psi\rangle = +|\psi\rangle$$

Fermions particules de spin 1/2 entier, électrons, protons, neutrons...

$|\psi\rangle$ antisymétrique par l'échange de deux particules

$$P_{12}|\psi\rangle = -|\psi\rangle$$

11

Le postulat
de symétrisation

- * impose des conditions sur la nature des états quantiques
- * conditionne la répartition des niveaux d'énergie
- * et donc la thermodynamique

$$Z_c(\beta) = \sum_{\text{états}} e^{-\beta E}$$

12

Le postulat de symétrisation {

- * impose des conditions sur la nature des états quantiques
- * conditionne la répartition des niveaux d'énergie
- * et donc la thermodynamique

* Quand ces effets quantiques deviennent-ils importants ?

Lorsque la longueur thermique de de Broglie λ_T est de l'ordre de la distance a entre particules :

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k T}} \gtrsim a \quad \rho \lambda_T^3 \gtrsim 1$$

ou, ce qui est équivalent, si la température est de l'ordre de l'énergie cinétique typique

$$k_B T \lesssim \frac{\hbar^2}{m a^2} \quad \rightarrow \quad k_B T^* \simeq \frac{\hbar^2}{m} \rho^{2/3}$$

densité
 $\rho = \frac{N}{V} = \frac{1}{a^3}$

$$k_B T^* \simeq \frac{\hbar^2}{m} \rho^{2/3}$$

Les gaz d'atomes légers sont « plus quantiques »

Un gaz d'électrons est « plus quantique » qu'un gaz d'atomes

Le caractère quantique augmente avec la densité

Ordres de grandeur		T^*		
O_2 gaz	$\rho \sim 10^{25} m^{-3}$	$10^{-3} K$	$T > T_{liq.} \simeq 90 K$	classique
O_2 liquide	$\rho \sim 10^{28} m^{-3}$	$0.1 K$	$T > T_{sol.} \simeq 54 K$	classique
He liquide	$\rho \sim 10^{28} m^{-3}$	$1 K$	basse T	quantique 4He 3He
e^-	$\rho \sim 10^{29} m^{-3}$	$10^4 K$	T ambiante	quantique

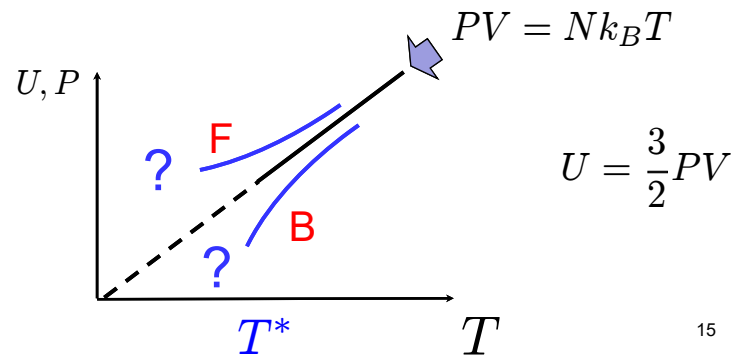
Les électrons libres d'un métal constituent un gaz de fermions « très quantique »

Quand et comment ces effets quantiques se manifestent-ils ?

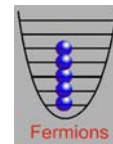
Les Fermions ont tendance à s'éviter : principe d'exclusion de Pauli

Les Bosons ont tendance à se condenser dans le même état

Comportement du gaz parfait à basse température ?

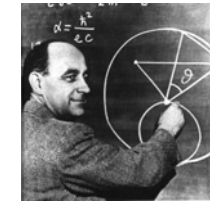


« Statistiques quantiques »



$$f_k^F = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}$$

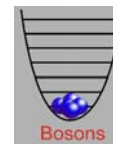
Fermi-Dirac



1926



1926

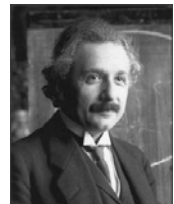


$$f_k^B = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}$$

Bose-Einstein



1924



1925

Importance de l'indiscernabilité

Postulat de symétrisation

- 1) Deux particules, deux niveaux
- 2) Deux particules, spectre quelconque
- 3) N particules

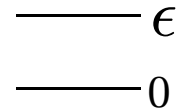
$$Z_c(\beta) = \sum_{\text{états}} e^{-\beta E}$$

17

Système à 2 niveaux, une particule

Energie moyenne $U(T)$?

cf. amphi 2, p.36



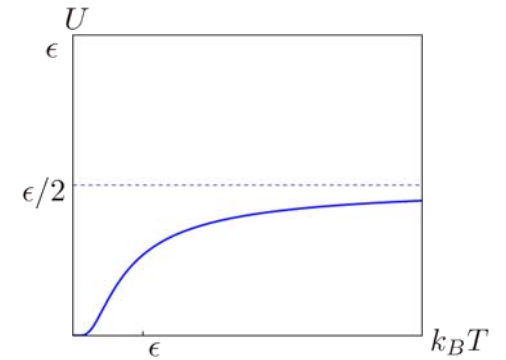
$$p_0 = \frac{1}{1 + e^{-\beta\epsilon}}$$



$$p_1 = \frac{e^{-\beta\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon}}$$



$$U_1 = \sum_i p_i \epsilon_i = \frac{\epsilon e^{-\beta\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon}}$$



Fonction de partition canonique

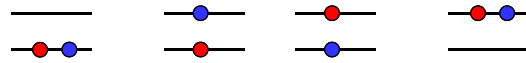
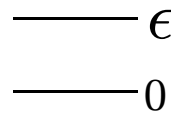
$$z_1(\beta) = 1 + e^{-\beta\epsilon}$$

$$U_1 = -\frac{\partial \ln z_1}{\partial \beta}$$

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

Système à 2 niveaux, deux particules discernables

Energie moyenne $U(T)$?



$$Z_D(\beta) = z_1(\beta)^2 \quad Z_D(\beta) = 1 + 2e^{-\beta\epsilon} + e^{-2\beta\epsilon}$$

La fonction de partition se factorise

$$\longrightarrow U_D = \frac{2\epsilon e^{-\beta\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon}} = 2U_1$$

Fonction de partition canonique

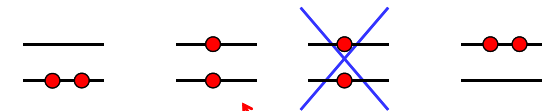
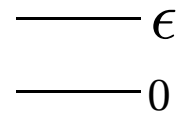
$$z_1(\beta) = 1 + e^{-\beta\epsilon}$$

$$U_1 = -\frac{\partial \ln z_1}{\partial \beta}$$

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

Système à 2 niveaux, deux bosons indiscernables

Energie moyenne $U(T)$?



$$Z_B(\beta) = 1 + 1e^{-\beta\epsilon} + e^{-2\beta\epsilon}$$

La fonction de partition ne se factorise plus

$$\longrightarrow U_B = \epsilon \frac{e^{-\beta\epsilon} + 2e^{-2\beta\epsilon}}{1 + e^{-\beta\epsilon} + e^{-2\beta\epsilon}} \neq U_D$$

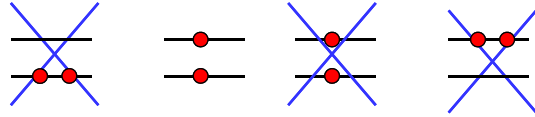
$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

20

Système à 2 niveaux, deux fermions indiscernables

Energie moyenne $U(T)$?

