

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
« HOUARI BOUMEDIENE »

FACULTE DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du Diplôme de MAGISTER

EN : PHYSIQUE

Spécialité : **Sciences Nucléaires et Interaction Rayonnement Matière**

Par : M^{elle} DAOUDI Nassima

Thème

***CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA
THERMODYNAMIQUE DE SYSTEMES BOSONIQUES***

Soutenu publiquement, le 06 avril 2011, devant le jury composé de :

M^{me} Fatima Zahra IGHEZOU	Professeur l'USTHB	Présidente
M^r Salem KESSAL	Professeur l'USTHB	Directeur de mémoire
M^r Mohamed BENAROUS	Professeur l'UHBB (Chlef)	Examineur
M^r Mourad DJEBLI	Professeur l'USTHB	Examineur
M^r Djamel Eddine MEDJADI	Professeur l'ENS (Kouba)	Examineur

FACULTE DE PHYSIQUE

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du Diplôme de MAGISTER

EN : PHYSIQUE

Spécialité : **Sciences Nucléaires et Interaction Rayonnement Matière**

Par : M^{elle} DAOUDI Nassima

Thème

*CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA
THERMODYNAMIQUE DE SYSTEMES BOSONIQUES*

A decorative border with stars and swirls. The border is composed of a series of stylized, flowing lines that form a rectangular frame. These lines are interspersed with various sizes of stars, some of which are outlined in black and others in white. The overall effect is a whimsical and elegant frame for the text.

A mes parents

A la mémoire de Ma grand-mère Omi-lalla et ma tante

A tous ceux qui me sont proches

Remerciements

Avant tout je remercie en premier lieu le Bon Dieu qui m'a guidée et m'a éclairée à pour faire ce travail de mémoire de Magister au laboratoire «Sciences Nucléaire et Interaction Rayonnement Matière », à l'université des Sciences et de la Technologie « Houari BOUMEDIENE » à Bab Ez-zouar, et qui j'espère va satisfaire tous ceux qui m'ont suivie et encouragé à le faire.

Je tiens à remercier tout particulièrement mon directeur de thèse le professeur Salem Kessal Directeur de laboratoire LSNIRM, qui a dirigé ce mémoire, pour sa disponibilité, sa pédagogie et ses précieux conseils qui m'ont beaucoup aidé pour mener a terme ce travail, ainsi que pour sa relecture attentive du manuscrit.

J'adresse tous mes remerciements à Madame Fatima Ez-zahraa Ighezou, professeur à l'U.S.T.H.B, qui m'a fait l'honneur de présider mon jury de soutenance.

Je remercie Monsieur Benarous, professeur à l'U.H.B.B Chlef pour avoir accepté de faire partie du jury.

Je remercie également Monsieur Medjadi, professeur à l'E.N.S Kouba, qui m'a fait l'honneur d'examiner ce travail.

Je tiens également à remercier Monsieur Djebli, professeur à l'U.S.T.H.B, pour avoir accepté d'évaluer ce travail.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance et ma gratitude à Mesdames et Messieurs : Y. Boudouma, A.C. Chami, K.K. Khallal, M. Boudjema, professeurs à l'U.S.T.H.B, S. Mehdi, M. Hamhami, N. Adimi, N. Djouhri et R. Zemih pour leurs précieux conseils.

Je remercie tous les professeurs de première année poste-graduation et les professeurs de la Faculté des Sciences à Université Saad Dahleb (Blida). Merci également à tous mes amis du laboratoire et des autres laboratoires de la Faculté de Physique à l'U.S.T.H.B. Je remercie mesdames et messieurs les agents de départements, bibliothèque et du Service PG.

Je souhaite enfin remercier tout en exprimant profonde ma reconnaissance envers Mon père Si-Mohamed Daoudi Daoudi et Ma mère Aicha Daoudi, dont le soutien a été inestimable tout au long de mes études et pour leur compréhension. Je remercie aussi mes frères, mes sœurs, mes neveux, mes nièces, mes oncles, mes tantes mes cousins, et mes cousines.

Résumé

La condensation de Bose Einstein est l'accumulation d'un nombre macroscopique d'atomes bosoniques dans le niveau d'énergie fondamental. Elle est obtenue à basse température, lorsque la longueur d'onde thermique moyenne est de l'ordre de la distance entre particules. Elle a été prédite par Einstein en 1925. Du fait des très basses températures nécessaires pour obtenir cette condensation, il a fallu attendre 1995 pour que des physiciens en fassent une première réalisation expérimentale. Cette réalisation a relancé les études des propriétés des gaz à basse température, qui ne sont pas encore totalement comprises. Notre travail entre dans ce cadre : contribution à la compréhension de systèmes bosoniques, lorsque la statistique quantique est indispensable.

Il se compose de deux parties. Dans la première partie, nous considérons un gaz atomique de bosons sans interactions libres dans une boîte à une, deux et trois dimensions de volume donné. Nous étudions les propriétés de ce gaz, en particulier son potentiel chimique et sa capacité calorifique. Ces propriétés sont habituellement étudiées dans la littérature en se plaçant dans le cas des dimensions macroscopiques où les niveaux d'énergie sont très serrés. Les sommations peuvent alors être remplacées par des intégrations sur l'espace des phases permis, en prenant un état par volume adéquat de cet espace. En ce qui nous concerne, nous effectuons les calculs en utilisant les expressions exactes des énergies, les sommations discrètes mises en jeu. En particulier, l'énergie du fondamental est non nulle. Ces considérations conviennent bien aux systèmes de petites dimensions. Nous étudierons le potentiel chimique réduit en fonction de la température pour les trois cas et pour les différentes méthodes (approximation dite classique, exacte et notre approximation), les variations de la fraction d'atomes condensée en fonction de la température T et l'énergie totale par rapport à la température puis la capacité calorifique à volume constant pour les trois cas et les différentes méthodes.

La deuxième partie traite de systèmes bosoniques à faible nombre de niveaux d'énergie. Du fait de l'indiscernabilité des particules identiques, la fonction de partition canonique des systèmes quantiques est difficile à calculer lorsque le nombre de particules est élevé. Toutefois la fonction de partition grand canonique est plus pratique à calculer. C'est pourquoi les grandeurs thermodynamiques de ces systèmes sont calculées dans l'ensemble grand canonique. Cependant, certains systèmes ont un nombre de particules constant et leur étude est plus appropriée par l'ensemble canonique. Nous considérons des systèmes bosoniques à faible nombre de niveaux d'énergie. Pour ces systèmes nous pouvons déterminer la fonction de partition canonique et donc les énergies canoniques. Nous les comparons aux énergies grand canoniques de systèmes équivalents. Les deux ensembles sont supposés conduire au même résultat à la limite thermodynamique. Les résultats obtenus sont présentés sous de courbes, qui montrent les variations des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique à volume constant en fonction de la température T .

Sommaire

Introduction générale :	4
Chapitre I : Généralités sur les statistiques quantiques	7
I- Introduction :	7
I-2 Détermination de l'opérateur densité d'équilibre $\hat{D}$	8
I-3 Expression de la fonction de partition grand canonique	9
I-4 Gaz parfait quantique	10
I-4-1 Statistique de Fermi Dirac	12
I-4-2 Statistique de Bose Einstein	13
I-5 Limite classique	14
I-6 Phénomène de condensation	15
I-6 Température critique T_c	17
I-7 Longueur d'onde thermique de de Broglie	17
I-8 Relation entre la température et la longueur d'onde thermique de de Broglie	18
I-9 Réalisation expérimentale de la condensation de Bose Einstein	19
Chapitre II : Gaz de Bosons dans une boîte	21
II-1 Introduction	21
II- Détermination du potentiel chimique et de la capacité calorifique à volume constant	23
II-A Boîte à une dimension	23
II-A-1 Approximation dite classique	23
II-A-2 Sommation exacte	24
II-A-3 Notre approximation	30
Conclusion	35
II-B Boîte à deux dimensions	35
II-B-1 Approximation dite classique	35
II-B-2 Sommation exacte	36
II-B-3 Notre approximation	42
II-B-4 Tableau de fugacité pour différentes méthodes	45

II-C Boite à trois dimensions	47
II-C-1 Approximation dite classique	47
II-C-2 Sommation exacte.....	47
II-C-3 Notre approximation.....	54
II-C-4 Tableau de fugacité pour différentes méthodes	57
Conclusion	58
Chapitre III : Comparaison ensembles canonique et grand canonique pour l'étude de systèmes de bosons	59
III-1 Introduction	59
III-2 Système à deux niveaux	60
III-2-1 Ensemble canonique	60
III-2-1-1 La fonction de partition	60
III-2-1-2 L'énergie interne	61
III-2-1-3 La capacité calorifique	62
III-2-2 Ensemble grand canonique	62
III-2-2-1 La grande fonction de partition	62
III-2-2-2 L'énergie interne	62
III-2-2-3 La capacité calorifique	63
III-3 Système à trois niveaux et plus	64
III-3-1 Ensemble canonique	64
III-3-1-1 La fonction de partition pour trois niveaux d'énergie équidistants	64
III-3-1-2 L'énergie interne	64
III-3-1-3 La capacité calorifique	65
III-3-1-4 La fonction de partition pour quatre niveaux d'énergie équidistants	65
III-3-1-5 L'énergie interne	66
III-3-1-6 La capacité calorifique	66
III-3-2 Ensemble grand canonique	67
III-3-2-1 La grand fonction de partition pour trois niveaux d'énergie équidistants	67
III-3-2-2 L'énergie interne	67

III-3-2-3 La capacité calorifique	67
III-3-4 La grand fonction de partition pour quatre niveaux d'énergie équidistants	68
III-3-5 L'énergie interne	68
III-3-6 La capacité calorifique	68
III-2-7 Les écart relatifs	69
III-3-7 Les résultats numériques	70
Conclusion	76
Conclusion générale	77
Appendice A	79
Appendice B	80
Appendice C	81
Références	82

Introduction :

Parmi les grandes découvertes physiques qui ont marqué le vingtième siècle figurent la supraconductivité, la superfluidité de l'Hélium liquide, la condensation de Bose Einstein et l'effet laser [Boy00]. Ces phénomènes sont similaires en ce sens qu'ils sont une manifestation macroscopique de la nature quantique, résultant de l'occupation macroscopique d'un seul état quantique (état fondamental). Cet effet est lié à l'indiscernabilité des particules identiques (fermions, bosons) en mécanique quantique, ce qui conduit, dans le cas de bosons, à la statistique de Bose Einstein, explicitée pour la première fois par Bose pour les photons (la masse des photons est nulle) [Bos24]. La condensation de Bose-Einstein est l'accumulation d'un nombre macroscopique d'atomes bosoniques dans le niveau d'énergie fondamental. Elle est obtenue à basse température, lorsque la longueur d'onde thermique moyenne est de l'ordre de la distance entre particules $d \approx n^{-1/3}$ (n étant la densité spatiale du gaz bosonique considéré). Du point de vue statistique quantique, quand la température est inférieure à la température de condensation, une fraction importante d'atomes s'accumule dans le niveau fondamental, T_c étant la température de la condensation. Dans cet état quantique, appelé état condensé, les paquets d'ondes associés aux bosons individuels se recouvrent entre eux, formant ainsi une seule onde quantique macroscopique. La condensation de Bose Einstein a été prévue théoriquement par Einstein en 1925 [Ein25]. Toutefois, on a cru pendant longtemps que la réalisation de la condensation de Bose Einstein est pratiquement impossible. Ceci est dû au fait que cette réalisation nécessite, d'après le critère d'Einstein, des densités élevées et des températures très basses. « C'est une belle théorie, mais contient-elle une vérité ? » C'est par ces mots qu'Einstein lui-même décrira son résultat dans une lettre à Paul Ehrenfest [Pai82], avant de se détourner définitivement du phénomène de condensation. Cette défiance demeura générale pendant les années qui suivirent. Il a fallu attendre 1937, avec la découverte de la superfluidité de l'hélium liquide [Kap38, All38], pour que la prédiction d'Einstein soit reconsidérée avec intérêt. London [Lon38] remarqua que la température de la transition superfluide, $T_c = 2.2K$, est étonnamment proche de la température de condensation de Bose Einstein d'un gaz parfait de même densité que l'hélium liquide, $T_c = 3.2K$, il eut l'intuition que les deux phénomènes devaient être liés. Du fait des très basses températures nécessaires pour obtenir cette condensation, il a fallu attendre 1995 pour que des physiciens en fassent une première réalisation expérimentale, ce qui a relancé

les études des propriétés des gaz à basse température qui obéissent à la statistique quantique. Le développement des techniques de piégeage et refroidissement d'atomes par laser (prix Nobel 1997 attribué à Chu [Chu98], Phillips [Phi98] et Cohen Tannoudji [Tan98a]) ou par des champs magnétiques [Hes86] statiques a permis de relancer cette recherche. En 1995, à Boulder (Colorado), la découverte par le groupe d'E. Cornell et C. Wieman d'un condensat de rubidium ^{87}Rb [And95] suivie de peu par son analogue pour le Lithium (équipe de Houston [Bra95]), le sodium (équipe du MIT [Dav95]), l'hydrogène (équipe du MIT [Fri98]), le rubidium ^{85}Rb [Cor00], l'hélium-4 dans l'état métastable en 2001 (ENS Paris et laboratoire Charle Fabry Orsay) [Rob01], ^{41}K [Mod01], ^{133}Cs [Web03] et depuis peu un atome de terre rare, l'Ytterbium ^{171}Yb [Tak03], est venue couronner ces efforts. Notre travail entre dans ce cadre : contribution à la compréhension de systèmes bosoniques lorsque la statistique quantique est indispensable.

Il se compose de trois chapitres que nous avons structurés comme suit.

Dans le premier chapitre nous allons d'abord présenter quelques généralités sur les statistiques quantiques, qui seront suivies par l'explication du phénomène de condensation de Bose Einstein.

Dans le deuxième chapitre, nous étudierons la capacité calorifique à volume constant C_v d'un gaz atomique de bosons sans interactions dans une boîte à une, deux et trois dimensions de volume donné. Nous allons étudier les propriétés de ce gaz, en particulier son potentiel chimique et sa capacité calorifique. Ces propriétés sont habituellement étudiées dans la littérature [Pit03] en se plaçant dans le cas des dimensions macroscopiques où les niveaux d'énergie sont très serrés. Les sommations peuvent alors être remplacées par des intégrations sur l'espace des phases permis, en prenant un état par volume adéquat de cet espace. En ce qui nous concerne, nous effectuons les calculs en utilisant les expressions exactes des énergies, des dégénérescences et des sommations discrètes mises en jeu. En particulier, l'énergie du fondamental est non nulle. Nous étudierons ensuite le potentiel chimique réduit en fonction de la température pour les trois cas et par les différentes méthodes (approximation dite classique, exacte et notre approximation). Nous examinerons les variations de la fraction d'atomes condensée, de l'énergie totale et de la capacité

calorifique à volume constant pour les trois cas et les différentes méthodes en fonction de la température T .

Dans le troisième chapitre, nous présentons un travail sur les systèmes de bosons à faible nombre de niveaux d'énergie. Du fait de l'indiscernabilité des particules identiques, la fonction de partition canonique de systèmes quantiques (bosons ou fermions) est difficile à calculer lorsque le nombre de particules est élevé [Pat96]. Toutefois, la fonction de partition grand canonique est plus pratique à calculer. C'est pourquoi les grandeurs thermodynamiques de ces systèmes sont calculées dans l'ensemble grand canonique. Cependant, certains systèmes ont un nombre de particules constant et leur étude est plus appropriée par l'ensemble canonique. Les deux ensembles sont supposés conduire au même résultat à la limite thermodynamique [Kos08].

