

TD - 4

Exercice: 1

on considère un système fermé de N électrons, pour lequel on suppose que la densité d'états à un électron est une constante D pour tout niveau d'énergie $\varepsilon > 0$ et nulle pour $\varepsilon < 0$.

1. Calculer l'énergie de Fermi ε_F au zéro absolu.
2. Dans quelle condition ce système est-il non dégénéré?
3. Montrer que la chaleur spécifique est proportionnelle à T quand le système est fortement dégénéré.

solution Ex1

Pour résoudre cet exercice, nous étudions un système fermé de N électrons à température nulle, avec une densité d'états constante D pour les énergies positives, et nulle pour les énergies négatives. La question porte sur le calcul de l'énergie de Fermi ε_F à zéro absolu.

Définition de l'énergie de Fermi L'énergie de Fermi ε_F est la plus haute énergie occupée par un électron à température nulle. À $T = 0$, tous les états d'énergie inférieure ou égale à ε_F sont occupés, tandis que les états au-dessus sont vides.

Calcul de ε_F

La densité d'états d'un électron est donnée par $D(\varepsilon) = D$ (constante) pour $\varepsilon > 0$ et $D(\varepsilon) = 0$ pour $\varepsilon < 0$.

Le nombre total d'électrons N correspond au nombre d'états occupés jusqu'à l'énergie ε_F :

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} D d\varepsilon = D \varepsilon_F$$

De cette relation, on peut isoler ε_F :

$$\varepsilon_F = \frac{N}{D}$$

Résultat

L'énergie de Fermi à température nulle pour ce système est simplement donnée par

$$\boxed{\varepsilon_F = \frac{N}{D}}$$

Cette formule exprime que l'énergie de Fermi est proportionnelle au nombre total d'électrons N et inversement proportionnelle à la densité d'états constante D .

Pour répondre à la question "Dans quelle condition ce système est-il non dégénéré ?", il faut comprendre le concept de dégénérescence dans un système quantique de fermions (ici, des électrons).

Dégénérés vs Non dégénérés Un système d'électrons est dit ****dégénéré**** lorsque la distribution d'occupations des états énergétiques est fortement influencée par le principe d'exclusion de Pauli, c'est-à-dire lorsque la température est très basse par rapport à l'énergie de Fermi, et où la majorité des états énergétiques jusqu'à ε_F sont occupés. Dans ce cas, la statistique de Fermi-Dirac est très marquée, et les propriétés thermodynamiques diffèrent nettement de celles d'un gaz classique.

Un système est dit ****non dégénéré**** lorsque les effets quantiques liés à la statistique de Fermi sont négligeables, c'est-à-dire que le comportement statistique devient essentiellement classique (Maxwell-Boltzmann).

Condition de non dégénérescence

La non dégénérescence se traduit par une température suffisamment élevée pour que l'énergie thermique soit dominante par rapport à l'énergie de Fermi, assurant que les électrons peuvent accéder à un grand nombre d'états, sans saturer les plus basses énergies.

Mathématiquement, la condition de non dégénérescence est exprimée par la comparaison entre la température T du système et la température caractéristique liée à ε_F , appelée température de Fermi T_F :

$$k_B T \gg \varepsilon_F$$

où k_B est la constante de Boltzmann.

Ici, $T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B}$ est la température de Fermi, qui représente l'échelle d'énergie électronique.

- Si $T \ll T_F$, le système est dégénéré (statistique de Fermi-Dirac dominée).
- Si $T \gg T_F$, le système est non dégénéré (statistique classique de Maxwell-Boltzmann).

Interprétation physique dans ce système

- À température très basse, presque tous les états jusqu'à ε_F sont occupés (dégénérescence). - À température élevée, les électrons sont thermiquement excités au-delà de ε_F , et l'occupation des niveaux suit une distribution quasi-classique, ce qui correspond à un système non dégénéré.

Résumé

Le système d'électrons avec une densité d'états constante est non dégénéré lorsque la température T satisfait

$$k_B T \gg \varepsilon_F = \frac{N}{D}$$

ainsi, la température dépasse largement la température de Fermi et la distribution d'électrons devient classique plutôt que quantique.

Cette condition garantit que les effets quantiques liés au principe d'exclusion de Pauli sont faibles, et le système peut être traité comme un gaz parfait classique.

Pour montrer que la capacité calorifique (chaleur spécifique) est proportionnelle à la température T quand le système est fortement dégénéré, on analyse le comportement thermique d'un gaz d'électrons à basse température, c'est-à-dire lorsque $T \ll T_F$ (température de Fermi).

Contexte : chaleur spécifique et dégénérescence

La chaleur spécifique à volume constant, notée C_V , correspond à la dérivée de l'énergie interne U par rapport à la température :

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V$$

Dans un système hautement dégénéré, seuls les électrons proches de l'énergie de Fermi ε_F peuvent absorber ou libérer de l'énergie, car à $T = 0$ tous les états jusqu'à ε_F sont occupés et ceux au-dessus sont vides.

Densité d'états constante et énergie des électrons

On rappelle que la densité d'états est constante : $D(\varepsilon) = D$ pour $\varepsilon > 0$.

L'énergie totale à température nulle est donnée (en intégrant les états occupés) :

$$U_0 = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D d\varepsilon = D \frac{\varepsilon_F^2}{2}$$

Effet de la température faible

À faible température, la distribution d'occupation des états suit une statistique de Fermi-Dirac :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1}$$

- À $T = 0$, la fonction devient une fonction échelon de Heaviside.
- À $T > 0$ mais $T \ll T_F$, la température modifie la distribution autour de ε_F sur un intervalle étroit d'ordre $k_B T$.

Calcul approximatif de la variation d'énergie

La variation d'énergie liée à la température par rapport à U_0 peut être obtenue par le développement de Sommerfeld, classique pour un système dégénéré :

$$\Delta U = U(T) - U_0 \propto D(k_B T)^2$$

La contribution thermique provient essentiellement des électrons dans une bande d'énergie de largeur $\sim k_B T$ autour de ε_F .

Capacité calorifique

En dérivant l'énergie de cette variation selon T , on obtient :

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} \propto D k_B^2 T$$

Ainsi, la capacité calorifique varie ****linéairement**** avec T à basse température quand le système est fortement dégénéré.

Interprétation physique

Cette dépendance linéaire explique que seuls les électrons près de la surface de Fermi contribuent à la chaleur spécifique, car la majorité des électrons sont bloqués par le principe d'exclusion de Pauli sauf ceux qui ont une énergie proche de ε_F .

Cette propriété se distingue du comportement d'un gaz classique dont la capacité calorifique est indépendante de T .

Conclusion:

Pour conclure, la chaleur spécifique d'un système dégénéré d'électrons est proportionnelle à la température T , résultat fondamental de la théorie électronique des métaux au voisinage de zéro Kelvin :

$$C_V \propto T$$

lorsque $T \ll T_F$, avec une constante de proportionnalité liée à la densité d'états D et à la constante de Boltzmann k_B .