(sans spin)



$$Z_F(\beta) = e^{-\beta\epsilon}$$

La fonction de partition ne se factorise plus



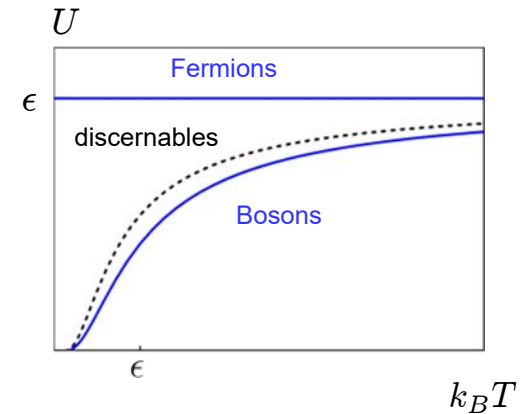
$$U_F = \epsilon \neq U_D$$

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

21

Système à 2 niveaux, deux particules (résumé)

Energie moyenne $U(T)$?



22

Spectre quelconque, deux particules discernables

Energie moyenne $U(T)$?

$$|\phi_k; \phi_l\rangle \longrightarrow E = \epsilon_k + \epsilon_l; \quad k, l = 0, 1, 2, \dots$$

La fonction de partition se factorise

$$Z_D = \sum_{\text{états}} e^{-\beta E} = \sum_{k,l} e^{-\beta(\epsilon_k + \epsilon_l)} = \left[\sum_k e^{-\beta \epsilon_k} \right]^2 = z_1(\beta)^2$$

23

Spectre quelconque, deux fermions indiscernables

Energie moyenne $U(T)$?

(sans spin)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_k; \phi_l\rangle - |\phi_l; \phi_k\rangle) \longrightarrow E = \epsilon_k + \epsilon_l$$

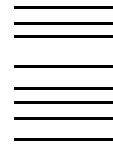
Contrainte $k < l$

La fonction de partition ne se factorise plus

$$\begin{aligned} Z_F(\beta) &= \sum_{k < l} e^{-\beta(\epsilon_k + \epsilon_l)} = \frac{1}{2} \left[\sum_k e^{-\beta \epsilon_k} \right]^2 - \frac{1}{2} \sum_k e^{-2\beta \epsilon_k} \\ &= \frac{1}{2} z_1(\beta)^2 - \frac{1}{2} z_1(2\beta) \end{aligned}$$

24

Spectre quelconque, deux bosons indiscernables



Energie moyenne $U(T)$?

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_k; \phi_l\rangle + |\phi_l; \phi_k\rangle) \rightarrow E = \epsilon_k + \epsilon_l$$

Contrainte $k \leq l$

La fonction de partition ne se factorise plus

$$\begin{aligned} Z_B(\beta) &= \sum_{k \leq l} e^{-\beta(\epsilon_k + \epsilon_l)} = \frac{1}{2} \left[\sum_k e^{-\beta\epsilon_k} \right]^2 + \frac{1}{2} \sum_k e^{-2\beta\epsilon_k} \\ &= \frac{1}{2} z_1(\beta)^2 + \frac{1}{2} z_1(2\beta) \end{aligned}$$

25



$Z_F(\beta)$, $Z_B(\beta)$

$$\sum_{k,l} = \sum_{k < l} + \sum_{k > l} + \sum_{k=l}$$

$$Z_D(\beta) = z_1(\beta)^2 = 2Z_F(\beta) + z_1(2\beta) \rightarrow Z_F(\beta)$$

$$\sum_{k < l} = \sum_{k < l} + \sum_{k=l}$$

$$Z_B(\beta) = Z_F(\beta) + z_1(2\beta) \rightarrow Z_B(\beta)$$

Les transparents précédés de proposent des calculs intermédiaires simples ou des rappels qui ne sont pas développés en cours.

26

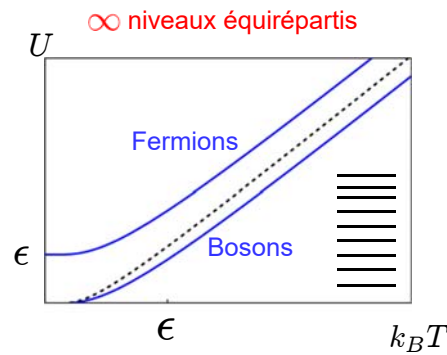
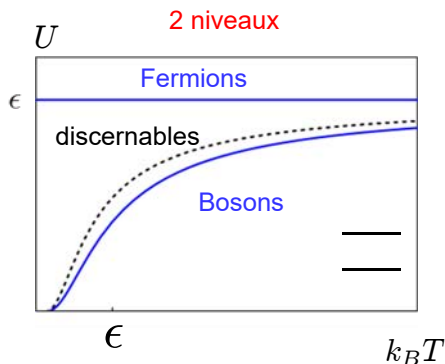
Thermodynamique de deux particules (résumé)

$$Z_D(\beta) = z_1(\beta)^2$$

$$Z_F(\beta) = \frac{1}{2} z_1(\beta)^2 - \frac{1}{2} z_1(2\beta)$$

$$Z_B(\beta) = \frac{1}{2} z_1(\beta)^2 + \frac{1}{2} z_1(2\beta)$$

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$



Thermodynamique de deux particules

$$Z_D(\beta) = z_1(\beta)^2$$

$$Z_F(\beta) = \frac{1}{2} z_1(\beta)^2 - \frac{1}{2} z_1(2\beta)$$

$$Z_B(\beta) = \frac{1}{2} z_1(\beta)^2 + \frac{1}{2} z_1(2\beta)$$

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

2 niveaux

$$0, \epsilon$$

∞ niveaux équirépartis

$$\epsilon_n = n\epsilon$$

$$z_1(\beta) = \sum_0^1 e^{-\beta n\epsilon} = 1 + e^{-\beta\epsilon}$$

$$z_1(\beta) = \sum_0^{\infty} e^{-\beta n\epsilon} = \frac{1}{1 - e^{-\beta\epsilon}}$$



Importance de l'indiscernabilité

Postulat de symétrisation

- 1) Deux particules, deux niveaux
- 2) Deux particules, spectre quelconque
- 3) N particules