Nous nous sommes intéressés à des systèmes bosoniques à faible nombre de niveaux d'énergie. Nous arrivons à calculer la fonction de partition canonique dans ces cas. Nous en déduisons l'énergie moyenne de ces systèmes. Nous comparons la valeur obtenue à celle qui découle d'un ensemble grand canonique, de même nombre de particules (en moyenne). Nous traçons la différence relative de ces deux énergies et de ces capacités calorifiques à volume constant en fonction de la température T , pour différentes valeurs du nombre de particules N . Les résultats obtenus sont présentés sous forme de courbes, qui montrent les variations des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique à volume constant en fonction de la température T .

En résumé, le plan de ce mémoire est agencé comme suit : dans le premier chapitre, nous exposons les statistiques quantiques qui contiennent les outils théoriques adaptés à l'étude de la condensation de Bose Einstein.

Nous présentons ensuite notre travail dans deux parties. Dans la première partie, nous étudions le comportement des bosons sans interaction mutuelles dans des boîtes à une, deux et trois dimensions pour différentes méthodes. Dans la deuxième partie, nous comparons les ensembles canonique et grand canonique dans l'étude des systèmes de bosons et nous terminerons par une conclusion générale.

Chapitre I :

Généralités sur les statistiques quantiques

I –1 Introduction :

La physique statistique permet d'expliquer le comportement et l'évolution de systèmes physiques, comportant un grand nombre de particules (systèmes macroscopiques), à partir des caractéristiques de leurs constituants microscopiques (les particules). Ces constituants peuvent être des atomes, des molécules, des ions, des électrons, des photons, des neutrinos, ou des particules élémentaires. Ces constituants, et les interactions qu'ils peuvent avoir entre eux sont, en général, décrits par la mécanique quantique [Tan03, Tan05, Ric08], mais, la description macroscopique d'un ensemble de tels constituants ne fait pas directement appel (ou en tout cas pas toujours)

à la mécanique quantique. De ce fait, cette description macroscopique, en particulier, la thermodynamique, a été obtenue pour partie avant le développement de la mécanique quantique en tant que théorie physique, essentiellement dans la seconde moitié du XIX^e siècle [Yav75].

I-2 Détermination de l'opérateur densité d'équilibre $\hat{D}$:

L'état quantique d'un système physique est décrit par un opérateur densité $\hat{D}$ qui maximise l'information manquante ou l'entropie statistique.

L'opérateur densité d'équilibre $\hat{D}$ est déterminé par deux conditions :

- Désordre maximal

L'entropie statistique $S(\hat{D})$ est définie à partir de l'opérateur densité $\hat{D}$ [Neu83], [Tan98] décrivant l'état quantique d'un système et ses propriétés importantes sont additivité, concavité et invariance dans une transformation unitaire.

$$S(\hat{D}) = -k \text{Tr} \hat{D} \log \hat{D} \quad (\text{I-1})$$

- Les opérateurs $\hat{A}_i$ ont des valeurs moyennes fixées.

$$\text{Tr}(\hat{D} \cdot \hat{A}_i) = \langle \hat{A}_i \rangle \quad (\text{I-2})$$

L'opérateur densité d'équilibre $\hat{D}$ est déterminé en rendant l'entropie statistique $S(\hat{D})$ maximale, compte tenu des contraintes (I-2). Pour n'importe quelle variation $d\hat{D}$ de $\hat{D}$ autour de la valeur d'équilibre $\hat{D}$, on doit avoir $dS = 0$ et $d\text{Tr}(\hat{D}\hat{A}_i) = 0$. On introduit alors la fonction de partition Z_G associée à $\hat{D}$ ainsi que divers ensembles statistiques (microcanonique, canonique, grand canonique) correspondants à divers types de contraintes.

En statistique quantique, dans un système de particules identiques (bosons ou fermions) on utilise l'ensemble grand canonique [Hua63, Diu89, Leb01], et le système dans ce cas échange des particules et de la chaleur avec l'environnement externe. La température T et le potentiel chimique μ sont fixes.

Les contraintes pour l'ensemble grand canonique sont :

$$\langle \hat{N} \rangle = N \quad (\text{I-2-1})$$

$$\langle \hat{H} \rangle = U \quad (\text{I-2-2})$$

Elles expriment que les valeurs moyennes des opérateurs nombre de particules $\hat{N}$ et hamiltonien $\hat{H}$ sont constantes.

Cette maximisation sous contraintes se traite simplement dans le formalisme des multiplicateurs de Lagrange [Bal85]. On obtient :

$$\hat{D} = \frac{e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}}}{Z_G} \quad (\text{I-3})$$

La fonction Z_G est un facteur de normalisation appelé « fonction de partition grand canonique ».

Les multiplicateurs de Lagrange α et β sont associés aux contraintes sur $\langle \hat{N} \rangle$ et $\langle \hat{H} \rangle$.

Le paramètre β est relié à la température T par $\beta = \frac{1}{kT}$, le paramètre α est relié au potentiel chimique μ par $\alpha = -\beta\mu$ ainsi qu'à la fugacité $z = e^{-\alpha} = e^{\beta\mu}$.

I-3 Expression de la fonction de partition grand canonique :

Nous utilisons les propriétés de l'opérateur densité d'équilibre $\hat{D}$, telle que $\text{Tr} \hat{D} = \langle \hat{D} \rangle = 1$, pour obtenir :

$$Z_G = Tr \left(e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}} \right) \quad (\text{I-4})$$

La détermination des valeurs de z et β qui vérifient les contraintes (I-2-1) et (I-2-2) se fait par l'intermédiaire des relations :

$$N = z \frac{\partial}{\partial z} \text{Ln} Z_G(z, \beta, V) \quad (\text{I-5})$$

$$U = - \frac{\partial}{\partial \beta} \text{Ln} Z_G(z, \beta, V) \quad (\text{I-6})$$

Il faudrait inverser pour obtenir z et β comme fonction de N et U .

On détermine la pression d'équilibre par la dérivée du logarithme de la fonction de partition :

$$P = kT \frac{\partial}{\partial V} \text{Ln} Z_G(z, \beta, V) \quad (\text{I-7})$$

I-4 Gaz parfait quantique :

Dans un gaz parfait, les particules sont considérées sans interaction. Pour un système de N particules sans interaction, l'hamiltonien total $\hat{H}$ est une somme de termes à une particule.

$$\hat{H} = \hat{h}(1) + \hat{h}(2) + \dots + \hat{h}(N) \quad (\text{I-8})$$

Notons $\{|\lambda\rangle\}$ une base de vecteurs propres de l'hamiltonien à une particule $\hat{h}$ et ε_λ l'énergie associée à $|\lambda\rangle$, donc on écrit :

$$\hat{h}|\lambda\rangle = \varepsilon_\lambda |\lambda\rangle \quad (\text{I-9})$$

Si le nombre de particules peut varier, il est commode de travailler dans l'espace de Fock (somme directe des espaces de Hilbert correspondant aux diverses valeurs possibles de N).

Les états $|l\rangle$ du système de N particules sont définis par le nombre d'occupation N_λ des divers états individuels $|\lambda\rangle$ ($|l\rangle = |\{\lambda\rangle\}\rangle$).

Les nombres d'occupation N_λ :

- valent 0 ou 1 lorsque les particules sont des fermions (principe de Pauli).
- sont des entiers positifs ou nuls quelconques dans le cas de bosons.

Les opérateurs $\hat{H}$ et $\hat{N}$ vérifient les relations suivantes :

$$\hat{N}|l\rangle = N_l|l\rangle \text{ avec } N_l = \sum_{\lambda} N_{\lambda} \quad (\text{I-10})$$

$$\hat{H}|l\rangle = E_l|l\rangle \text{ avec } E_l = \sum_{\lambda} N_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} \quad (\text{I-11})$$

où l'indice l représente un état microscopique possible du système ayant une énergie $E = E_l$ et un nombre de particules $N = N_l$.

Nous exprimons la fonction de partition grand canonique Z_G donnée en (I-4) dans la base $\{|l\rangle\}$.

$$Z_G = \sum_l \langle l | e^{-\alpha \hat{N} - \beta \hat{H}} | l \rangle = \sum_{N_\lambda, N_\lambda', \dots} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) N_\lambda} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) N_\lambda'} \dots$$

On pose
$$\zeta_\lambda = \sum_{N_\lambda} e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_\lambda) N_\lambda} \quad (\text{I-13})$$

ζ_λ représente la fonction de partition, relative à un état quantique individuel λ . Cette écriture a l'avantage majeur de l'utilisation du formalisme grand canonique. Donc l'expression de la fonction de partition est :

$$Z_G = \prod_{\lambda} \zeta_{\lambda} \quad (\text{I-14})$$

I-4-1 Statistique de Fermi Dirac :

La statistique de Fermi Dirac est réalisée dans les systèmes de particules décrites par des fonctions d'ondes antisymétriques. Cette statistique régit le comportement des systèmes de fermions, particules indiscernables, de spin demi entier, obéissant au principe de Pauli.

Dans le cas des fermions, les valeurs possibles de N_λ dans la somme (I-13) sont $N_\lambda = 0$ ou $N_\lambda = 1$ du fait du principe de Pauli. On a donc :

$$\zeta_{\lambda}^{FD} = 1 + e^{-\alpha - \beta \varepsilon_{\lambda}} = 1 + ze^{-\beta \varepsilon_{\lambda}} \quad (\text{I-15})$$

La fonction de partition vérifie :

$$Z_G = \prod_{\lambda} \zeta_{\lambda}^{FD} = \prod_{\lambda} (1 + ze^{-\beta \varepsilon_{\lambda}}) \quad (\text{I-16})$$

On a aussi :

$$\log Z_G = \sum_{\lambda} \log(1 + ze^{-\beta \varepsilon_{\lambda}}) \quad (\text{I-17})$$

L'équation (I-5) permet alors de calculer le nombre total de particules N dans le système :

$$N = \sum_{\lambda} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_{\lambda}} + 1} = \sum_{\lambda} \bar{N}_{\lambda} \quad (\text{I-18})$$

Avec $\bar{N}_{\lambda}$ est le nombre d'occupation moyen de l'état λ .

I-4-2 Statistique de Bose Einstein :

La statistique de Bose Einstein est réalisée dans les systèmes décrits par des fonctions d'onde symétriques. A cette statistique obéissent les systèmes de particules indiscernables ayant un spin entier (bosons), pour lesquels aucune restriction n'est imposée au nombre de particules pouvant se trouver dans un état d'énergie ε_{λ} .

Pour le cas de bosons, chaque état individuel peut être occupé par un nombre quelconque de particules. N_{λ} peut prendre alors toutes les valeurs entières positives $N_{\lambda} = 0, 1, 2, \dots, \infty$.

A partir de l'équation (I-13) nous avons :

$$\zeta_{\lambda}^{BE} = \sum_{N_{\lambda}} \left(e^{-(\alpha + \beta \varepsilon_{\lambda})} \right)^{N_{\lambda}} = \sum_{N_{\lambda}} \left(z e^{-\beta \varepsilon_{\lambda}} \right)^{N_{\lambda}} \quad (\text{I-19})$$

Le calcul de ζ_{λ}^{BE} se ramène à une série géométrique de raison $(z e^{-\beta \varepsilon_{\lambda}})$ tel que $z e^{-\beta \varepsilon_{\lambda}} \ll 1$ pour $\mu < \varepsilon_0$ (où ε_0 représente l'énergie du niveau fondamental de $\hat{h}$) donc la série (I.19) est convergente.

$$\zeta_{\lambda}^{BE} = \frac{1}{1 - z e^{-\beta \varepsilon_{\lambda}}} \quad (\text{I-20})$$

La fonction de partition est alors :

$$Z_G = \prod_{\lambda} \frac{1}{1 - z e^{-\beta \varepsilon_{\lambda}}} \quad (\text{I-21})$$

Pour déterminer le nombre de particules, il faut utiliser l'équation (I-5). On a :

$$N = \sum_{\lambda} \frac{ze^{-\beta\epsilon_{\lambda}}}{1 - ze^{-\beta\epsilon_{\lambda}}} = \sum_{\lambda} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_{\lambda}} - 1} \quad (\text{I-22})$$

I-5 Limite classique :

Les distributions de Fermi Dirac et de Bose Einstein conduisent à un résultat identique [Bel93] pour le nombre moyen d'occupation des particules dans un état N_{λ} quand $z \ll 1$ (ou $N_{\lambda} \ll 1$).

$$N_{\lambda} = \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_{\lambda}} + a} \quad \text{avec } a = \begin{cases} +1 & \text{pour Fermi Dirac} \\ -1 & \text{pour Bose Einstein} \end{cases} \quad (\text{I-23})$$

Pour que N_{λ} soit très inférieur à 1, $z^{-1}e^{\beta\epsilon_{\lambda}}$ doit être très supérieur à 1 pour toutes valeurs de ϵ_{λ} ; ϵ_{λ} est l'énergie d'un état occupé par une particule. On a alors :

$$N_{\lambda} \simeq ze^{-\beta\epsilon_{\lambda}} \quad (\text{I-24})$$

C'est la fonction de distribution classique ; il s'agit néanmoins d'un résultat quantique. A partir de (I-24), nous allons retrouver les résultats obtenus pour le gaz parfait.

Nous remarquons que les valeurs grandes et négatives du potentiel chimique μ correspondent à un gaz bien décrit par la physique classique (distribution de Maxwell Boltzmann).

$$\mu \rightarrow -\infty \quad \text{donc} \quad N_{\lambda} \simeq ze^{-\beta\epsilon_{\lambda}}$$

A haute température, lorsque les effets quantiques ne se font plus sentir, la statistique de Bose-Einstein tend vers la statistique de Maxwell Boltzmann ; il en est de même pour la statistique de Fermi-Dirac qui régit les fermions.

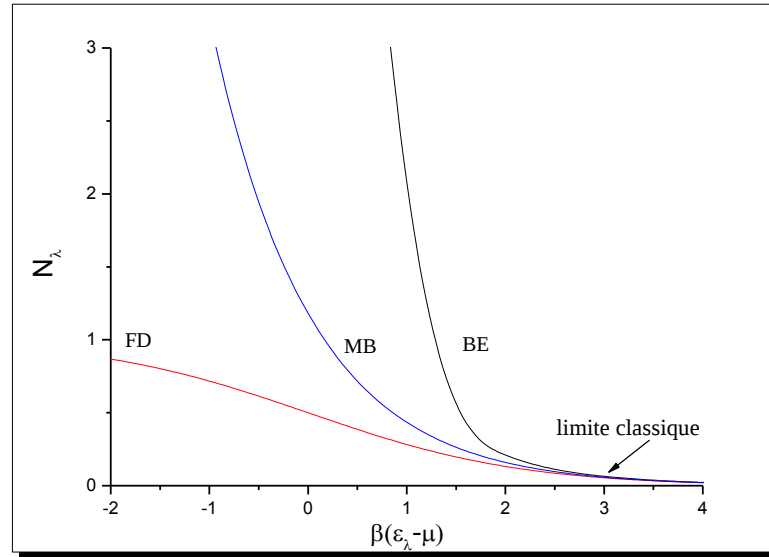


fig I-1 Distribution de Fermi Dirac et Bose Einstein et limite classique (MB)

I-6 Phénomène de condensation :

La condensation de Bose-Einstein est l'accumulation d'un nombre macroscopique d'atomes bosoniques dans le niveau d'énergie fondamental. Elle est obtenue à très basse température, lorsque la longueur d'onde thermique moyenne est de l'ordre de la distance entre particules.

