TD 7. **Distribution de Fermi. Électrons dans les matériaux.**

Références : [3, p.774], [1], [2].

Table des matières

1 Expansion de Sommerfeld

vidéo de la solution.

[3, p.787], [1, Tome2, p.41].

Ce premier problème concerne la distribution de Fermi-Dirac et établie une formule bien utile pour la suite, dans le régime de basse température. La distribution de Fermi-Dirac donne le nombre moyen de Fermions dans un état individuel d'énergie ϵ (voir TD 8) :

$$N(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}$$

où μ est le potentiel chimique et $\beta = \frac{1}{kT}$. A basse température $T \to 0$ i.e. $\beta \to \infty$, cette fonction converge vers la fonction indicatrice $\mathbf{1}_{]-\infty,\mu]}$ de l'intervalle $]-\infty,\mu]$. On cherche à établir la première correction à cette limite.

Montrer que pour toute fonction [1] fixée $u(\epsilon)$ on a la formule suivante appelée **expansion de Sommerfeld** valable si $\beta \to \infty$:

$$\int u(\epsilon) N(\epsilon)\, d\epsilon = \int_{-\infty}^{\mu} u(\epsilon)\, d\epsilon + \frac{\pi^2}{6\beta^2} u'(\mu) + O\left(\frac{1}{\beta^3}\right) \tag{1.1}$$

où le reste dépend de u. Aide : $\int_0^{+\infty} \frac{x}{1+e^x} dx = \frac{\pi^2}{12}$ d'après ici.

Remarque 1.1. cela signifie que au sens des distributions (voir TD 1)

$$N(\epsilon) = \mathbf{1}_{]-\infty,\mu]} - \frac{\pi^2}{6\beta^2}\delta'_\mu + O\left(\frac{1}{\beta^3}\right) \tag{1.2}$$

où δ'_μ est la dérivée de la distribution de Dirac en μ définie par $\langle \delta'_\mu | u \rangle = -u'(\mu)$.

2 Capacité calorifique des électrons d'un métal

Vidéo de la solution.

1. Quelle est la loi empirique de Dulong-Petit (1810) concernant la capacité calorifique molaire des matériaux ? Quelle est l'explication à ce résultat ? (voir TD5)
2. On considère un bloc de métal de volume V contenant des électrons libres. Dans le modèle de Drude-Lorentz des métaux (1900), les électrons sont des particules classiques. Quelle serait la contribution des électrons à la capacité calorifique du cristal dans ce modèle ? est-ce acceptable ?
3. Pour **un électron libre**, utiliser la formule de Weyl (voir TD2) pour montrer que le nombre d'états quantiques φ_n possibles d'énergie inférieure à ϵ dans ce volume V est $n(\epsilon) = \alpha\epsilon^{3/2}$ avec α à préciser (ne pas oublier les deux états de spins possibles de l'électron). En déduire l'expression de la densité des états quantiques $\rho(\epsilon) = \frac{dn}{d\epsilon}$ à l'énergie ϵ et tracer l'allure de cette fonction.
4. On considère maintenant N **électrons indépendants** dans le métal [2]. Ce sont des Fermions. Rappeler l'expression de la distribution de Fermi donnant le nombre moyen d'électron N_n dans chaque état φ_n à une particule, en fonction de $\beta = \frac{1}{kT}$ et du potentiel chimique μ (voir TD8). Déduire l'expression du nombre total N d'électron et de l'énergie totale E comme une intégrale sur ϵ, dépendant de $\beta, \mu, \rho(\epsilon)$. Remarquer que si on considère N comme fixé, cela impose une relation entre μ et β, autrement dit le potentiel chimique $\mu(T)$ est fonction de la température. On va expliciter cette fonction plus loin.

1. Plus précisément pour toute fonction $u \in C_c^\infty(\mathbb{R})$ lisse à support compact, appelée fonction test en théorie des distributions
2. Cela se justifie par la théorie du liquide de Fermi