(oui, à la limite classique)

$$Z_D(\beta) = z_1(\beta)^N \quad Z_I(\beta) = \frac{Z_D(\beta)}{N!} \quad ? \quad \text{NON}$$

Représentation d'un état à N particules identiques

Représentation d'un état à N particules identiques

n_k : nombre de particules dans l'état k k : états à 1 particule
c'est le « nombre d'occupation » de l'état k

Un état à N particules est caractérisé par la donnée des nombres d'occupation

$\{n_0, n_1, n_2, n_3, \dots\}$					
k	ϵ_k	n_k	k	ϵ_k	n_k
3	—	0	3	—	0
2	—●—	1	2	—●—	1
1	—	0	1	—●—	1
0	—●●—	2	0	—●—	1
$\{2, 0, 1, 0\}$			$\{1, 1, 1, 0\}$		

La séquence de ces nombres détermine l'état à N particules

$$N = \sum_k n_k \quad E = \sum_k n_k \epsilon_k$$

Représentation d'un état à N particules identiques

Exemple : 3 bosons

k	ϵ_k	n_k	k	ϵ_k	n_k
3	—	0	3	—	0
2	—●—	1	2	—●—	1
1	—	0	1	—●—	1
0	—●●—	2	0	—●—	1
$\{2, 0, 1, 0\}_B$			$\{1, 1, 1, 0\}_B$		

$$\{2, 0, 1, 0\}_B = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1:0\rangle|2:0\rangle|3:2\rangle + |1:0\rangle|2:2\rangle|3:0\rangle + |1:2\rangle|2:0\rangle|3:0\rangle)$$

↑ état
↑ particule

$$\{1, 1, 1, 0\}_B = \frac{1}{\sqrt{6}} (|1:0\rangle|2:1\rangle|3:2\rangle + |1:0\rangle|2:2\rangle|3:1\rangle + |1:1\rangle|2:0\rangle|3:2\rangle + |1:2\rangle|2:0\rangle|3:1\rangle + |1:1\rangle|2:3\rangle|3:0\rangle + |1:3\rangle|2:1\rangle|3:0\rangle)$$

Représentation d'un état à N particules identiques

Exemple : 3 fermions (sans spin)

k	ϵ_k	n_k	k	ϵ_k	n_k
3	—	0	3	—	0
2	—●—	1	2	—●—	1
1	—	0	1	—●—	1
0	—●●—	2	0	—●—	1
$\{2, 0, 1, 0\}_F$			$\{1, 1, 1, 0\}_F$		

$$\{2, 0, 1, 0\}_F = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} |1:0\rangle & |1:0\rangle & |1:2\rangle \\ |2:0\rangle & |2:0\rangle & |2:2\rangle \\ |3:0\rangle & |3:0\rangle & |3:2\rangle \end{vmatrix} = 0 !!!$$

↑ état
↑ particule

$$\{1, 1, 1, 0\}_F = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} |1:0\rangle & |1:1\rangle & |1:2\rangle \\ |2:0\rangle & |2:1\rangle & |2:2\rangle \\ |3:0\rangle & |3:1\rangle & |3:2\rangle \end{vmatrix}$$

dét. de Slater

Représentation d'un état à N particules identiques

n_k : nombre de particules dans l'état k k : états à 1 particule
c'est le « nombre d'occupation » de l'état k

Un état à N particules est caractérisé par la donnée des nombres d'occupation

$$\{n_0, n_1, n_2, n_3, \dots\}$$

Bosons

$$n_k = 0, 1, 2, \dots, \infty$$

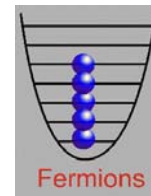
$$N = \sum_k n_k$$

Fermions

$$n_k = 0, 1$$

$$E = \sum_k n_k \epsilon_k$$

33



Thermodynamique de N particules indiscernables

Fermions

$$Z = \sum_{\{n_k=0,1\}} e^{-\beta E}$$

34

Thermodynamique de N particules indiscernables



Fermions

$$\{n_k\} \quad N = \sum_k n_k \quad E = \sum_k n_k \epsilon_k$$

Formalisme canonique ?

$$n_k = 0, 1$$

$$Z_F(\beta, N) = \sum_{\{n_k\}} e^{-\beta E} = \sum_{\{n_k=0,1\}} e^{-\beta(n_0 \epsilon_0 + n_1 \epsilon_1 + \dots)}$$

 Contrainte : $N = \sum_k n_k$  Découplage impossible

 Formalisme grand-canonique



35



Ensembles canoniques

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

Microcanonique E et N fixés $p_m = \frac{1}{W}$

$$W(E, N)$$

$$S(E, N) = k \ln W$$

$$\beta = \frac{\partial \ln W}{\partial E}$$

Canonique T et N fixés $p_m = \frac{e^{-\beta E}}{Z_c}$

$$Z_c(\beta, N) = \sum_m e^{-\beta E} = \sum_E W(E, N) e^{-\beta E}$$

$$U = \langle E \rangle = - \frac{\partial \ln Z_c}{\partial \beta}$$

Energie libre $F(T, N) = -kT \ln Z_c$

Grand canonique T et μ fixés $p_m = \frac{e^{-\beta E + \alpha N}}{Z_g}$

$$Z_g(\beta, \alpha) = \sum_{m, N} e^{-\beta E + \alpha N} = \sum_N Z_c(\beta, N) e^{\alpha N}$$

$$U = - \left. \frac{\partial \ln Z_g}{\partial \beta} \right|_{\alpha}$$

Grand potentiel $\mathcal{A}(T, \mu) = -kT \ln Z_g$

$$\langle N \rangle = \left. \frac{\partial \ln Z_g}{\partial \alpha} \right|_{\beta}$$

Bref retour sur les ensembles canoniques

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

Microcanonique : système isolé

S

E et N fixés

$$p_m = \frac{1}{W}$$

Tous les microétats accessibles sont équiprobables

$$W(E, N)$$

Nombre de microétats (configurations) d'énergie E (et de N fixé)

Entropie

$$S(E, N) = k \ln W$$

$$\beta = \frac{\partial \ln W}{\partial E}$$

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E}$$

Travailler dans l'ensemble microcanonique, c'est résoudre un problème de combinatoire : combien y a-t-il d'états possibles d'énergie donnée (et de nombre de particules donné) ?