Nous avons calculé le nombre total de particules pour un ensemble de bosons en équilibre thermodynamique et sans interactions :

$$N = \sum_i \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_i} - 1} = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{N}_i \quad (\text{I-25})$$

Où $z = e^{\beta \mu}$. Comme les nombres de particules sont positifs, quelque soit i on a $\epsilon_i - \mu > 0$ donc $\mu < \epsilon_i$. Si l'énergie de l'état fondamental est nulle $\epsilon_0 = 0$ alors $\mu < 0$, ce qui est équivalent à $z < 1$.

On peut séparer le nombre de particules N_0 dans l'état fondamental et le nombre de particules N_e dans les états excités et écrire :

$$N = \frac{z}{1-z} + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} - 1} \quad (\text{I-26})$$

Avec $N_0 = \frac{z}{1-z}$ Et $N_e = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon_i} - 1}$

Quand z augmente et prend une valeur proche de l'unité, nous voyons que le nombre de particules de l'état fondamental N_0 prend des valeurs considérables et de l'ordre d'une fraction non négligeable de N .

On peut voir facilement que N_e est une fonction croissante de z .

La condensation de Bose Einstein est obtenue lorsque $N = N_{e\max}$ où $N_{e\max}$ est la valeur maximale de N_e atteinte lorsque la valeur de la fugacité est $z = 1$:

$$N_0 = \frac{z}{1-z} \quad \text{implique} \quad z^{-1} = 1 + \frac{1}{N_0} \quad \text{Donc} \quad z = \frac{N_0}{N_0 + 1} \approx 1 \quad \text{où le potentiel chimique } \mu \rightarrow 0$$

$$N_{e\max} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{e^{-\beta\epsilon_i} - 1} \quad (\text{I-27})$$

Tant que le nombre de particules N du gaz est inférieur à $N_{e\max}$, les particules sont distribuées sur les états excités et le nombre de particules dans le fondamental est microscopique donc négligeable devant N . Quand le nombre de particules N devient supérieur à $N_{e\max}$, les états excités vont acquérir $N_{e\max}$; le reste des particules, soit $N_0 = N - N_{e\max}$ sera placé dans l'état fondamental dont l'occupation est alors macroscopique. Ce phénomène est la condensation de Bose Einstein. Il a été prévu théoriquement par Einstein en 1925 [Ein25]. Du fait de la très basse température nécessaire pour obtenir cette condensation, il a fallu attendre 1995 pour que des

physiciens en fassent une première réalisation expérimentale. Cette réalisation a relancé l'étude des propriétés des gaz à basse température, qui obéissent à la statistique quantique.

En statistique de Bose Einstein, le niveau de plus basse énergie à très basse température contient tous les bosons (cas limite de condensât de Bose Einstein).

I-7 Température critique T_c :

Pour déterminer la température de condensation T_c , il faut que la valeur maximale du nombre de particules dans l'ensemble des états excités soit inférieure ou égale au nombre total de particules $N \leq N_{e_{\max}} (T \leq T_c)$. Dans le cas $T \leq T_c$, un grand nombre de particules se condense dans l'état fondamental. D'une certaine façon, on assiste à une redistribution des particules depuis les états excités vers l'état fondamental, la fugacité restant très proche de l'unité ($T \leq T_c$). Pour $T > T_c$ le nombre de particule de l'état fondamental est négligeable devant la population des états excités. Par conséquent, la température critique caractérise une transition de phase. Cette transition de phase a été prévue par Einstein pour un gaz de bosons et l'effet de cette transition est l'apparition d'une nouvelle forme de la matière qui s'appelle condensât de Bose Einstein.

I-8 La longueur d'onde thermique de de Broglie:

La longueur d'onde thermique de De Broglie est un concept de la physique statistique et de la mécanique quantique. Elle représente la longueur d'onde de de Broglie moyenne des particules d'un gaz porté à une certaine température. Cette longueur d'onde thermique caractérise l'étalement spatial à mi hauteur du paquet d'onde associé à la particule.

D'après le principe de la dualité onde corpuscule, une particule possédant une quantité de mouvement p se voit associer une longueur d'onde $\lambda_{dB} = h / p$, h étant la constante

de Planck. Une particule peut être traitée comme une onde avec pour longueur d'onde celle de De Broglie. Pour un gaz porté à une température T , l'énergie typique d'une particule est de l'ordre de kT , k étant la constante de Boltzmann. La relation entre énergie E et quantité de mouvement d'une particule libre non relativiste de masse m étant $E = p^2 / 2m$, on peut alors définir la longueur d'onde thermique de De Broglie λ_{dB} d'une particule massique en équilibre d'un gaz comme :

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \quad (\text{I-28})$$

Où $1/\sqrt{2\pi}$ est introduit pour raisons de commodité (écriture plus pratique des équations).

La longueur thermique de De Broglie représente un moyen pour déterminer si le système doit être considéré de manière quantique ou classique. En effet, les effets quantiques commencent à être importants lorsque la longueur d'onde thermique de De Broglie devient comparable avec les autres longueurs caractéristiques du système, comme la distance moyenne entre particules. En particulier, sa valeur apparaît dans le calcul explicite où l'on regarde l'effet des corrections quantiques dans la définition des états d'énergie des particules d'un gaz confinées dans un volume V donné.

I-9 Relation entre la température et la longueur d'onde thermique de De Broglie:

A température élevée, la longueur d'onde de de Broglie est très petite devant la distance moyenne entre particules $n^{-1/3}$ (où $n = \frac{N}{V}$ est le nombre de particules par unité de volume). On a alors $n\lambda_{dB}^3 \ll 1$; dans ce cas il n'y a pas de condensation.

Par contre, quand la température T décroît, la longueur d'onde de de Broglie λ_{dB} croît, et pour une certaine valeur de T ($T = T_c$) on arrive à $n\lambda_{dB}^3 = 2.612$ [Tan97].

Ceci se produit lorsque le nombre de particules dans les états excités atteint sa valeur maximale donnée par l'expression (I-27) où l'on remplace la sommation par une intégrale.

Quand $T < T_c$, la longueur d'onde de de Broglie λ_{dB} croît encore, le nombre de particules de l'état fondamental prend une valeur macroscopique (condensation de Bose-Einstein).

I-10 Réalisation expérimentale de la condensation de Bose-Einstein :

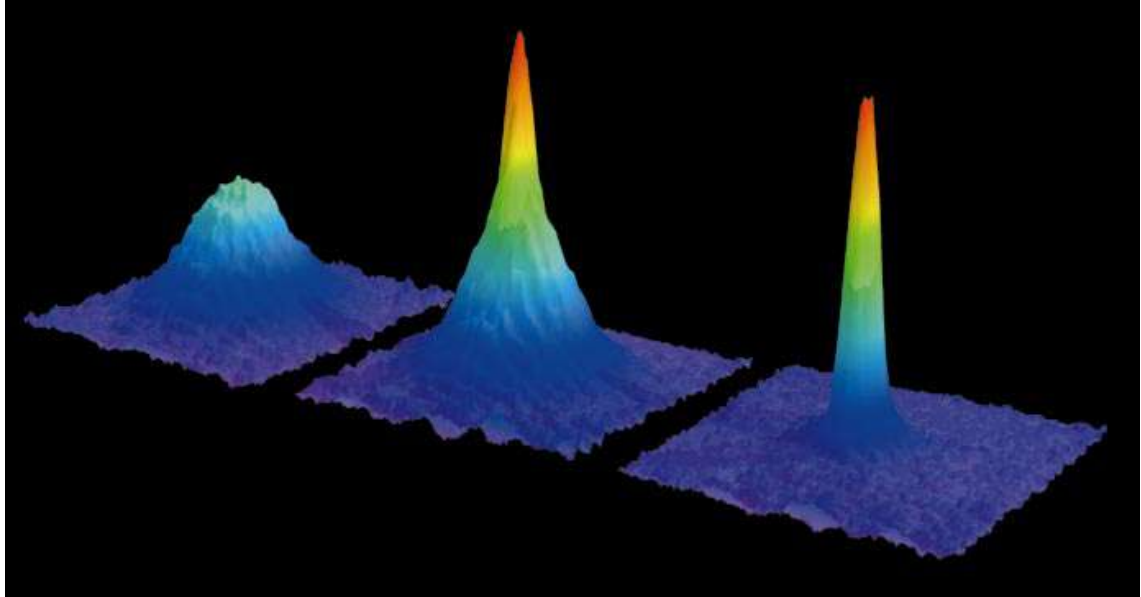


fig I-2 La condensation des atomes de sodium [Ket02]

Observation de la condensation de Bose-Einstein par imagerie. Le nombre total d'atomes à la transition de phase est d'environ $7 \cdot 10^5$, la température au point de transition est de $2\mu K$

La réalisation expérimentale des condensats a été possible grâce au développement des techniques de refroidissement d'atomes par laser. Les très basses températures obtenues ont permis d'atteindre le régime de condensation pour des gaz suffisamment dilués. Le laboratoire NIS/JILA (Boulder, Colorado, Etats-Unis), dirigé par Eric-Cornell et Carl Wieman, est parvenu à obtenir pendant quelques secondes un condensat de Bose-Einstein. La température du gaz était alors de l'ordre de $100nK$.

Le chercheur Wolfgang Ketterle étudie également, de son côté, « le refroidissement par laser et le piégeage des atomes froids » ainsi que la superfluidité dans les gaz à « basse température ». Il réalise avec son équipe la condensation de Bose Einstein pour des atomes de sodium. Ces trois chercheurs (Wieman, Cornell et

Ketterle), ont reçu en 2001 le prix Nobel de physique « pour la découverte de la condensation de Bose-Einstein dans les gaz et pour des avancées dans l'étude des propriétés de ces condensats ».

Chapitre II :

Gaz de bosons dans une boîte

II-1 Introduction :

La condensation de Bose Einstein est l'accumulation d'un nombre macroscopique d'atomes bosoniques dans le niveau d'énergie fondamental. Elle est obtenue à basse température, lorsque la longueur d'onde thermique moyenne est de l'ordre de la distance entre particules. Elle a été prévue théoriquement par Einstein en 1925 [Ein25]. Du fait des très basses températures nécessaires pour obtenir cette condensation, il a fallu attendre 1995 pour que des physiciens en fassent une première réalisation expérimentale [And95, And97].

Dans ce chapitre, nous considérons un gaz d'atomes bosoniques sans interaction dans des boîtes à une, deux et trois dimensions, de volume donné. Nous allons étudier les propriétés de ce gaz, en particulier son potentiel chimique et sa capacité calorifique. Ces propriétés sont habituellement étudiées dans la littérature en se plaçant dans le cas des dimensions macroscopiques où les niveaux d'énergie sont très serrés. Les sommations peuvent alors être remplacées par des intégrations sur l'espace des phases, en prenant un état par volume adéquat de cet espace. En ce qui nous concerne, nous effectuons les calculs en utilisant les expressions exactes des énergies, des dégénérescences et des sommations discrètes mises en jeu. En particulier, l'énergie du fondamental est non nulle. Nous proposons aussi une approximation qui prend en compte cette énergie non nulle du fondamental. Ces considérations conviennent bien aux systèmes de petites dimensions.

L'occupation du niveau d'énergie i [Sal01], [Her01] est :

$$n_i = \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \varepsilon_i} - 1} \quad (\text{II-1})$$

$\beta = \frac{1}{kT}$ où k est la constante de Boltzmann, T est la température absolue.

$\varepsilon_i = \varepsilon_0 i^2$ sont les niveaux d'énergie dans le cas à une dimension.

ε_0 est l'énergie de l'état fondamental [Tan77] telle que $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2}$.

Le nombre quantique i est un entier non nul, l est la longueur de la boîte et m la masse des particules.

$\hbar$ est la constante de Planck. On définit le potentiel chimique réduit par $\mu' = \frac{\mu}{\varepsilon_0}$.

Le potentiel chimique réduit μ' est déterminé à partir de la relation $N = \sum_{i=1}^{\infty} n_i$ pour conserver le nombre de particules.

La population du fondamental est :

$$N_0 = \frac{ze^{-\beta\epsilon_0}}{1 - ze^{-\beta\epsilon_0}}$$

Sachant que $N_0 > 0$

on a $ze^{-\beta\epsilon_0} < 1$ soit $z < e^{\beta\epsilon_0}$ (z étant la fugacité).

avec $z = e^{\beta\mu} = e^{a\mu'}$ donc on a toujours : $\mu < \epsilon_0$

II- Détermination du potentiel chimique et de la capacité à volume constant:

Nous avons commencé par déterminer le potentiel chimique réduit du gaz pour un nombre de particules donné en fonction de la température. Dans chaque cas, on fixe a (donc T) et on ajuste la valeur du potentiel chimique réduit μ' pour obtenir le nombre de particules fixé à une valeur mésoscopique ($10^4, 10^6$). Ayant déterminé le potentiel chimique réduit, nous utilisons sa valeur pour étudier la capacité calorifique à volume constant de ce gaz.

II-A Boîte à une dimension :

II-A-1 approximation dite classique (Littérature) $\epsilon_0 = 0$:

C'est l'approximation qui est donnée dans la littérature [Pit03]. On considère un système de dimensions macroscopiques. Les niveaux d'énergie sont alors très serrés ; on peut remplacer la somme par une intégrale sur l'espace des phases, en prenant un état par volume h^n de l'espace des phases (pour un système à n dimensions). Le nombre de particules total à une dimension est tel que :

$$N_1^c = \iint \frac{dx dp}{h} \frac{1}{z^{-1} \exp\left(\frac{\beta p^2}{2m}\right) - 1} = \frac{z}{1-z} + \sqrt{\frac{\pi}{4a}} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(z)^i}{\sqrt{i}} \quad (\text{II-2})$$

A très basse température, le potentiel chimique réduit $\mu' (z = e^{a\mu'})$ tend vers

zéro ($z \rightarrow 1$). Le premier terme est le nombre de particules dans l'état fondamental, nous trouvons ce terme pour $i = 0$ dans la sommation. Nous constatons que cette expression de N diverge : cette approximation n'est pas acceptable à basse température. Cette divergence entraîne que la condensation de Bose Einstein n'est pas présente dans les boîtes à une dimension (dans la limite thermodynamique).

Avec les mêmes approximations, l'énergie interne de ce système peut être écrite sous la forme [Hua63] :

$$\frac{U_1^c}{NkT} = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{4a} \right)^{1/2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{z^i}{i^{3/2}} \quad (\text{II-3})$$

Cette expression converge mais sa dérivée par rapport à la température diverge donc cette approximation n'est pas adaptée aux systèmes sans interaction dans une boîte à une dimension, de longueur finie.