5. En particulier, à température $T = 0$, déduire la relation entre le potentiel chimique $\mu(0)$ aussi appelé **énergie de Fermi**, et la densité électronique $\nu = \frac{N}{V}$ (nombre d'électrons par unité de volume). Calculer $\mu(0)$ pour le Sodium [3] et la vitesse des électrons situés à l'énergie de Fermi $\mu(0)$.
6. A température non nulle mais faible, i.e. si $\beta\mu \gg 1$, utiliser la formule d'expansion de Sommerfeld (1.1) et l'expression de N obtenue en (4) pour montrer que le potentiel chimique μ dépend de T selon
$$\mu(T) = \mu(0)\left(1 - \frac{T^2\pi^2k^2}{12(\mu(0))^2}\right) + O\left(T^3\right) \tag{2.1}$$
Aide : N est fixé et utiliser un développement de Taylor de $\mu(T)$ en $T = 0$ et de $n(\epsilon)$ en $\epsilon = \mu(0)$.
7. Utiliser l'expression de E obtenue en (4), la formule d'expansion de Sommerfeld (1.1) et (2.1) pour déduire la capacité calorifique molaire des électrons
$$C_e := \frac{dE}{dT} = \gamma T + O\left(T^2\right), \qquad \gamma = \frac{N_A k^2\pi^2}{2\mu(0)}$$
8. Calculer le coefficient γ pour le Sodium, et la valeur de C_e à température ordinaire $T = 300K$ et comparer à la loi de Dulong Petit. La capacité calorifique des atomes du réseau cristallin (phonons) se comporte comme $C_p = aT^3$ pour $T \to 0$ (voir Modèle de Debye, TD5). Montrer que la contribution électronique est alors importante et mesurable en dessous d'un certaine température T_c. Calcul de T_c pour le Sodium ?

3 (Optionnel) Paramagnétisme de Pauli

Vidéo de la solution.

Référence : cours de Yves Quéré, Ecole polytechnique, page 67.

On se demande quel est le magnétisme M d'un métal lorsqu'il est soumis à un champ magnétique extérieur B. Précisément, quelle sera la susceptibilité magnétique χ, telle que $M = \chi B$. Ce sont les électrons libres du métal qui sont responsables de cet effet.

1. (Rappels du problème 2) **On suppose** $B = 0$**.** Pour **un électron libre** dans le métal, utiliser la formule de Weyl (voir TD2) pour montrer que pour chaque état de spin $\pm\frac{1}{2}$, le nombre d'états quantiques φ_n possibles d'énergie inférieure à ϵ dans ce volume V est $n(\epsilon) = \frac{\alpha}{2}\epsilon^{3/2}$ avec α à préciser. En déduire l'expression de la densité des états quantiques $\rho(\epsilon) = \frac{dn}{d\epsilon}$ à l'énergie ϵ.
2. Soumis au **champ magnétique** B (selon z) un électron de spin $s = \pm 1/2$ possède une énergie d'interaction supplémentaire
$$\Delta E = -2\mu_B s B$$
où $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ est le magnéton de Bohr. Calculer $|\Delta E|$ pour $B = 1$ Tesla. Montrer que $\Delta E \ll \mu(0)$. Donner la nouvelle expression de $n_\pm(\epsilon)$ à partir de $n(\epsilon) = \frac{\alpha}{2}\epsilon^{3/2}$.
3. **On suppose** $T = 0$**.** Dessiner l'allure des courbes $\rho_\pm(\epsilon)$ avec l'énergie de Fermi $\mu(0)$. Déduire que la différence du nombre d'états occupés est
$$n_+(\mu(0)) - n_-(\mu(0)) \simeq 2|\Delta E|\,\rho(\mu(0))$$
4. Sachant qu'un électron a un moment magnétique $2\mu_B s$, déduire l'aimantation M et sa susceptibilité magnétique χ_0, en fonction de $e, \hbar, m, \mu(0)$. Application numérique pour un volume $V = 1m^3$?
5. (Optionnelle) **On suppose** $T > 0$**.** Donner l'expression de la susceptibilité χ_T en fonction de la température T ? (Aide : utiliser la même démarche que dans le problème 2)

Références

[1] Roger Balian. *From microphysics to macrophysics : methods and applications of statistical physics*, volume 1,2. Springer Science & Business Media, 2007.

[2] L. Couture and R. Zitoun. *Physique statistique.* 1992.

[3] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, and B. Roulet. *Physique statistique.* 1989.

3. Valeurs numériques pour le Sodium : $\nu = 2,62\ .10^{28}\ \frac{e^-}{m^3}$, $m = 9,31\ .10^{-31}kg$, $\hbar = 1,055\ .\ 10^{-34}J.s$, $e = 1,6.10^{-19}C$, $k = 1,38.10^{-23}J.K^{-1}$, $R = N_A k = 8,31J/K$, $a = 27$ J.K^{-4}.m^{-3}