37

Bref retour sur les ensembles canoniques

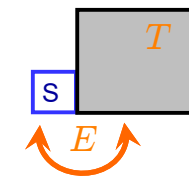
$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

Canonique : contact avec un thermostat T et N fixés

$$p_m = \frac{e^{-\beta E}}{Z_c} \quad \text{poids de Boltzmann}$$

Fonction de partition canonique

$$Z_c(\beta, N) = \sum_m e^{-\beta E_m} = \sum_E W(E, N) e^{-\beta E}$$



$$\text{Énergie libre } F(T, N) = -kT \ln Z_c$$

$$U = \langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z_c}{\partial \beta}$$

$$F = \langle E \rangle - TS$$

Intérêts de la description canonique :

- * On lève la contrainte sur l'énergie
- * Pour un ensemble de sous-systèmes, la fonction de partition se factorise

38

Bref retour sur les ensembles canoniques

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

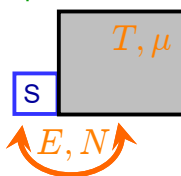
Grand canonique : contact avec un thermostat et un réservoir de particules

T et μ fixés

$$p_m = \frac{e^{-\beta E_m + \alpha N_m}}{Z_g} \quad \text{poids de Boltzmann}$$

Fonction de partition grand canonique

$$Z_g(\beta, \alpha) = \sum_{m, N} e^{-\beta E_m + \alpha N_m} = \sum_N Z_c(\beta, N) e^{\alpha N}$$



$$\text{Grand potentiel } \mathcal{A}(T, \mu) = -kT \ln Z_g$$

cf. amphi 4, p.25

$$\mathcal{A} = \langle E \rangle - TS - \mu \langle N \rangle$$

$$\langle E \rangle = -\left. \frac{\partial \ln Z_g}{\partial \beta} \right|_{\alpha}$$

$$\langle N \rangle = \left. \frac{\partial \ln Z_g}{\partial \alpha} \right|_{\beta}$$

cf. amphi 4, p.17

Intérêts de la description grand canonique

- * On lève la contrainte sur l'énergie et le nombre de particules
- * Pour un ensemble de sous-systèmes, la fonction de partition se factorise

39

Un peu plus sur le grand potentiel ...

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

À partir de la fonction de partition grand-canonique, on a introduit le grand potentiel

$$\mathcal{A}(T, \mu, V) = -kT \ln Z_g$$

$$\text{On a montré que } \mathcal{A} = \langle E \rangle - TS - \mu \langle N \rangle$$

cf. amphi 4, p.25-27

et que

$$d\mathcal{A} = -SdT - PdV - Nd\mu$$

→

$$P = -\left. \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial V} \right|_{T, \mu}$$

\mathcal{A} est extensif et ne dépend que d'une seule variable extensive, le volume
→ ils sont proportionnels

$$\mathcal{A}(T, \mu, V) = V f(T, \mu)$$

$$\rightarrow \frac{\mathcal{A}}{V} = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial V} = -P$$



$$PV = -\mathcal{A} = kT \ln Z_g$$

Équivalence ...

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

Microcanonique E et N fixés

$$W(E, N)$$

Canonique T et N fixés

$$Z_c(\beta, N)$$

$$\frac{\Delta E}{\langle E \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Grand canonique T et μ fixés

$$Z_g(\beta, \alpha)$$

$$\frac{\Delta N}{\langle N \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Équivalence
dans la limite des grands systèmes

41

Thermodynamique de N particules indiscernables

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

Fermions $\{n_k\}$ $N = \sum_k n_k$ $E = \sum_k n_k \epsilon_k$
Formalisme canonique ? $n_k = 0, 1$

$$Z_F(\beta, N) = \sum_{\{n_k\}} e^{-\beta E} = \sum_{\{n_k=0,1\}} e^{-\beta(n_0 \epsilon_0 + n_1 \epsilon_1 + \dots)}$$

⊖ Contrainte : $N = \sum_k n_k$ → Découplage impossible

→ Formalisme grand-canonique

$$Z_F(\beta, \alpha) = \sum_{\{n_k\}} e^{\alpha N - \beta E} = \sum_{\{n_k=0,1\}} e^{[n_0(\alpha - \beta \epsilon_0) + n_1(\alpha - \beta \epsilon_1) + \dots]}$$

$$Z_F(\beta, \alpha) = [1 + e^{\alpha - \beta \epsilon_0}] [1 + e^{\alpha - \beta \epsilon_1}] \dots$$

42

Thermodynamique de N particules indiscernables

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

Fermions

$$Z_F(\beta, \alpha) = \prod_k (1 + e^{\alpha - \beta \epsilon_k})$$

Grand potentiel

$$\mathcal{A}_F(\beta, \alpha) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_F = -k_B T \sum_k \ln (1 + e^{\alpha - \beta \epsilon_k})$$

Nombre (moyen) de particules

$$\langle N \rangle = \left. \frac{\partial \ln Z_F}{\partial \alpha} \right|_{\beta} = \sum_k \frac{1}{e^{\beta \epsilon_k - \alpha} + 1} = \sum_k \langle n_k \rangle$$

$$f_k^F = \langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_k - \alpha} + 1} \quad \text{Facteur d'occupation de Fermi} \\ \text{Remplissage moyen de l'état } k$$

Énergie (moyenne)

$$U = - \left. \frac{\partial \ln Z_F}{\partial \beta} \right|_{\alpha} = \sum_k \frac{\epsilon_k}{e^{\beta \epsilon_k - \alpha} + 1} = \sum_k f_k^F \epsilon_k$$

43

Facteur d'occupation de Fermi

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

$$f_k^F = \langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_k - \alpha} + 1} \quad \text{Facteur d'occupation de Fermi} \\ \text{Remplissage moyen de l'état } k$$

$$\langle N \rangle = \sum_k f_k^F$$

Nombre moyen de particules

$$U = \sum_k f_k^F \epsilon_k$$

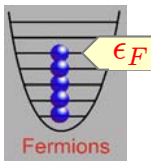
Énergie moyenne

→ On peut donc en déduire l'équation d'état d'un gaz de fermions

$$U(T, \langle N \rangle)$$

(prochain cours)

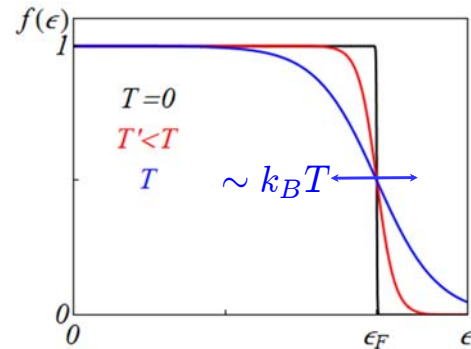
44



Facteur d'occupation de Fermi

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

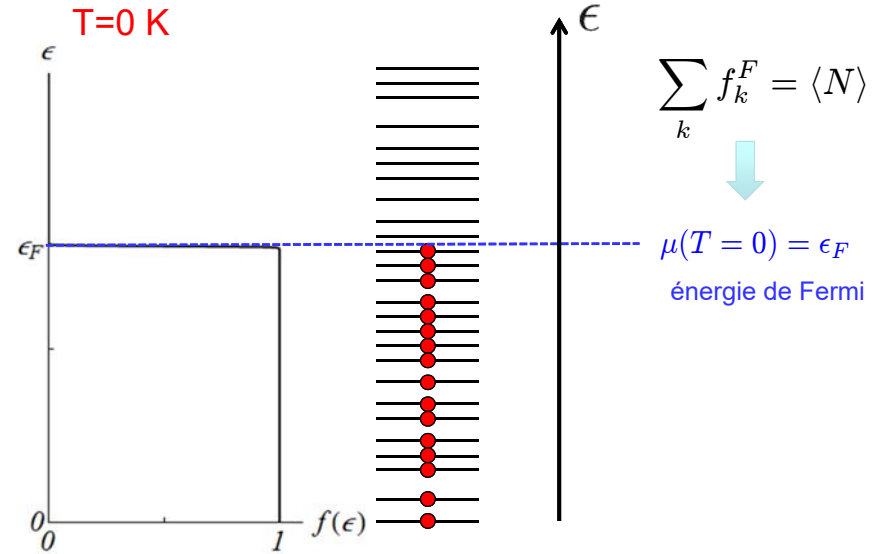
$$f_k^F = \langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}$$