II-A-2 Sommation exacte $\varepsilon_0 \neq 0$:

Les niveaux d'énergie sont donnés par la relation : $\varepsilon_i = \varepsilon_0 i^2$

En utilisant la variable a sans dimension qui est définie comme suit : $a = \beta \varepsilon_0$, on a :

$$N_{01}^{ex} = \frac{1}{z^{-1} e^a - 1} = \frac{z e^{-a}}{1 - z e^{-a}} \quad (\text{II-4})$$

La population des états excités est :

$$N_{e1}^{ex} = \sum_{i=2}^{\infty} \frac{z e^{-ai^2}}{1 - z e^{-ai^2}} \quad (\text{II-5})$$

La condensation de Bose Einstein est obtenue lorsque $N = N_{e\max}$ où $N_{e\max}$ est la valeur maximale de N_e atteinte lorsque $z \rightarrow e^a$. Donc :

$$N_{e_{\max 1}}^{ex} = \sum_{i=2}^{\infty} \frac{1}{e^{a(i^2-1)} - 1} \quad (\text{II-6})$$

Energie totale U_1^{ex} :

$$U_1^{ex} = \sum_{i=1}^{\infty} n_i \varepsilon_i = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_0 i^2 z e^{-ai^2}}{1 - z e^{-ai^2}} \quad (\text{II.7})$$

L'énergie interne de ce système peut être écrite sous la forme :

$$\frac{U_1^{ex}}{NkT} = \frac{a}{N} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{i^2 z e^{-ai^2}}{1 - z e^{-ai^2}} \quad (\text{II.8})$$

Capacité calorifique à volume constant:

$$C_v = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{N,V} \quad (\text{II.9})$$

On dérive l'énergie totale, on trouve:

$$\frac{C_{v1}^{ex}}{Nk} = \frac{a}{N} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{i^2 \left((a z i^2) + T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) \right) e^{-ai^2}}{(1 - z e^{-ai^2})^2} \quad (\text{II.10})$$

Pour calculer la capacité calorifique à volume constant on doit déterminer la dérivée de la fugacité par rapport à la température T .

Pour exprimer cette dérivée, il faut dériver le nombre de particules N (N est constant) :

$$\left. \frac{\partial N}{\partial T} \right|_{N,V} = 0 \quad (\text{II-11})$$

Ce qui conduit à :

$$\left. \frac{\partial N}{\partial T} \right|_{N,V} = \frac{\partial N}{\partial a} \left(\frac{\partial a}{\partial T} \right) + \frac{\partial N}{\partial z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) \quad (\text{II-12})$$

Sachant que le nombre de particules est noté N_1^{ex} .

$$N_1^{ex} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} e^{ai^2} - 1} \quad (\text{II-13})$$

Nous avons :

$$\left. \frac{\partial N_1^{ex}}{\partial T} \right|_{N,V} = - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\left(-\frac{a}{T} (i^2 z^{-1} e^{ai^2}) - z^{-2} e^{ai^2} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) \right)}{\left(z^{-1} e^{ai^2} - 1 \right)^2} = 0 \quad (\text{II-14})$$

On a utilisé : $\frac{\partial a}{\partial T} = -\frac{a}{T}$

La dérivée de la fugacité par rapport à la température est :

$$\left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) = -\frac{a}{T} \frac{\sum_{i=1}^{\infty} \frac{i^2 z e^{-ai^2}}{\left(1 - z e^{-ai^2} \right)^2}}{\sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{-ai^2}}{\left(1 - z e^{-ai^2} \right)^2}} \quad (\text{II-15})$$

On note :

$$T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) = -a z_1^{ex} \quad (\text{II-16})$$

Avec :

$$z_1^{ex} = \frac{\sum_{i=1}^{\infty} \frac{i^2 z e^{-ai^2}}{\left(1 - z e^{-ai^2} \right)^2}}{\sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{-ai^2}}{\left(1 - z e^{-ai^2} \right)^2}} \quad (\text{II-17})$$

En utilisant la relation précédente dans (II-10) nous trouvons :

$$\frac{C_{v1}^{ex}}{Nk} = \frac{a^2}{N} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{i^2 e^{-ai^2} (i^2 z - z_1^{ex})}{(1 - z e^{-ai^2})^2} \quad (II-18)$$

Calcul numérique :

Nous avons établi un programme fortran pour calculer la fraction condensée N_0^{ex} / N , l'énergie totale U_1^{ex} , le potentiel chimique réduit μ_1^{ex} et la capacité calorifique à volume constant C_{v1}^{ex} pour un nombre de particules donné. On donne des valeurs à a et on effectue la sommation sur les différents nombres quantiques jusqu'à la convergence. Pour les faibles valeurs de a , les sommations se font sur des nombres d'itération très grands et le calcul dure longtemps.

Les résultats sont donnés sur les graphes suivants :

Nous choisissons deux valeurs mésoscopiques de nombre de particules $N = 10^4$ et $N = 10^6$, pour étudier le comportement et la variation des grandeurs thermodynamiques en fonction de la température T .

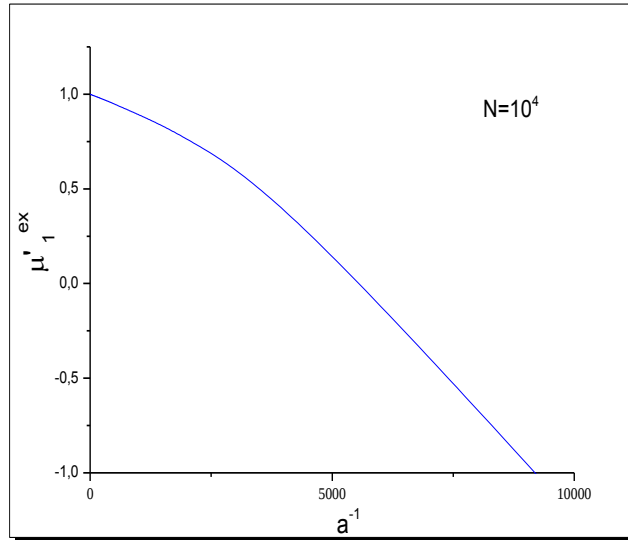


fig II-1 : Variation du potentiel chimique réduit en fonction de la température dans une boîte à une dimension ($N = 10^4$).

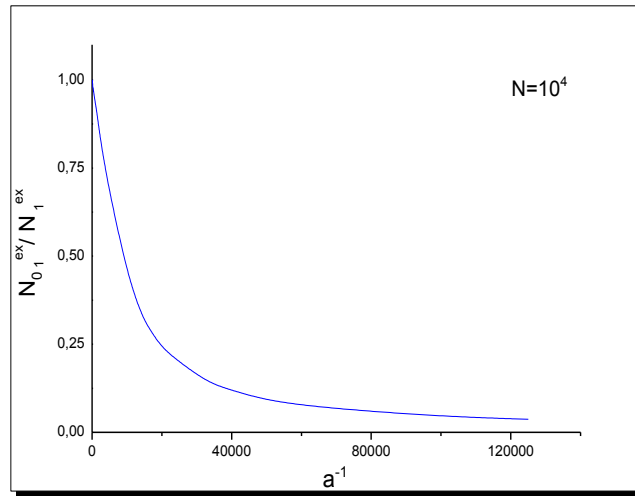


fig II-2 : Fraction de particules accumulées dans le fondamental en fonction de la température T dans le cas à une dimension ($N = 10^4$).

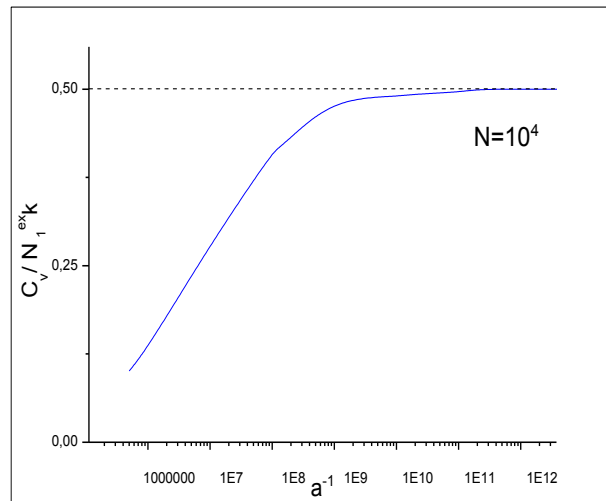


fig II-3 : Variation de C_v^{ex}/Nk en fonction de la température T dans le cas à une dimension.

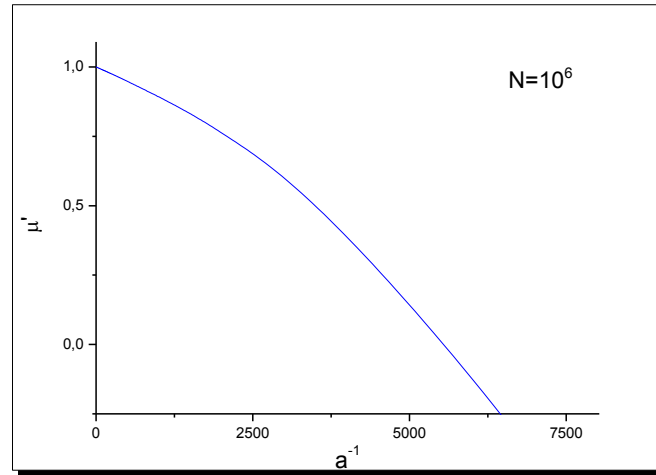


fig II-4 : Variation de $\mu'_1{}^{ex}$ en fonction de la température T dans une boîte à une dimension ($N = 10^6$).

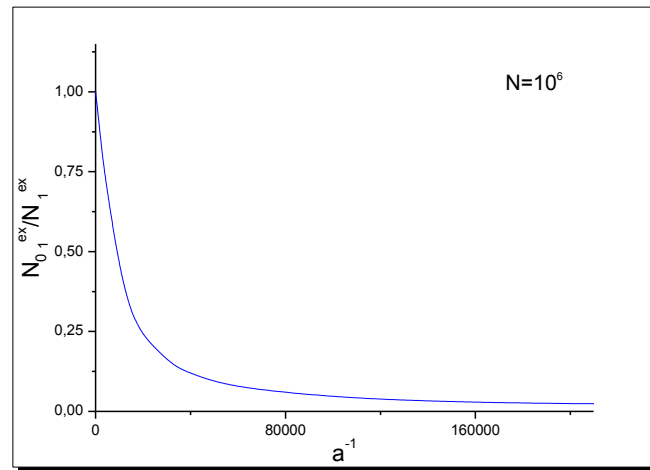


fig II-5 : Fraction d'atomes accumulées dans l'état fondamental en fonction de la température T pour une boîte à une dimension ($N = 10^6$).

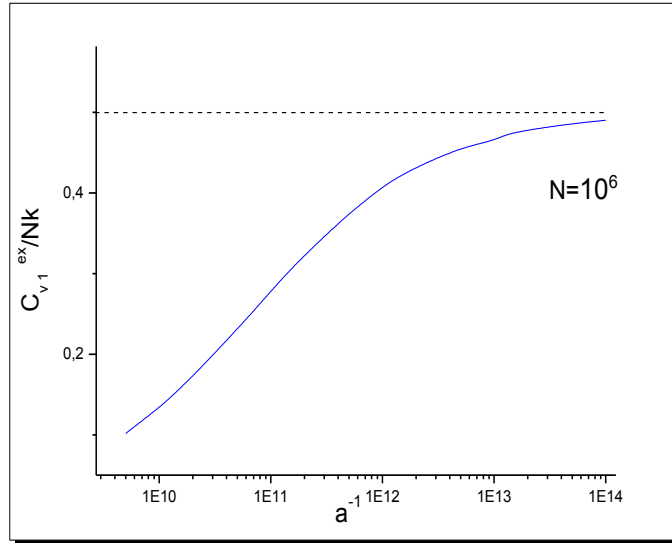


fig II-6 : Variation de C_{v1}^{ex} / Nk en fonction de la température T dans une boîte à une dimension ($N = 10^6$)

Nous observons que C_{v1}^{ex} / Nk dans le cas d'une boîte à une dimension croît uniformément de zéro à la valeur limite 0.5 en fonction de la température T .

Conclusion:

Il n'existe pas de condensation de Bose Einstein pour le gaz de bosons sans interaction dans une boîte à une dimension. (N_e diverge quand $z \rightarrow e^a$ dans la limite thermodynamique). La dérivée de la capacité calorifique est continue.

II-A-3 Notre approximation $\varepsilon_0 \neq 0$:

Nous réécrivons d'abord l'expression de N sous la forme qui suit :

$$N_1^{ap} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} \exp(ai^2) - 1} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} z^j e^{-aji^2} \quad (\text{II-19})$$

En utilisant la formule de sommation d'Euler Mac- Laurin au premier ordre [Abr70] (appendice C), nous transformons la sommation en intégrale comme suit :

$$N_1^{ap} = \sum_{j=1}^{\infty} z^j \int_1^{\infty} e^{-ajx^2} dx = \sum_{j=1}^{\infty} z^j \left\{ \int_0^{\infty} e^{-ajx^2} dx - \int_0^1 e^{-ajx^2} dx + \frac{e^{-aj}}{2} \right\} \quad (\text{II-20})$$

En utilisant le changement de variable $u^2 = ajx^2$ et $du = \sqrt{aj} dx$ donc on a :

$$\begin{cases} \int_0^{\infty} e^{-ajx^2} dx = \frac{1}{\sqrt{aj}} \int_0^{\infty} e^{-u^2} du = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{aj}} \\ \int_0^1 e^{-ajx^2} dx = \frac{1}{\sqrt{aj}} \int_0^{\sqrt{aj}} e^{-u^2} du = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{aj}} \operatorname{erf}(\sqrt{aj}) \end{cases} \quad (\text{II-21})$$

En portant (II.21) dans (II.20) , nous avons :

$$N_1^{ap} = \sum_{j=1}^{\infty} z^j \left(\sqrt{\frac{\pi}{4a}} \frac{1 - \operatorname{erf}(\sqrt{aj})}{\sqrt{j}} + \frac{e^{-aj}}{2} \right) \quad (\text{II-22})$$

où le nombre de particules dans l'état fondamental est : $N_{01}^{ap} = \frac{z e^{-a}}{1 - z e^{-a}}$ (II-22-1)

Le nombre de particule dans les états excités est :

$$N_{1excites}^{ap} = \sum_{l=1}^{\infty} z^l e^{-al} \left(\sqrt{\frac{\pi}{al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{4al})) + e^{-4al} \right) + \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{4al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \quad (\text{II-22-2})$$

Où erf est la fonction erreur [Rei65]. Cette expression de N reste convergente quand $z \rightarrow e^a$ donc $\mu' \rightarrow 1$ (la plus grande valeur de μ' est maintenant 1 et non plus zéro).

L'énergie interne est donnée par l'expression :

$$U_1^{ap} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_0 i^2}{z^{-1} e^{ai^2} - 1} = \varepsilon_0 \sum_{j=1}^{\infty} z^j \sum_{i=1}^{\infty} i^2 e^{-aji^2} \quad (\text{II-23})$$

En utilisant :

$$\frac{\partial}{\partial a} e^{-aji^2} = -i^2 e^{-aji^2}$$

On peut écrire l'équation (II-23) comme suit :

$$\frac{U_1^{ap}}{kT} = \frac{-\varepsilon_0}{kT} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j} \frac{\partial}{\partial a} \sum_{i=1}^{\infty} e^{-aji^2} \quad (\text{II-24})$$

En remplaçant la sommation par une intégrale suivant la formule d'Euler Mac-Laurin au premier ordre, nous trouvons :

$$\frac{U_1^{ap}}{kT} = -a \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j} \frac{\partial}{\partial a} \left(\int_1^{\infty} e^{-ajx^2} dx + \frac{e^{-aj}}{2} \right) \quad (\text{II-25})$$

Comme l'intégrale est donnée par (II-22), on obtient :

$$\frac{U_1^{ap}}{kT} = -a \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j} \frac{\partial}{\partial a} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4aj}} \left(1 - \text{erf}(\sqrt{aj}) \right) + \frac{e^{-aj}}{2} \right) \quad (\text{II-26})$$

Pour exprimer l'énergie interne on a besoin de connaître

$$\frac{\partial}{\partial T} \text{erf}(\sqrt{aj}) = \frac{\partial}{\partial a} \text{erf}(\sqrt{aj}) \frac{\partial a}{\partial T} \quad (\text{II-27})$$

La dérivée de la fonction erf par rapport à la variable a est:

$$\frac{\partial}{\partial a} \text{erf}(\sqrt{aj}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-aj} \frac{\partial}{\partial a} (\sqrt{aj}) = \sqrt{\frac{j}{\pi a}} e^{-aj} \quad \text{et} \quad \frac{\partial a}{\partial T} = -\frac{a}{T} \quad (\text{II-28})$$

En portant (II-28) dans l'équation (II-27), nous trouvons :

$$\frac{\partial}{\partial T} \text{erf}(\sqrt{aj}) = \sqrt{\frac{j}{\pi a}} e^{-aj} \left(-\frac{a}{T} \right) = -\sqrt{\frac{ja}{\pi}} \frac{e^{-aj}}{T} \quad (\text{II-29})$$

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1 - \text{erf}(\sqrt{aj})}{\sqrt{a}} \right) = \frac{1}{T} \left\{ \sqrt{\frac{j}{\pi}} e^{-aj} + \left(1 - \text{erf}(\sqrt{aj}) \right) \frac{1}{2\sqrt{a}} \right\} \quad (\text{II-30})$$

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{(ze^{-a})^j}{j} \right) = \sum_{j=1}^{\infty} z^j (e^{-a})^j \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial T} + \sum_{j=1}^{\infty} z^j e^{-aj} \frac{a}{T} \quad (\text{II-31})$$

Nous dérivons le terme entre parenthèse :

$$\frac{U_1^{ap}}{kT} = -a \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j} \left(\frac{-1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{4aj}} \left(1 - \text{erf}(\sqrt{aj}) \right) - \frac{e^{-aj}}{2a} - \frac{je^{-aj}}{2} \right) \quad (\text{II-32})$$

L'énergie interne devient :

$$\frac{U_1^{ap}}{kT} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{2j} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4aj}} \left(1 - \text{erf}(\sqrt{aj}) \right) + (aj+1)e^{-aj} \right) \quad (\text{II-33})$$

La capacité calorifique à volume constant est donnée par le calcul suivant :

$$\frac{C_v}{Nk} = \frac{1}{Nk} \left. \frac{\partial U(T, a, z)}{\partial T} \right|_{N, V}$$

La dérivée partielle de l'énergie est :

$$\frac{C_v}{Nk} = \frac{1}{Nk} \left(\frac{\partial U}{\partial T} + \frac{\partial U}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial T} + \frac{\partial U}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial T} \right) \Big|_{N, V}$$

En utilisant les équations (II-29), (II-30) et (II-31) nous avons :

$$\frac{C_{v1}^{ap}}{k} = \left(\frac{\sqrt{\pi}}{4} \sum_{j=1}^{\infty} z^j \frac{1 - \text{erf}(\sqrt{aj})}{\sqrt{a} j^{3/2}} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(ze^{-a})^j}{j} + \left[\sum_{j=1}^{\infty} z^j (e^{-a})^j \frac{T}{2z} \frac{\partial z}{\partial T} + \frac{a}{2} \sum_{j=1}^{\infty} z^j e^{-aj} \right] + \frac{\sqrt{\pi}}{4} \left[\sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^{1/2}} \left(\frac{1 - \text{erf}(\sqrt{aj})}{\sqrt{a}} \right) \frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{z^j}{j^{3/2}} \left\{ \sqrt{\frac{j}{\pi}} e^{-aj} + (1 - \text{erf}(\sqrt{aj})) \frac{1}{2\sqrt{a}} \right\} \right] \right) \quad (\text{II-34})$$

Nous pouvons écrire la capacité calorifique à volume constant sous la forme suivante :

$$\frac{C_{v1}^{ap}}{Nk} = \frac{1}{N} \left(\sqrt{\frac{\pi}{16a}} \sum_{j=1}^{\infty} z^j \frac{1 - \text{erf}(\sqrt{aj})}{\sqrt{j}} \left(\frac{3}{2j} + \frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right) + \frac{3}{4} g_1(ze^{-a}) + \frac{1}{2} g_0(ze^{-a}) \left(a + \frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right) \right) \quad (\text{II-35})$$

où le terme $\frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T}$ a pour expression :

$$\frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{1}{2} \frac{\sum_{j=1}^{\infty} z^j \left(\sqrt{\frac{\pi}{4aj}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{aj})) \right) + ag_0(z e^{-a})}{\sum_{j=1}^{\infty} j z^j \left(\sqrt{\frac{\pi}{4aj}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{aj})) + \frac{e^{-aj}}{2} \right)} \quad (\text{II-36})$$

La fonction $g_n(\alpha)$ est telle que :

$$g_n(\alpha) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{j^n}$$

Nous présentons, dans les figures qui suivent, la variation de la capacité calorifique à volume constant dans la sommation exacte et par notre approximation.

Nous constatons qu'elles sont confondues à haute température et légèrement différentes à très basse température pour les cas sommation exacte et notre approximation, alors que le résultat de la littérature diverge [Dao09b].

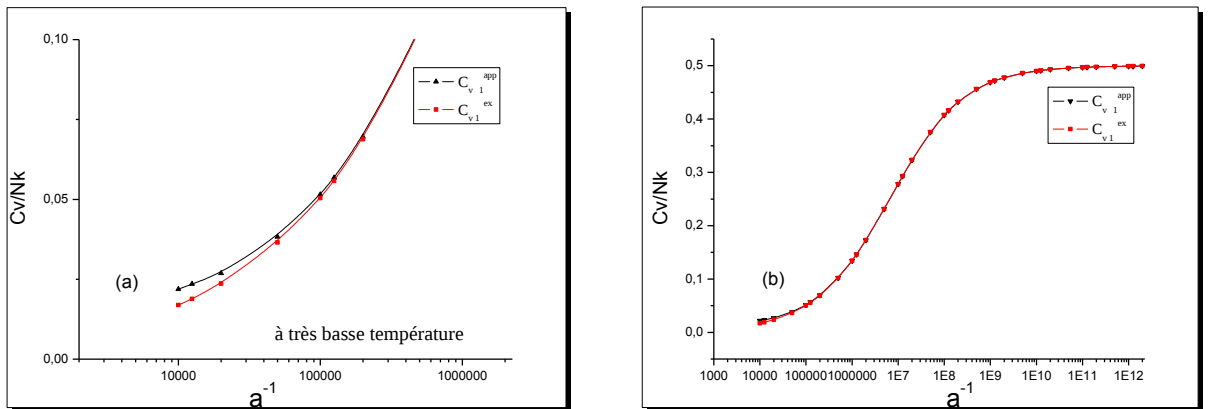


fig II-7 : Variation de la capacité calorifique à volume constant en fonction de la température T dans une boîte à une dimension ; (a) est un agrandissement de la courbe à très basse température.

Conclusion :

Nous avons considéré un système de N bosons, de masse m , sans interaction dans une boîte à une dimension et de longueur finie L . Nous avons déterminé une expression approchée de N_1^{ap} puis de l'énergie interne U_1^{ap} qui utilise les niveaux d'énergie exacts ; en particulier, une énergie du fondamental non nulle. Nous obtenons des expressions de N puis de la capacité calorifique à volume constant qui ne divergent pas lorsque $z \rightarrow e^a$ et que a est non nul (V fini). Si a est nul (limite thermodynamique) l'expression de N diverge. Ces expressions de N_1^{ap} et de C_{v1}^{ap} sont proches des valeurs exactes à haute température ; la différence avec les valeurs exactes est faible à basse température (l'écart relatif moyen de la capacité calorifique est autour de 1% ; il est de 22% à très basse température). Notre approximation est meilleure que celle utilisée dans la littérature car cette dernière conduit à des expressions de grandeurs thermodynamiques qui divergent alors que la notre donne des expressions qui convergent et qui sont proches des valeurs exactes.

II- B Boite à deux dimensions :**II-B-1 Approximation dite classique (Littérature) $\varepsilon_0 = 0$:**

Le nombre de particules total à deux dimensions est tel que [Hun63]:

$$N_2^c = \iint \frac{\vec{dx} \vec{dp}}{h^2} \frac{1}{z^{-1} \exp\left(\frac{\beta p^2}{2m}\right) - 1} = \frac{z}{1-z} + \frac{\pi}{4a} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{z^i}{i} \quad (\text{II-37})$$

Le premier terme de l'équation (II-37) est le nombre de particule dans l'état fondamental et le deuxième terme représente le nombre de particule dans les états excités. A la limite thermodynamique quand $z \rightarrow 1$ le deuxième terme diverge, dans ce cas il n'y a pas condensation de Bose-Einstein dans une boîte à deux dimensions.

Pour le système à deux dimensions, on a l'énergie de l'état fondamental qui est prise nulle donc cette expression de l'énergie interne est écrite sous la forme :

$$\frac{U_2^c}{NkT} = \left(\frac{\pi}{4a} \right) \sum_{i=1}^{\infty} \frac{z^i}{i^2} \quad (\text{II-38})$$

Cette expression converge mais sa dérivée par rapport à la température diverge quand $z \rightarrow 1$ donc cette estimation n'est pas adaptée aux systèmes sans interaction dans une boîte à deux dimensions de longueur finie.

II-B-2 Sommation exacte $\varepsilon_0 \neq 0$:

Les niveaux d'énergies sont donnés par la relation :

$$\varepsilon_{i,j} = \varepsilon_0 (i^2 + j^2)$$

Le nombre total de particules s'écrit :

$$N = N_{0\ 2}^{ex} + N_{e\ 2}^{ex}$$

L'occupation du fondamental ($i=1, j=1$) est :

$$N_{0\ 2}^{ex} = \frac{1}{z^{-1}e^{2a} - 1} \quad (\text{II-39})$$

L'occupation des états excités :

$$N_{e\ 2}^{ex} = \sum_{i=2}^{\infty} \frac{2}{z^{-1}e^{a(i^2+1)} - 1} + \sum_{i=2}^{\infty} \sum_{j=2}^{\infty} \frac{1}{z^{-1}e^{a(i^2+j^2)} - 1} \quad (\text{II-40})$$

L'énergie totale U_2^{ex} :

$$\frac{U_2^{ex}}{NkT} = \frac{a}{N} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{i^2 + j^2}{z^{-1}e^{a(i^2+j^2)} - 1} \quad (\text{II-41})$$

Capacité calorifique à volume constant:

D'après la relation (II.9), nous obtenons à :

$$\left. \frac{C_v}{Nk} \right|_{N,V}^{ex} = \frac{a}{N} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(i^2 + j^2) e^{-a(i^2+j^2)} \left(a(i^2 + j^2) z + \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) T \right)}{\left(1 - z e^{a(i^2+j^2)} \right)^2} \quad (\text{II-42})$$

Pour avoir la capacité calorifique à volume constant il faut utiliser la dérivée de la fugacité par rapport à la température T .

La dérivée de la fugacité :

$$\left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) = -\frac{a}{T} \frac{\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} z \frac{(i^2 + j^2) e^{-a(i^2 + j^2)}}{\left(1 - z e^{-a(i^2 + j^2)}\right)^2}}{\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{a(i^2 + j^2)}}{\left(1 - z e^{-a(i^2 + j^2)}\right)^2}} \quad (\text{II-43})$$

On note :

$$T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) = -a z'_2{}^{ex}$$

On a alors :

$$z'_2{}^{ex} = \frac{\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} z \frac{(i^2 + j^2) e^{-a(i^2 + j^2)}}{\left(1 - z e^{-a(i^2 + j^2)}\right)^2}}{\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{a(i^2 + j^2)}}{\left(1 - z e^{-a(i^2 + j^2)}\right)^2}} \quad (\text{II-44})$$

Nous pouvons écrire la capacité calorifique à volume constant en utilisant la relation

(II.44). Elle est telle que :

$$\left. \frac{C_{v,2}^{ex}}{Nk} \right|_{N,V} = \frac{a^2}{N} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(i^2 + j^2) e^{-a(i^2 + j^2)} \left((i^2 + j^2) z - z'_2{}^{ex} \right)}{\left(1 - z e^{a(i^2 + j^2)} - 1\right)^2} \quad (\text{II-45})$$

Calcul numérique :

Pour le cas à deux dimensions nous avons établi un programme fortran pour calculer la fraction condensée $N_{0,2}^{ex} / N$, l'énergie totale U_2^{ex} , le potentiel chimique réduit μ_2^{ex} et la capacité calorifique $C_{v,2}^{ex}$.

Les résultats sont donnés sur les graphes suivants :

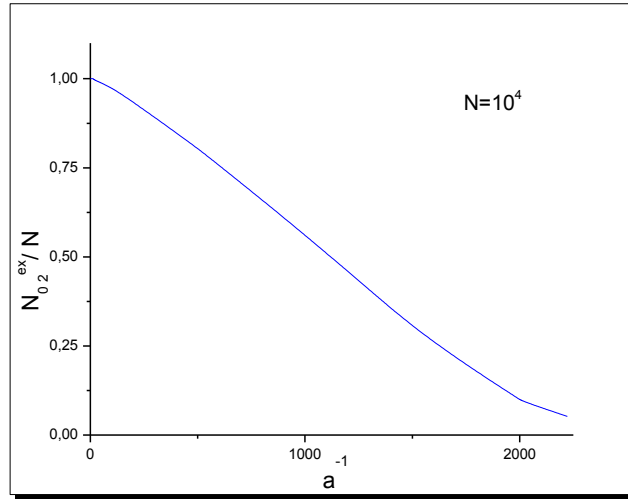


fig II-8 : Fraction de particules accumulées dans le fondamental en fonction de la température T dans le d'une boîte (cas à deux dimensions).

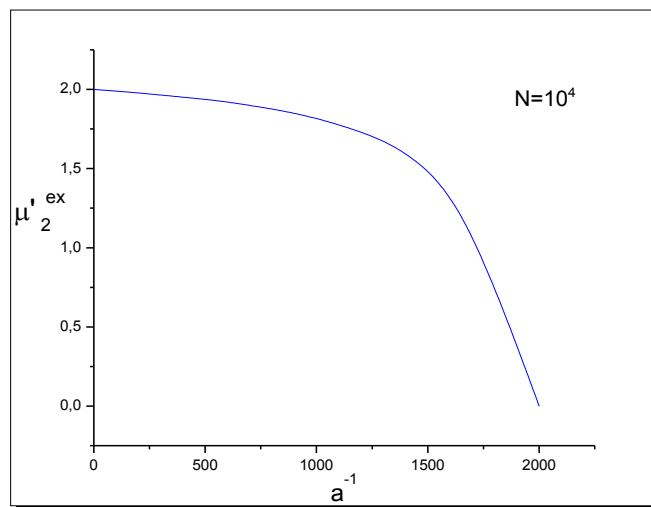


fig II-9 : Potentiel chimique réduit en fonction de la température T pour une boîte à deux dimensions.

μ' décroît lentement et uniformément en fonction de la température T puis décroît brusquement.