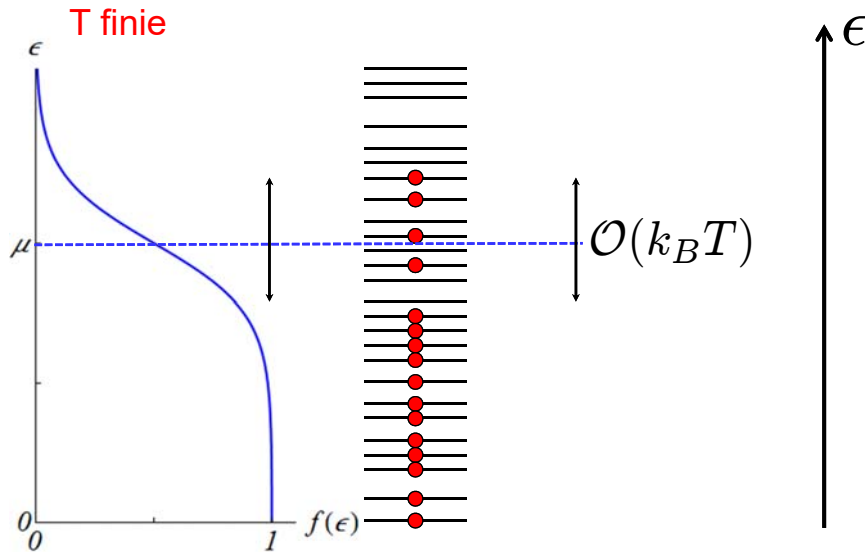
Le potentiel chimique est déterminé par la condition :

$$\sum_k f_k^F = \langle N \rangle$$

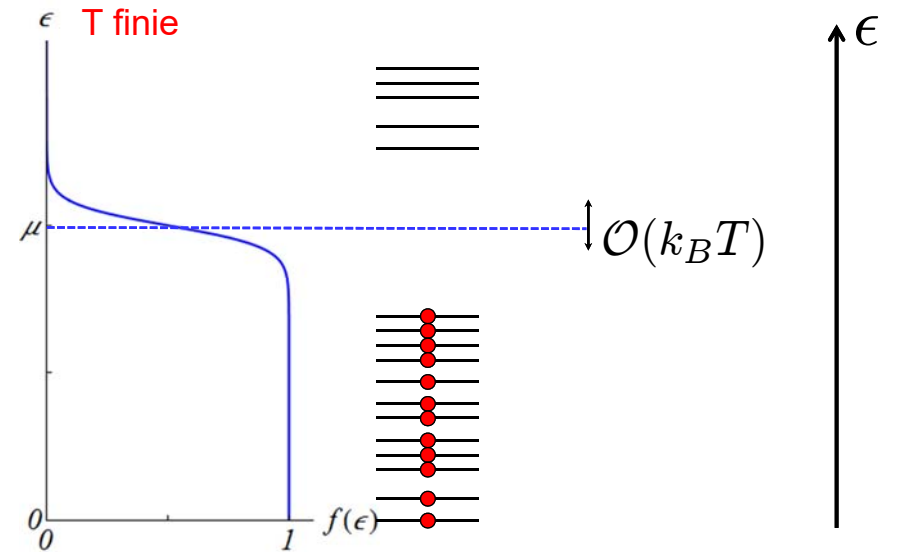
On définit le niveau de Fermi: $\epsilon_F = \mu(T = 0)$ 45



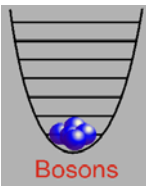
État fondamental, mais très loin du repos !!



Excitations possibles dans une tranche de largeur $k_B T$ autour du niveau de Fermi



« Gap » autour du niveau de Fermi
excitations thermiques difficiles (cf. isolants, semi-conducteurs)



Thermodynamique de N particules indiscernables

Bosons

$$Z = \sum_{\{n_k \in \mathbb{N}\}} e^{-\beta E}$$

49

Thermodynamique de N particules indiscernables

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

Bosons

$$\{n_k\} \quad N = \sum_k n_k \quad E = \sum_k n_k \epsilon_k$$

Formalisme canonique ?

$$n_k = 0, 1, 2, \dots, \infty$$

$$Z_B(\beta, N) = \sum_{\{n_k\}} e^{-\beta E} = \sum_{\{n_k \in \mathbb{N}\}} e^{-\beta(n_0 \epsilon_0 + n_1 \epsilon_1 + \dots)}$$



Contrainte : $N = \sum_k n_k$ → Découplage impossible



Formalisme grand-canonique

$$\mathcal{Z}_B(\beta, \alpha) = \sum_{\{n_k\}} e^{\alpha N - \beta E} = \sum_{\{n_k \in \mathbb{N}\}} e^{[n_0(\alpha - \beta \epsilon_0) + n_1(\alpha - \beta \epsilon_1) + \dots]}$$

$$\mathcal{Z}_B(\beta, \alpha) = \left[\frac{1}{1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_0}} \right] \left[\frac{1}{1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_1}} \right] \dots$$

50

Thermodynamique de N particules indiscernables

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

Bosons

$$\mathcal{Z}_B(\beta, \alpha) = \prod_k \frac{1}{1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_k}}$$

Grand potentiel

$$\mathcal{A}_B(\beta, \alpha) = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}_B = +k_B T \sum_k \ln(1 - e^{\alpha - \beta \epsilon_k})$$

Nombre (moyen) de particules

$$\langle N \rangle = \frac{\partial \ln \mathcal{Z}_B}{\partial \alpha} = \sum_k \frac{1}{e^{\beta \epsilon_k - \alpha} - 1} = \sum_k \langle n_k \rangle$$

$$f_k^B = \langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_k - \alpha} - 1} \quad \text{Facteur d'occupation de Bose} \\ \text{Remplissage moyen de l'état } k$$