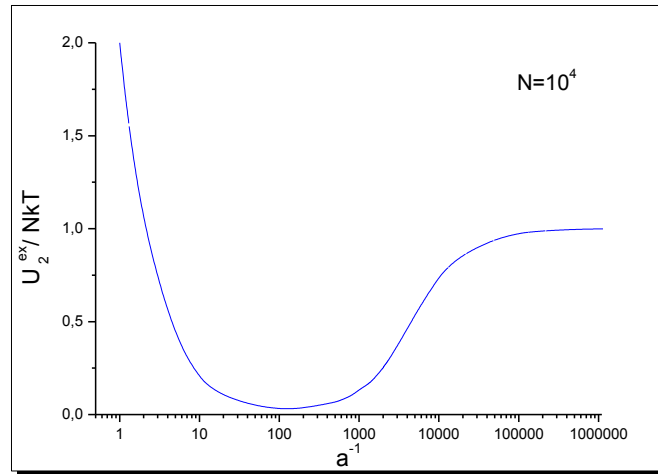


fig II-10 : Variation de l'énergie interne en fonction de la température T pour le cas d'une boîte à deux dimensions ($N = 10^4$).

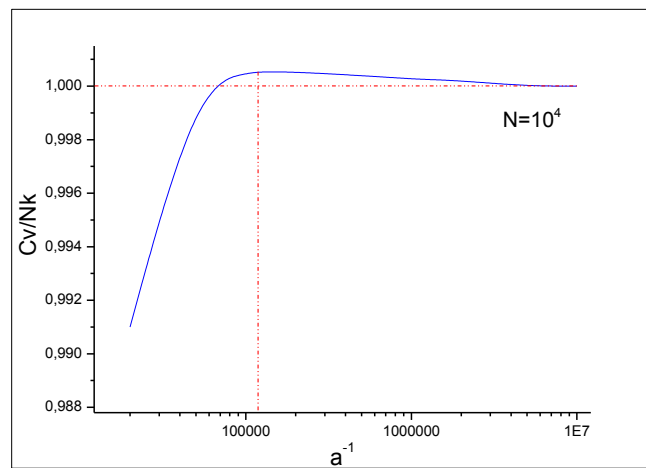


fig II-11 : Courbe représentant la variation de la capacité calorifique à volume constant C_{v2}^{ex} / Nk en fonction de la température T (cas à deux dimensions).

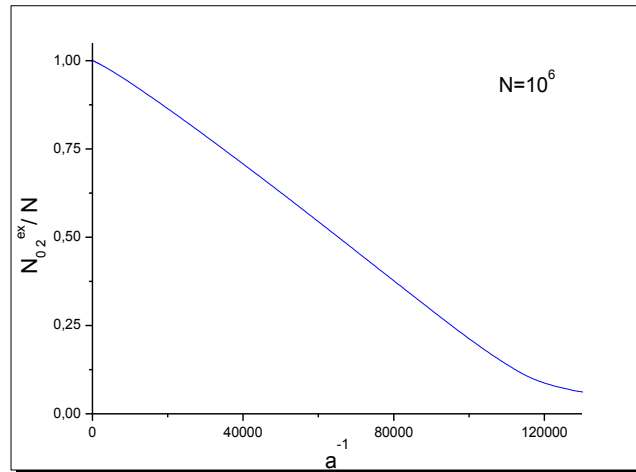


fig II-12: Fraction de particules accumulées dans l'état fondamental en fonction de la température T (cas à deux dimensions).

Dans ce cas, la fraction d'atomes accumulés dans l'état fondamental décroît linéairement en fonction de la température T , et nous observons la forme de la fraction condensée dans une boîte à deux dimensions comme dans un piège harmonique à une dimension [Ing97, Red09].

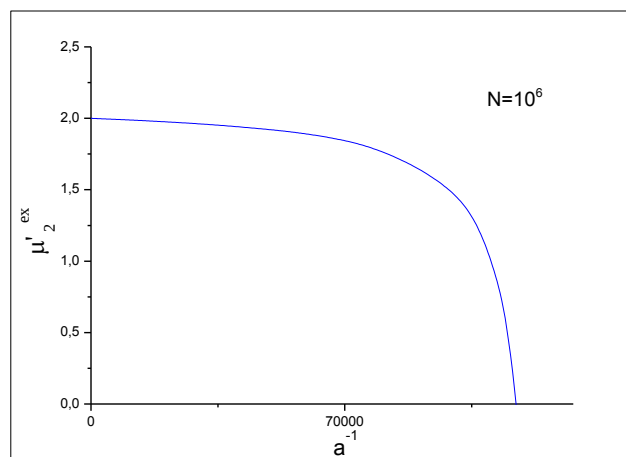


fig II-13 : Variation du potentiel chimique réduit en fonction de la température T (cas de boîte à deux dimensions (somme exacte)).

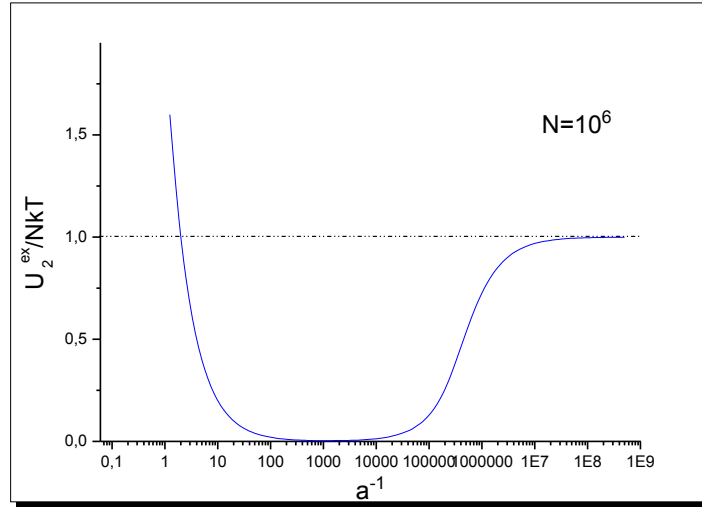


fig II-14 : Variation de l'énergie totale en fonction de la température T (cas deux dimensions (sommmation exacte)).

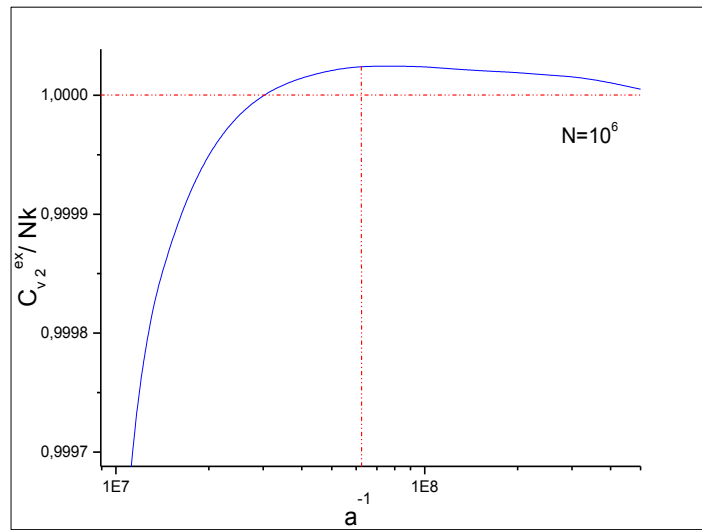


fig II-15 : Variation de C_{v2}^{ex}/Nk en fonction de la température T dans le cas à une boîte à deux dimensions.

Nous avons constaté que C_{v2}^{ex}/Nk croît rapidement puis décroît uniformément pour redevenir constante à la valeur limite 1. Elle est à dérivée positive entre 0 à $1.25 \cdot 10^5$

pour $N=10^4$ et $6.7 \cdot 10^7$ pour $N=10^6$ et négative ailleurs puis tend vers 1 à haute température [Dao09a].

II-B-3 Notre approximation $\varepsilon_0 \neq 0$:

Le nombre de particules est :

$$N_2^{ap} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} \exp(a(i^2 + j^2)) - 1} \quad (\text{II-46})$$

On peut l'écrire sous la forme :

$$N_2^{ap} = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} z^l e^{-al(i^2 + j^2)} \quad (\text{II-47})$$

En utilisant la formule de sommation d'Euler Mac-Laurin, au premier ordre, nous transformons la sommation en intégrale comme suit :

$$N_2^{ap} = \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\int_1^{\infty} e^{-alx^2} dx + \frac{e^{-al}}{2} \right) \left(\int_1^{\infty} e^{-aly^2} dy + \frac{e^{-al}}{2} \right) \quad (\text{II-48})$$

Le nombre de particules total est alors:

$$N_2^{ap} = \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \quad (\text{II-49})$$

Avec le nombre de particule dans l'état fondamental s'écrit sous la forme :

$$N_{02}^{ap} = \frac{z e^{-2a}}{1 - z e^{-2a}} \quad (\text{II-49-1})$$

Le nombre de particule dans les états excités est :

$$N_{2excites}^{ap} = \sum_{l=1}^{\infty} z^l e^{-al} \left(\sqrt{\frac{\pi}{al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{4al})) + e^{-4al} \right) + \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{4al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \quad (\text{II-49-2})$$

L'énergie interne :

$$U_2^{ap} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_0 (i^2 + j^2)}{z^{-1} \exp(a(i^2 + j^2)) - 1} = \varepsilon_0 \sum_{l=1}^{\infty} z^l \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} (i^2 + j^2) e^{-al(i^2 + j^2)} \quad (\text{II-50})$$

On divisee par $\beta = 1/kT$, nous trouvons :

$$\frac{U_2^{ap}}{kT} = \frac{\varepsilon_0}{kT} \sum_{l=1}^{\infty} z^l \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} (i^2 + j^2) e^{-a(i^2 + j^2)} = -a \sum_{l=1}^{\infty} z^l \frac{\partial}{\partial a} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-a(i^2 + j^2)} \quad (\text{II-51})$$

En remplaçant la sommation par une intégrale suivant la formule d'Euler Mac-Laurin au 1^{er} ordre nous obtenons :

$$\frac{U_2^{ap}}{kT} = -a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \frac{\partial}{\partial a} \left(\left(\int_1^{\infty} e^{-alx^2} dx + \frac{e^{-al}}{2} \right) \left(\int_1^{\infty} e^{-aly^2} dy + \frac{e^{-al}}{2} \right) \right) \quad (\text{II-52})$$

En effectuant les intégrales, on a :

$$\frac{U_2^{ap}}{kT} = -a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \frac{\partial}{\partial a} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \quad (\text{II-53})$$

On dérive le terme entre parenthèses en fonction de a :

$$\frac{U_2^{ap}}{kT} = -a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(2 \left(\frac{-\left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) \right)}{2a} - \frac{e^{-al}}{2a} - \frac{l}{2} e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right) \right) \quad (\text{II-54})$$

Donc l'expression de l'énergie interne s'écrit :

$$\frac{U_2^{ap}}{kT} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + (al + 1) e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right) \right) \quad (\text{II-55})$$

Capacité calorifique à volume constant :

On dérive l'énergie interne par rapport à la température, la capacité calorifique à volume constant est :

$$\begin{aligned}
 \frac{C_{v,2}^{ap}}{k} = & \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right) \right) \\
 & + \left(\frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right) \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right) \right) \\
 & + a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\left(\frac{\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + e^{-al}}{2a} + al^2 e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right) \right) \quad (\text{II-56}) \\
 & + a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\frac{\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al}))}{2a} + \frac{e^{-al}}{2a} + \frac{l}{2} e^{-al} \right) \right)
 \end{aligned}$$

Cette expression peut être simplifiée, et écrite sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \frac{C_{v,2}^{ap}}{k} = & \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right) \right) \\
 & + \frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right) \right) \quad (\text{II-57}) \\
 & + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{2l} \left(\left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (2(al)^2 + 1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right) \right) \\
 & + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{2l} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right)^2
 \end{aligned}$$

En outre, le terme $\frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T}$ est défini comme suit:

$$\frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} = - \frac{\sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)}{\sum_{j=1}^{\infty} l z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2} \quad (\text{II-58})$$

II-B-4 Tableau des différentes méthodes pour le même nombre de particules :

	Fugacité pour 10 ⁴ particules à deux dimensions			
a	Z _{ex}	Notre approximation		Approximation dit classique
		Z _{app}	Ecart relatif	Le nombre total de particules diverge.
0.005	1.00994	1.01002	8.45 e-5	
0.002	1.00388	1.00397	9.02 e-5	
0.00175	1.00337	1.00348	1.10 e-4	
0.00125	1.00235	1.00245	1.02 e-4	
0.001	1.00182	1.00193	1.15 e-4	
0.0008	1.00137	1.00150	1.34 e-4	
0.0007	1.00110	1.00126	1.50 e-4	
0.0006	1.00076	1.00092	1.64 e-4	
0.0005	1.0000005	1.000127	1.27 e-4	
0.00049996	1.00000	1.000126	1.26 e-4	
0.000489999	0.99985	0.99997	1.18 e-4	
0.00045	0.99896	0.99904	8.11 e-5	
0.0004	0.99671	0.99676	4.50 e-5	
0.0003	0.98252	0.98253	1.11 e-5	
0.0002	0.92763	0.92763	0	
0.00015	0.85809	0.85809	0	
0.0001	0.72549	0.72549	0	
0.00008	0.64359	0.64359	0	
0.00005	0.47404	0.47404	0	
0.00002	0.22586	0.22586	0	
0.00001	0.11997	0.11997	0	
0.000008	0.09714	0.09714	0	
0.000005	0.06183	0.06183	0	
0.000002	0.02518	0.02518	0	
0.000001	0.01266	0.01266	0	
0.0000008	0.01014	0.01014	0	
0.0000005	0.00635	0.00635	0	
0.0000002	0.00254	0.00254	0	
0.0000001	0.00127	0.00127	0	
0.00000008	0.00101	0.00101	0	

L'écart relatif moyen est défini comme suit :

$$\text{Ecart} = \frac{|z_{exa} - z_{app}|}{z_{exa}}$$

Discussion :

- Notre approximation est meilleure que celle donnée dans la littérature car cette dernière conduit à des expressions qui divergent quand $z \rightarrow e^{2a}$ alors que notre expression converge.
- L'expression du nombre de particules converge dans les cas sommation exacte et notre approximation quand ($z \rightarrow 1$) .
- Quand la fugacité tend vers un ($z \rightarrow 1$) nous trouvons les mêmes résultats que ceux de l'expression exacte.

Nous présentons, dans la figure qui suit, les variations de la capacité calorifique à volume constant donnée par la sommation exacte et par notre approximation dans le cas d'une boîte à deux dimensions.

Nous constatons qu'elles sont confondues pratiquement partout ; elles sont légèrement différentes à haute température pour les cas sommation exacte et notre approximation.

Le traitement classique donne un résultat qui diverge.

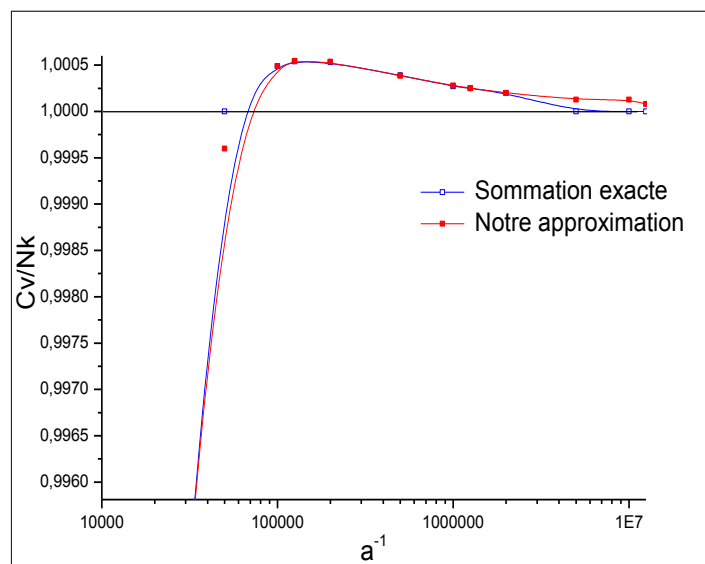


fig II-16 : Variation de la capacité calorifique à volume constant en fonction de la température pour la sommation exacte et notre approximation.