Énergie (moyenne)

$$U = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}_B}{\partial \beta} = \sum_k \frac{\epsilon_k}{e^{\beta \epsilon_k - \alpha} - 1} = \sum_k f_k^B \epsilon_k$$

51

Facteur d'occupation de Bose

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

$$f_k^B = \langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_k - \alpha} - 1} \quad \text{Facteur d'occupation de Bose} \\ \text{Remplissage moyen de l'état } k$$

$$\langle N \rangle = \sum_k f_k^B$$

Nombre moyen de particules

$$U = \sum_k f_k^B \epsilon_k$$

Energie moyenne

→ On peut donc en déduire l'équation d'état d'un gaz de bosons

$$U(T, \langle N \rangle)$$

(prochain cours)

52

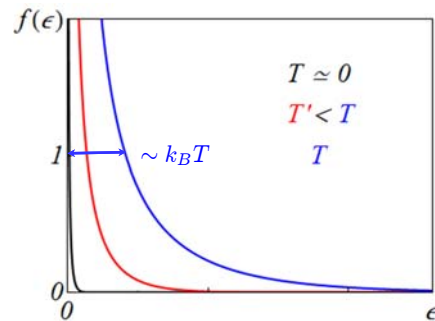
Facteur d'occupation de Bose

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

$$f_k^B = \langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}$$

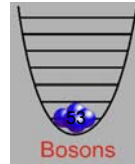
$$\mu(T) < \epsilon_k \quad \forall \epsilon_k$$

$$\mu(T) < 0 \quad \forall T$$

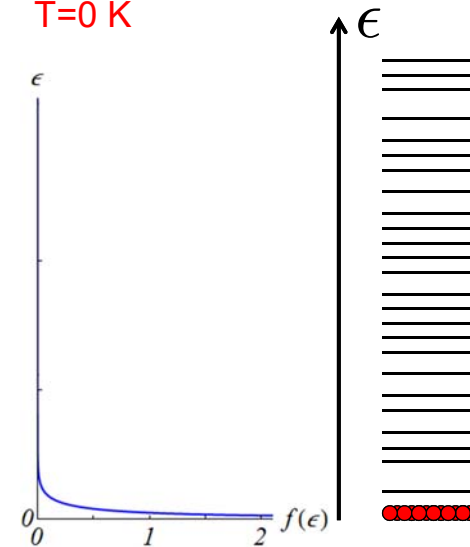


Le potentiel chimique est déterminé par la condition :

$$\sum_k f_k^B = \langle N \rangle$$



T=0 K

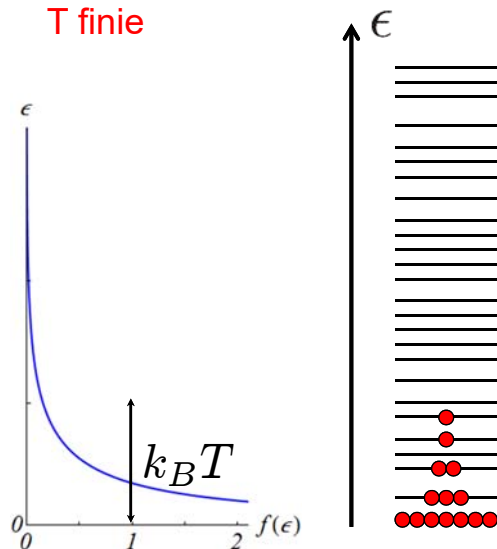


Tous les bosons sont condensés dans l'état fondamental

Nombre macroscopique de bosons dans le même état quantique
→ suprafluidité, supraconductivité

54

T finie



Physique conditionnée par les états quantiques au voisinage du fondamental

$k_B T$

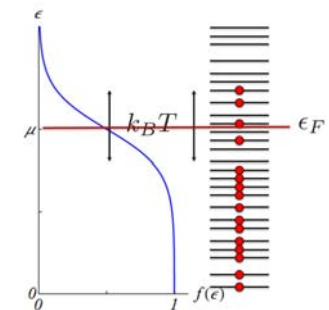
Nombre macroscopique de bosons dans le même état quantique
→ suprafluidité, supraconductivité

55

Résumé

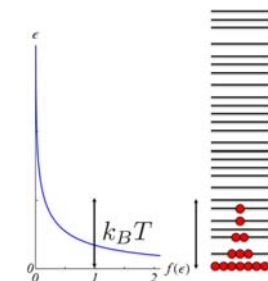
Fermions :

Les propriétés physiques dépendent de la structure du spectre au voisinage du niveau de Fermi



Bosons :

La physique est conditionnée par les états quantiques au voisinage du fondamental



56

Résumé : Statistiques quantiques

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

$$\mathcal{A}_{F,B} = -kT \ln Z_{F,B} = \mp kT \sum_k \ln(1 \pm e^{\alpha - \beta\epsilon_k})$$

Fermions
Bosons

$$f_k^F = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} \quad f_k^B = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}$$

Fermi-Dirac Bose-Einstein

En écrivant $e^{\alpha - \beta\epsilon_k}$ en fonction de f_k :

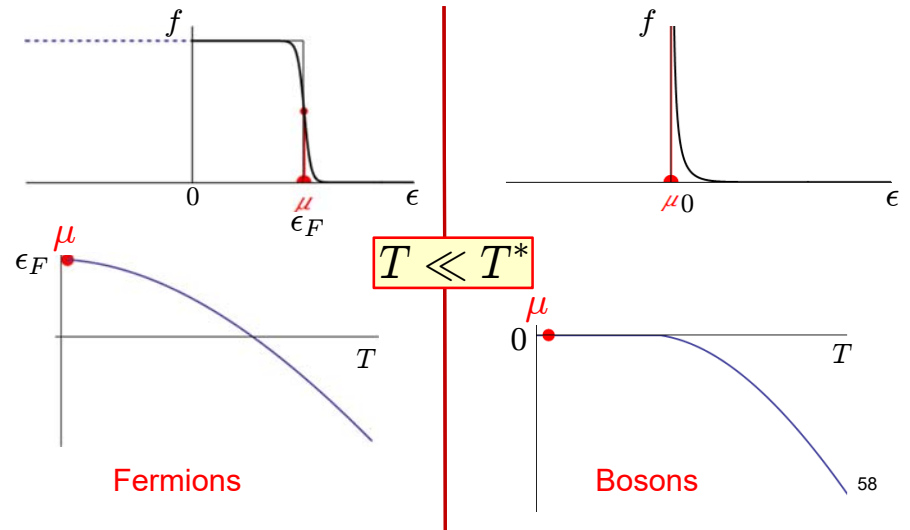
$$\text{Grand potentiel} \quad \mathcal{A}_{F,B} = \pm kT \sum_k \ln(1 \mp f_k)$$

F
B

$$\text{Pression} \quad P = -\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial V} = -\frac{\mathcal{A}}{V} \quad \text{Énergie interne} \quad U = \sum_k f_k \epsilon_k$$

Évolution en température et limite classique (particules libres 3D)

$$f_k = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} \pm 1} \quad \langle N \rangle = \sum_k f(\epsilon_k) = Cte \Rightarrow \mu(T)$$

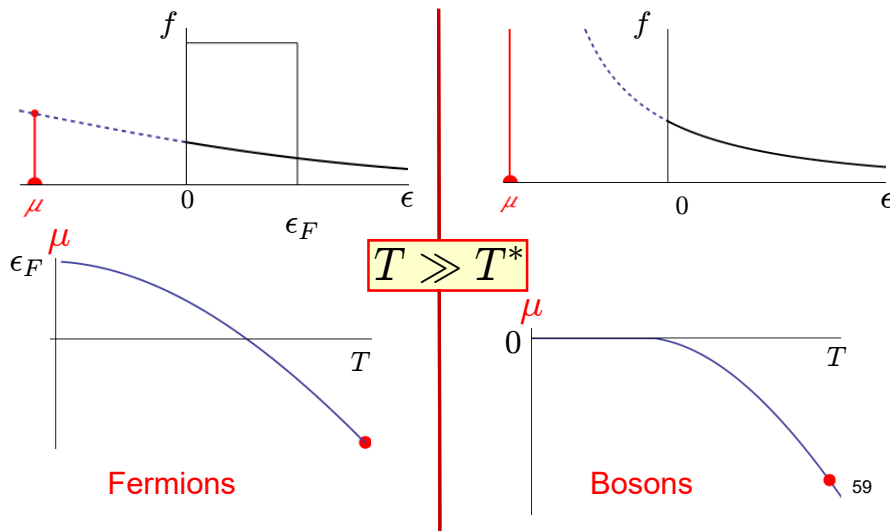


Limite classique

$$f_k \simeq e^{\beta(\mu - \epsilon_k)} \ll 1$$

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

$$f_k = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} \pm 1}$$



Limite classique

$$f_k \simeq e^{\beta(\mu - \epsilon_k)} \ll 1$$

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

$$\ln Z_{F,B}(\beta, \alpha) = \pm \sum_k \ln(1 \pm e^{\alpha - \beta\epsilon_k}) \quad T \gg T^*$$

$$\xrightarrow{\text{class.}} \sum_k e^{\alpha - \beta\epsilon_k} = e^\alpha z_1$$

$$Z_{F,B}(\beta, \alpha) \xrightarrow{\text{class.}} e^{\alpha} z_1 = \sum_N e^{\alpha N} \left(\frac{z_1^N}{N!}\right) = \sum_N e^{\alpha N} Z_c(\beta, N)$$

cf. amphi 4, p. 51

On retrouve le résultat du gaz parfait classique

$$Z_c(\beta, N) = \frac{z_1^N}{N!}$$

Dans la limite classique, la fonction de partition canonique est factorisable, car les configurations pour chaque particule sont indépendantes des configurations pour les autres particules. Ce n'est plus le cas dans la limite quantique où il est nécessaire de calculer directement Z_g .



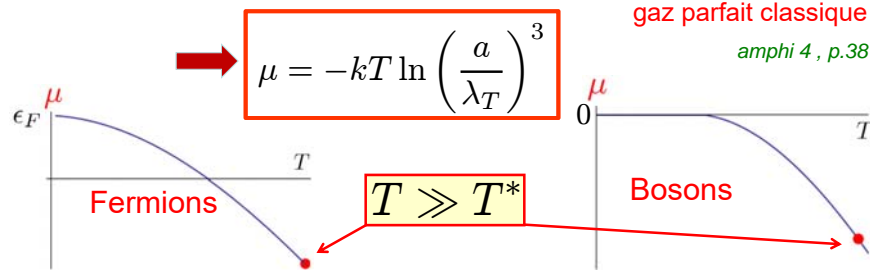
$$f_k \simeq e^{\beta(\mu - \epsilon_k)} \ll 1$$

$$\alpha = \beta\mu = \frac{\mu}{kT}$$

Potentiel chimique ?

$$\ln Z_{F,B}(\beta, \alpha) \xrightarrow{class.} e^\alpha z_1$$

$$\langle N \rangle = \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial \alpha} \right|_\beta = e^\alpha z_1 = e^{\beta\mu} z_1$$

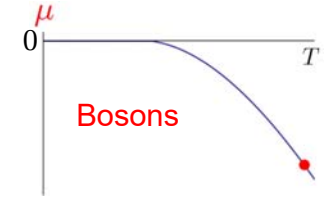
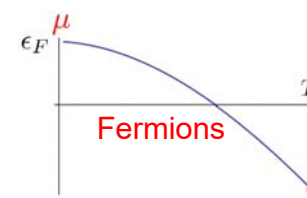


gaz parfait classique
amphi 4, p.38

Fonction de partition à une particule $z_1 = \frac{V}{\lambda_T^3} = \frac{V}{h^3} (2\pi m k T)^{3/2}$ 61

Quelques commentaires

sur le signe du potentiel chimique



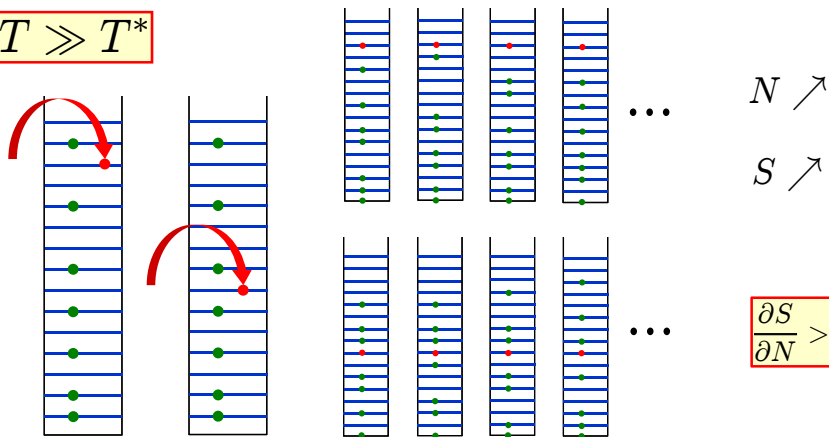
Le potentiel chimique du gaz classique est négatif

$$dU = TdS + \mu dN$$

$$\mu = -T \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{U,V}$$

Variation d'entropie en ajoutant une particule, sans changer l'énergie totale U

$$T \gg T^*$$



$$\frac{\partial S}{\partial N} > 0$$

Il y a un très grand nombre de façons de maintenir U constante, en rajoutant une particule