II-C Boîte à trois dimensions :**II-C-1 approximation dite classique (Littérature) $\varepsilon_0 = 0$:**

Le nombre de particules total à trois dimensions [Tan97] est tel que :

$$N_3^c = \iint \frac{d\vec{x}d\vec{p}}{h^3} \frac{1}{z^{-1} \exp\left(\frac{\beta p^2}{2m}\right) - 1} = \frac{z}{1-z} + \left(\frac{\pi}{4a}\right)^{3/2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(z)^i}{i^{3/2}} \quad (\text{II-59})$$

A très basse température, le potentiel chimique réduit $\mu' (z = e^{a\mu'})$ tend vers 0. A la limite thermodynamique quand $z \rightarrow 1$ le deuxième terme atteint sa valeur maximale donnée par l'expression (I-27). On dit il y a condensation de Bose-Einstein dans une boîte à trois dimensions.

Pour la boîte à trois dimensions, l'énergie interne de ce système peut être écrite sous la forme :

$$\frac{U_3^c}{NkT} = \frac{3}{2} \left(\frac{\pi}{4a}\right)^{3/2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{z^i}{i^{5/2}} \quad (\text{II-60})$$

La dérivée de l'énergie interne par rapport à la température (appendice B) est exprimée comme suit :

$$\frac{C_{v,3}^c}{Nk} = \frac{3}{4} \left(5 \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - 3 \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \right) \quad (\text{II-61})$$

II-C-2 Sommation exacte $\varepsilon_0 \neq 0$:

Les niveaux d'énergies sont donnés par la relation :

$$\varepsilon_{i,j,k} = \varepsilon_0 (i^2 + j^2 + k^2)$$

Le nombre de particules à trois dimensions est donné par la relation:

$$N_3^{ex} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} e^{a(i^2+j^2+k^2)} - 1} \quad (\text{II-62})$$

On peut séparer le nombre de particules de l'état fondamental et le nombre de particules dans les états excités et noter :

$$N_3^{ex} = N_{03}^{ex} + N_e^{ex}$$

Occupations de l'état fondamental N_{03}^{ex} ($i = j = k = 1$) et des états excités N_e :

$$\begin{cases} N_{03}^{ex} = \frac{1}{z^{-1} e^{3a} - 1} \\ N_e^{ex} = \sum_{i=2}^{\infty} \frac{3}{z^{-1} e^{a(i^2+2)}} - 1 + \sum_{i=2}^{\infty} \sum_{j=2}^{\infty} \frac{3}{z^{-1} e^{a(i^2+j^2+1)}} - 1 + \sum_{i=2}^{\infty} \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} e^{a(i^2+j^2+k^2)} - 1} \end{cases} \quad (\text{II-63})$$

Energie interne exacte U_3^{ex} :

$$\frac{U_3^{ex}}{NkT} = \frac{a}{N} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(i^2 + j^2 + k^2)}{z^{-1} e^{a(i^2+j^2+k^2)} - 1} \quad (\text{II-64})$$

Capacité calorifique exacte à volume constant :

En utilisant (II.9), on arrive à :

$$\frac{C_{v3}^{ex}}{Nk} = \frac{a}{N} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(i^2 + j^2 + k^2) e^{-a(i^2+j^2+k^2)} \left(a(i^2 + j^2 + k^2) z + T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) \right)}{\left(1 - z e^{-a(i^2+j^2+k^2)} \right)^2} \quad (\text{II-65})$$

Pour exprimer la capacité calorifique à volume constant il faut calculer la dérivée de la fugacité par rapport à la température T .

La dérivée de la fugacité:

$$T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) = -a \frac{\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} z \frac{(i^2 + j^2 + k^2) e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)}}{\left(1 - z e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)}\right)^2}}{\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)}}{\left(1 - e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)}\right)^2}} \quad (\text{II-66})$$

On adopte la notation : $T \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) = -a z'_3{}^{\text{ex}}$

avec :

$$z'_3{}^{\text{ex}} = \frac{\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} z \frac{(i^2 + j^2 + k^2) e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)}}{\left(1 - z e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)}\right)^2}}{\sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)}}{\left(1 - e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)}\right)^2}} \quad (\text{II-67})$$

En portant (II-66) dans la relation (II-65), nous arrivons à :

$$\frac{C_{v3}{}^{\text{ex}}}{Nk} = \frac{a^2}{N} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(i^2 + j^2 + k^2) e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)} \left((i^2 + j^2 + k^2) z - z'_3{}^{\text{ex}} \right)}{\left(1 - z e^{-a(i^2 + j^2 + k^2)}\right)^2} \quad (\text{II-68})$$

Calcul numérique :

De même que pour les cas à une et deux dimensions, nous avons établi un programme fortran pour déduire la fraction condensée $N_{03}{}^{\text{ex}} / N$, l'énergie totale $U_3{}^{\text{ex}}$, le potentiel chimique $\mu'_3{}^{\text{ex}}$ et la capacité calorifique $C_{v3}{}^{\text{ex}}$.

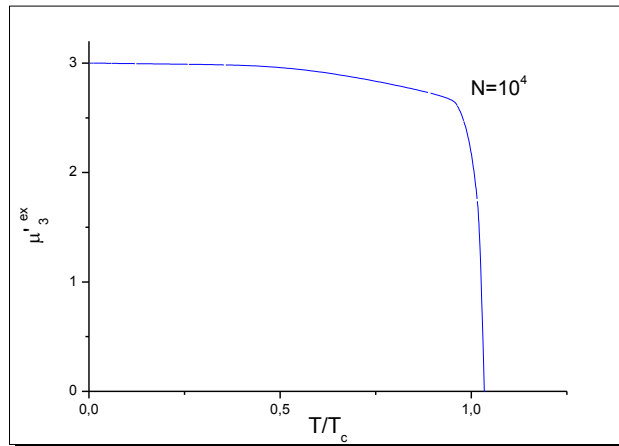


fig II-17 : Variation de μ' en fonction de la température T dans le cas d'une boîte à trois dimensions.

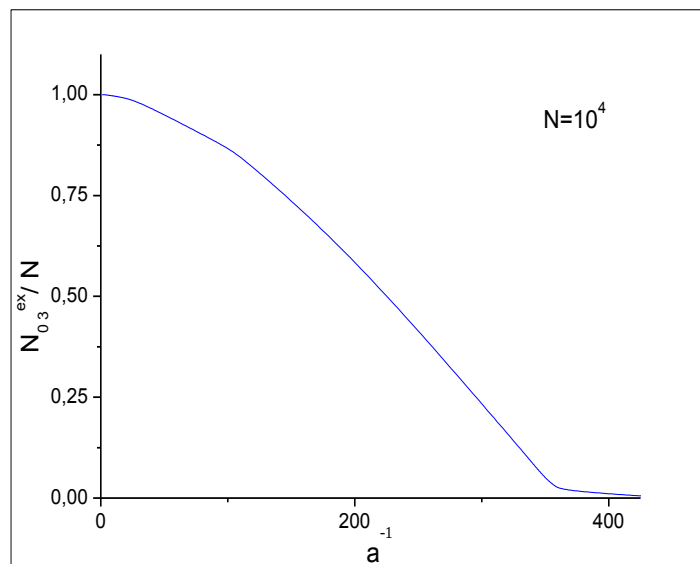


fig II-18 : Fraction d'atomes condensée en fonction de la température T dans une boîte à trois dimensions.

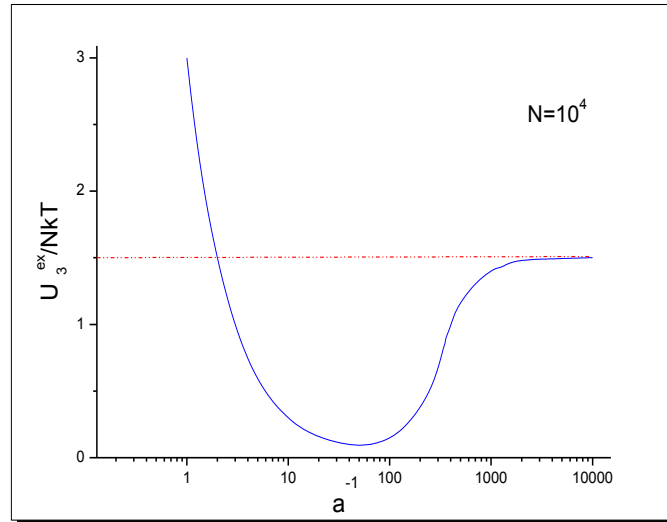


fig I-18 : Energie totale en fonction de T dans une boîte à trois dimensions.

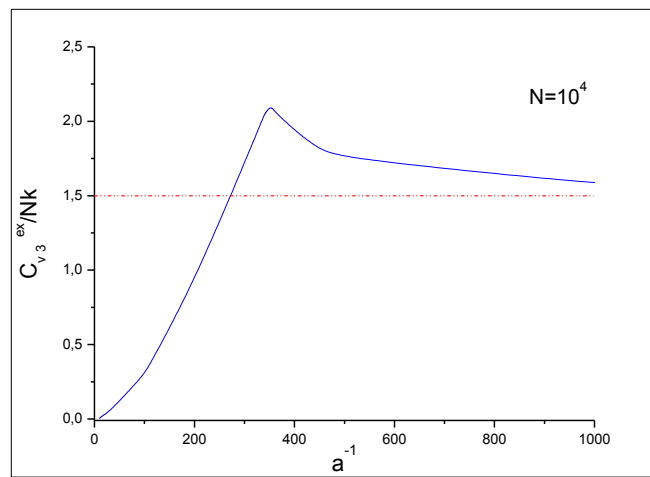


fig II-19 : Variation de $C_{v3}^{\text{ex}} / (Nk)$ en fonction de la température T pour le cas d'une boîte à trois dimensions ($N = 10^4$).

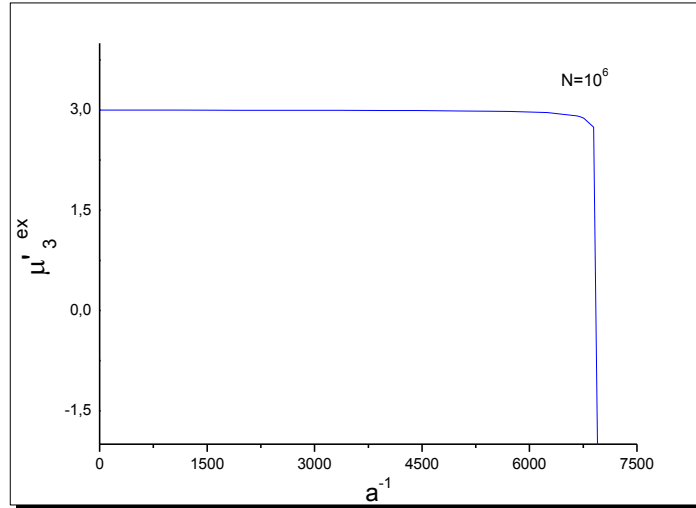


fig II-20 : Variation de $\mu_3'^{ex}$ en fonction de la température T pour le cas d'une boîte à trois dimensions ($N = 10^6$). Nous constatons que la variation est plus brutale que lorsque $N = 10^4$

Dans le cas à trois dimensions, le potentiel chimique reste constant puis varie brutalement au voisinage de la température de condensation T_c . La variation est d'autant plus brutale que le nombre de particules est grand. Elle permet de déterminer la température de condensation T_c .

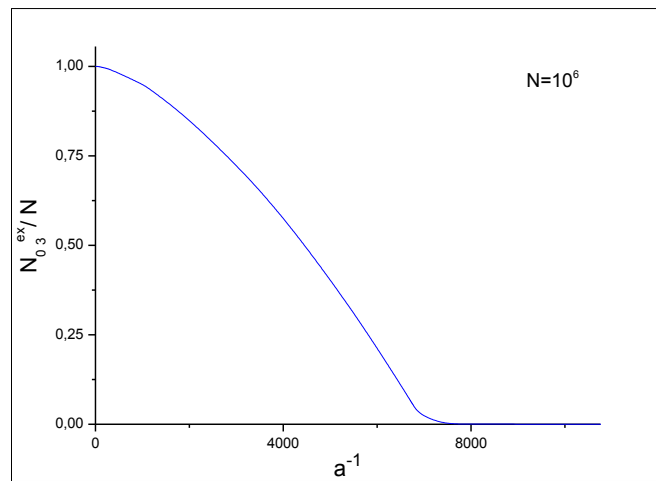


fig II-21 : Fraction d'atomes condensée en fonction de la température T pour le cas d'une boîte à trois dimensions ($N = 10^6$).

Nous observons que la variation de la fraction d'atomes condensée décroît uniformément entre 1 et 0.

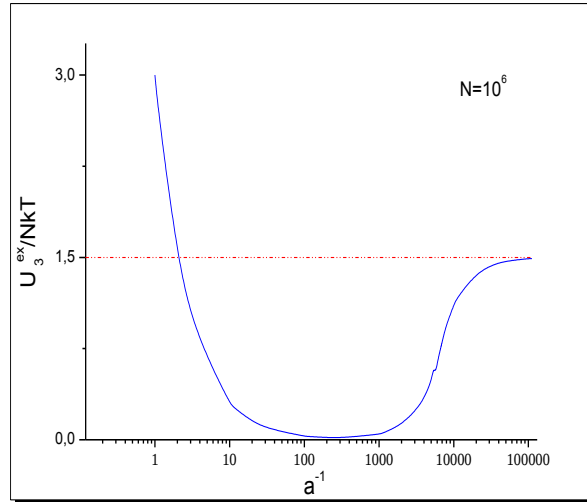


fig II-22 : Energie interne U_3^{ex} / NkT en fonction de la température T dans le cas à trois dimensions $N = 10^6$.

Nous utilisons l'échelle logarithmique pour mieux voir la variation de l'énergie sur un plus grand intervalle.

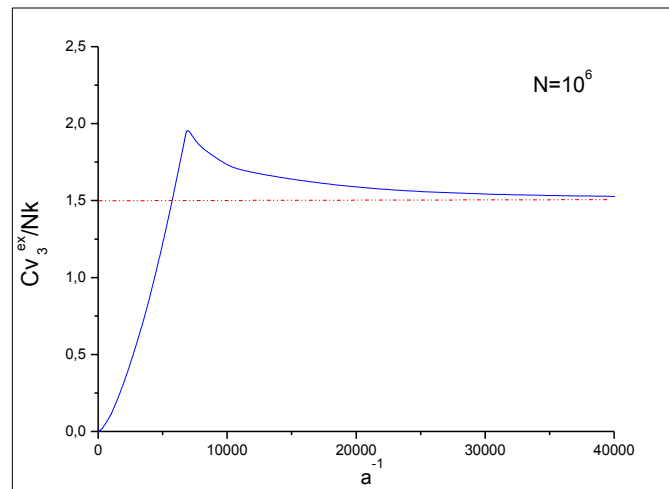


fig II-23 : Variation de C_{v3}^{ex} / Nk en fonction de la température T (cas à trois dimensions).