$$\mu < 0$$

Le potentiel chimique du gaz de fermions

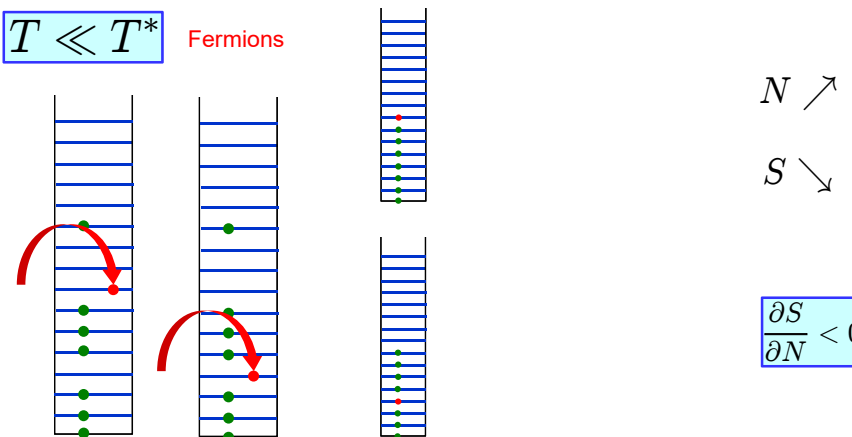
$$dU = TdS + \mu dN$$

$$\mu = -T \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{U,V}$$

Variation d'entropie en ajoutant une particule, sans changer l'énergie totale U

$$T \ll T^*$$

Fermions



$$\frac{\partial S}{\partial N} < 0$$

En rajoutant une particule à U constant, le nombre de configurations a diminué

$$\mu > 0$$

Le potentiel chimique du gaz quantique à T=0K

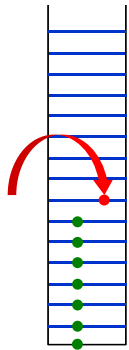
$$dU = TdS + \mu dN$$

$$\mu = \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,V}$$

Augmentation d'énergie en ajoutant une particule, sans changer l'entropie S

$$T = 0$$

Fermions



$$\mu = \epsilon_F$$

Bosons

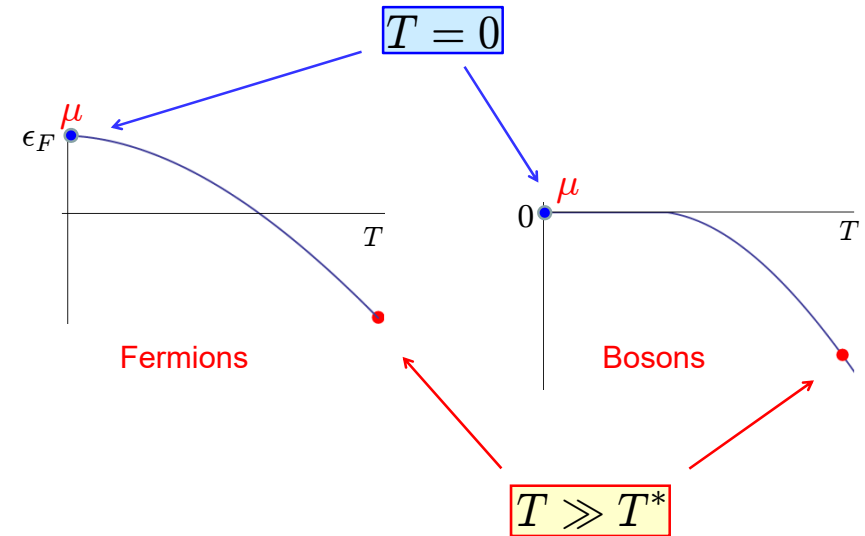


$$\mu = 0$$

À température nulle l'entropie est nulle. Ajouter une particule ne change pas l'entropie.

Le potentiel chimique est l'énergie qu'il faut pour rajouter une particule

Évolution du potentiel chimique avec la température



66

Comportement du gaz parfait à basse température ?

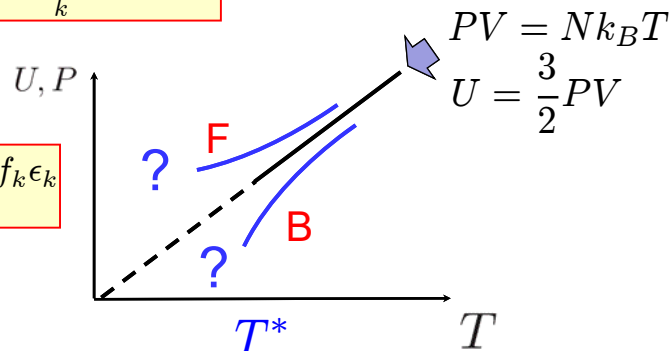
$$U(T, N) ?$$

$$PV(T, N) ?$$

$$PV = \mp kT \sum_k \ln(1 \mp f_k)$$

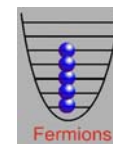
$$N = \sum_k f_k$$

$$U = \sum_k f_k \epsilon_k$$



67

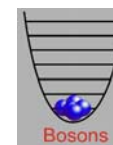
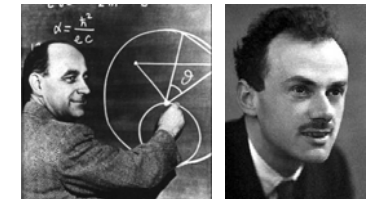
« Statistiques quantiques »



$$f_k^F = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1}$$

Fermi-Dirac

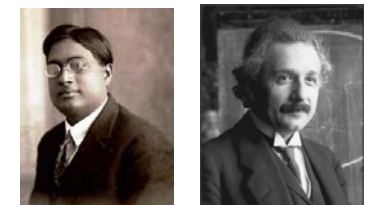
métaux, isolants, semi-conducteurs, naines blanches, étoiles à neutrons

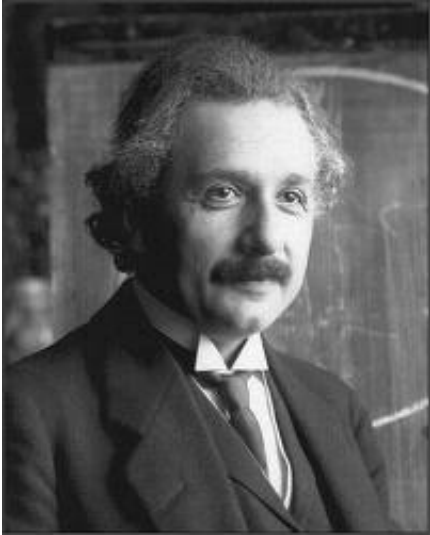


$$f_k^B = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1}$$

Bose-Einstein

rayonnement, effet de serre, lasers, rayonnement cosmologique, condensation de Bose, suprafluidité, supraconductivité





1905 - Le quantum de lumière

1907- Capacité thermique des solides

1909 - Dualité onde-corpuscule
cf. pb. 2015

1917 - Émission stimulée

1924 - Condensation
de Bose-Einstein

1935 – Paradoxe « EPR »