Nous remarquons que C_{v3}^{ex} / Nk croît rapidement jusqu'à 2.1 pour $N = 10^4$ et 1.976 pour $N = 10^6$; elle présente un point anguleux à T_c , caractéristique d'une transition de phase (la condensation de Bose-Einstein) et décroît pour redevenir constante à la valeur limite 1,5. Elle est à dérivée discontinue à la température de condensation T_c . Cette

transition est du deuxième ordre car elle est liée à la discontinuité de la dérivée de la capacité calorifique (dérivée seconde de l'énergie interne).

Conclusion:

- Il n'existe pas de condensation de Bose Einstein à une dimension 1D, la dérivée de la capacité calorifique est continue.
- La condensation de Bose Einstein existe pour les calculs exacts des énergies ; la dérivée de la capacité calorifique, à volume constant, à trois dimensions 3D est discontinue au voisinage de la température critique T_c .
- La capacité calorifique, à volume constant, à deux dimensions (2D) a un comportement intermédiaire entre le cas à une dimension (1D) (dérivée de C_{v1}^{ex} continue) et le cas à 3D (dérivée de C_{v3}^{ex} discontinue).

II-C-3 Notre approximation $\varepsilon_0 \neq 0$:

Le nombre de particules total est donné par la relation :

$$N_3^{ap} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} \exp(a(i^2 + j^2 + k^2)) - 1} = \sum_{l=1}^{\infty} z^l \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-al(i^2 + j^2 + k^2)} \quad (\text{II-69})$$

Compte tenu de la formule de sommation d'Euler Mac-Laurin, au premier ordre, nous transformons la sommation en intégrale comme suit :

$$N_3^{ap} = \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} \left(1 - \text{erf}(\sqrt{al}) \right) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^3 \quad (\text{II-70})$$

L'occupation de l'état fondamental est : $N_{30}^{ap} = \frac{z e^{-3a}}{1 - z e^{-3a}} \quad (\text{II-70-1})$

La population des états excités s'écrit sous la forme suivante :

$$N_{3 \text{ excites}}^{ap} = \begin{pmatrix} 3 \sum_{l=1}^{\infty} z^l e^{-2al} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{4al})) + \frac{e^{-4al}}{2} \right) + \\ 3 \sum_{l=1}^{\infty} z^l e^{-al} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{4al})) + \frac{e^{-4al}}{2} \right)^2 + \\ \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-4al}}{2} \right)^3 \end{pmatrix} \quad (\text{II-70-2})$$

L'énergie interne :

$$U_3^{ap} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_0 (i^2 + j^2 + k^2)}{z^{-1} \exp(a(i^2 + j^2 + k^2)) - 1} = \varepsilon_0 \sum_{l=1}^{\infty} z^l \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} (i^2 + j^2 + k^2) e^{-al(i^2 + j^2 + k^2)} \quad (\text{II-71})$$

En utilisant la formule de sommation d'Euler Mac-Laurin, au premier ordre, nous transformons la sommation en intégrale ce qui conduit à :

$$\frac{U_3^{ap}}{kT} = -a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \frac{\partial}{\partial a} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^3 \quad (\text{II-72})$$

En tenant compte de la relation de dérivation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial a} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) \right) = \frac{-1}{2a} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + e^{-al} \right) \quad (\text{II-73})$$

On obtient :

$$\frac{U_3^{ap}}{kT} = \frac{3}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + (al + 1) e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \text{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \quad (\text{II-74})$$

En utilisant la relation (II-9), la capacité calorifique à volume constant prend la forme :

$$\begin{aligned}
 \frac{C_{v,3}^{ap}}{k} = & \frac{3}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \\
 & + \frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) \frac{3}{2} \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \\
 & + a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\frac{\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + e^{-al}}{2a} + al^2 e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \\
 & + a \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\frac{\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + e^{-al}}{2a} + \frac{l}{2} e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{II-75}$$

Il est possible de simplifier l'expression de la capacité calorifique à volume constant, pour l'écrire comme suit:

$$\begin{aligned}
 \frac{C_{v,3}^{ap}}{k} = & \frac{3}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \\
 & + \frac{3}{2} \frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \\
 & + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{2l} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (2a^2 l^2 + 1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2 \\
 & + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l} \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right)^2 \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{II-76}$$

où l'expression de $\left(\frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right)$ est :

$$\left(\frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right) = - \frac{3 \sum_{l=1}^{\infty} z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + (al+1)e^{-al} \right) \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^2}{2 \sum_{l=1}^{\infty} l z^l \left(\sqrt{\frac{\pi}{4al}} (1 - \operatorname{erf}(\sqrt{al})) + \frac{e^{-al}}{2} \right)^3} \tag{II-77}$$

Discussion :

- ❖ Notre approximation est meilleure que celle donnée dans la littérature car cette dernière conduit à des expressions qui divergent quand $z \rightarrow e^{3a}$ alors que notre expression est convergente.
- ❖ Le nombre de particules converge dans les cas « sommation exacte et notre approximation » à basse température.
- ❖ Quand la fugacité tend vers 1 ($z \rightarrow 1$) notre approximation donne des résultats proches de ceux des sommations exactes alors que ceux de la littérature en sont éloignés [Dao10].

II-C-4 Tableau des différentes méthodes pour le même nombre de particules :

Fugacité pour 10^4 particules à trois dimensions					
a	Z_{ex}	Notre approximation		Approximation dit classique	
		Z_{app}	Ecart 1	Z_{lit}	Ecart 2
0.005	1.01494	1.01511*	/	/	/
0.003	1.00813	1.00892	7.836E-4	/	/
0.0029	1.00725	1.00822	9.630E-4	/	/
0.0028	1.0051	1.00609	9.849E-4	/	/
0.00275	1.00282	1.00359	7.678E-4	/	/
0.0027	0.99939	0.99997	5.803E-4	0.96675	0.03266
0.00265	0.99484	0.99529	4.523E-4	0.95996	0.03506
0.0026	0.98924	0.98960	3.639E-4	0.95146	0.03819
0.00255	0.98263	0.98293	3.053E-4	0.94428	0.03903
0.002498	0.92386	0.92400	1.515E-4	0.93503	0.01209
0.002	0.85171	0.85180	1.056E-4	0.80877	0.05042
0.001	0.40575	0.40575	0	0.38650	0.04744
0.0009	0.35417	0.35417	0	0.33794	0.04583
0.0008	0.30293	0.30293	0	0.28963	0.0439
0.0007	0.25262	0.25262	0	0.24209	0.04168
0.0005	0.15743	0.15743	0	0.15173	0.03621
0.0003	0.07484	0.07484	0	0.07270	0.02859
0.0001	0.01453	0.01453	0	0.01429	0.01652

Les écarts relatifs moyens sont définis comme suit :

$$\text{Ecart}_1 = \frac{|Z_{exa} - Z_{app}|}{Z_{exa}}, \text{ et } \text{Ecart}_2 = \frac{|Z_{exa} - Z_{lit}|}{Z_{exa}}$$

Conclusion :

À haute température nous avons trouvé des résultats similaires pour les méthodes exactes et notre approximation tandis que le résultat de la littérature en est proche (écarts allant de 1% à 5%).

A basse température, notre approximation reste très proche du calcul exact (moins de 0.01%) alors que le résultat de littérature en est assez éloigné (écart relatif moyen autour de 3%).

A très basse température ($z > 1$), notre approximation reste proche du résultat exact 0.01% alors que l'expression de la littérature diverge.

Chapitre III :

Comparaison ensembles canonique et grand canonique pour l'étude de systèmes de bosons

III-1 Introduction :

Dans ce chapitre, nous étudions la différence entre l'ensemble canonique et l'ensemble grand canonique pour des systèmes bosoniques à faible nombre de niveaux d'énergie. Du fait de l'indiscernabilité des particules identiques (bosons, fermions), la fonction de partition canonique des systèmes quantiques est difficile à calculer lorsque le nombre de particules est élevé. Toutefois, la fonction de partition grand canonique est plus pratique à calculer. C'est pourquoi les grandeurs thermodynamiques de ces

systèmes sont calculées dans l'ensemble grand canonique. Cependant, certains systèmes ont un nombre de particules constant et leur étude est plus appropriée par l'ensemble canonique.

Nous nous intéressons à des systèmes bosoniques à faible nombre de niveaux d'énergie (deux, trois et quatre niveaux). Nous arrivons à calculer la fonction de partition canonique dans ces cas. Nous déterminons l'énergie moyenne et la capacité calorifique à volume constant de ces systèmes par l'ensemble canonique. Nous comparons les valeurs obtenues à celles qui découlent d'un ensemble grand canonique, de même nombre moyen de particules. Nous voulons savoir si ces ensembles sont équivalents pour le calcul de l'énergie moyenne.

III-2 Système à deux niveaux :

Nous commençons par appliquer cette méthode à un système à deux niveaux d'énergie ε_1 et ε_2 qui contient N particules.

III-2-1 Ensemble canonique :

III-2-1-1 La fonction de partition :

On définit la fonction de partition Q_n du système:

$$Q_n^N = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (\text{III-1})$$

Où Q_n^N et E_i sont respectivement la fonction de partition pour n niveaux d'énergie et l'énergie du système. N étant le nombre de particules.

Nous considérons un système d'un nombre macroscopique d'atomes bosoniques en équilibre à la température T dans deux niveaux d'énergie. La fonction de partition devient :

$$Q_2^N = e^{-\beta N \varepsilon_1} + e^{-\beta((N-1)\varepsilon_1 + \varepsilon_2)} + e^{-\beta((N-2)\varepsilon_1 + 2\varepsilon_2)} + \dots + e^{-\beta(2\varepsilon_1 + (N-2)\varepsilon_2)} + e^{-\beta(\varepsilon_1 + (N-1)\varepsilon_2)} + e^{-\beta N \varepsilon_2} \quad (\text{III-2})$$

On a :

$$Q_2^N = e^{-\beta N \varepsilon_1} \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} + e^{-2\beta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} + \dots + e^{-\beta(N-1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} + e^{-\beta N(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} \right) \quad (\text{III-3})$$

La sommation entre parenthèses est une progression géométrique de raison $e^{-\beta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}$.

On obtient donc :

$$Q_2^N = e^{-\beta N \varepsilon_1} \left(\frac{1 - e^{-\beta(N+1)(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}} \right) \quad (\text{III-4})$$

Pour des raisons de simplicité, mais sans perte de généralité, on pose, dans ce cas, l'énergie du premier niveau égal à 0 ($\varepsilon_1 = 0$) et celle du deuxième niveau égale à ε ($\varepsilon_2 = \varepsilon$), La fonction de partition pour un système de deux niveaux d'énergie équidistants vaut alors:

$$Q_2^N = \left(\frac{1 - e^{-\beta(N+1)\varepsilon}}{1 - e^{-\beta\varepsilon}} \right) \quad (\text{III-5})$$

III-2-1-2 L'énergie interne :

L'énergie interne est donnée par la relation :

$$U_2^C = - \frac{\partial \log Q_2^N}{\partial \beta} \quad (\text{III-6})$$

qui conduit à :

$$U_2^C = \frac{\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}}{1 - e^{-\beta\varepsilon}} - \frac{(N+1)\varepsilon e^{-\beta(N+1)\varepsilon}}{1 - e^{-\beta(N+1)\varepsilon}} \quad (\text{III-7})$$

On définit le paramètre a :

$$a = \beta\varepsilon = \varepsilon / kT \quad (\text{III-8})$$

L'énergie interne, pour deux niveaux d'énergie, devient :

$$\frac{U_2^C}{kT} = \frac{a e^{-a}}{1 - e^{-a}} - \frac{a(N+1)e^{-(N+1)a}}{1 - e^{-(N+1)a}} \quad (\text{III-9})$$

III-2-1-3 Capacité calorifique :

En utilisant la relation (II-9), la capacité calorifique, à volume constant, pour ce système à deux niveaux, s'écrit :

$$\frac{C_v^C}{k} = \frac{a^2 e^{-a}}{(1 - e^{-a})^2} - \frac{a^2 (N+1)^2 e^{-(N+1)a}}{(1 - e^{-(N+1)a})^2} \quad (\text{III-10})$$

III-2-2 Ensemble grand canonique :

III-2-2-1 Grand fonction de partition :

La fonction de partition de l'ensemble grand canonique a pour expression :

$$Z_G = \prod_i \zeta_i^{BE} = \prod_i \frac{1}{1 - ze^{-\beta \epsilon_i}} \quad (\text{III-11})$$

Pour deux niveaux d'énergie, la fonction de partition devient :

$$Z_G = \frac{1}{1 - z} \frac{1}{(1 - ze^{-\beta \epsilon})} \quad (\text{III-12})$$

III-2-2-2 L'énergie interne :

En utilisant l'expression de Z_G donnée en (III-12) et la relation (I-6), l'énergie interne s'écrit :

$$U_2^G = \frac{z \epsilon e^{-\beta \epsilon}}{1 - ze^{-\beta \epsilon}} \quad (\text{III-13})$$

En adoptant la définition (III-8) du paramètre a , on écrit:

$$\frac{U_2^G}{kT} = \frac{zae^{-a}}{1 - ze^{-a}} \quad (\text{III-14})$$

III-2-2-3 Capacité calorifique :

Pour déterminer la capacité calorifique à volume constant, il faut connaître la variation de la fugacité en fonction de la température T . Pour cela, on a besoin de dériver l'expression du nombre de particules.

L'expression de nombres de particule pour le système à deux niveaux d'énergie s'écrit :

$$N_2^G = \frac{1}{1-z} + \frac{1}{1-ze^{-a}} \quad (\text{III-15})$$

Le nombre de particules étant constant, sa dérivée par rapport à la température est nulle. On peut écrire :

$$\left. \frac{\partial N}{\partial T} \right|_{N,V} = \frac{\partial N}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial T} + \frac{\partial N}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial T} = 0 \quad (\text{III-16})$$

$$\frac{\partial N}{\partial T} = \left(\frac{1}{(1-z)^2} + \frac{e^{-a}}{(1-ze^{-a})^2} \right) \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) - \frac{ze^{-a}}{(1-ze^{-a})^2} \left(\frac{-a}{T} \right) \quad (\text{III-17})$$

On peut en déduire la variation de la fugacité en fonction de la température T :

$$\frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) = - \frac{\frac{ae^{-a}}{(1-ze^{-a})^2}}{\left(\frac{1}{(1-z)^2} + \frac{e^{-a}}{(1-ze^{-a})^2} \right)} \quad (\text{III-18})$$

Pour définir la capacité calorifique pour l'ensemble grand canonique à deux niveaux d'énergie on utilise la relation (II-9).

L'expression de la capacité calorifique à volume constant devient :

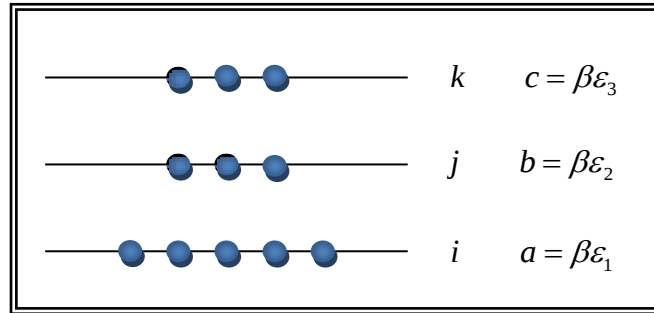
$$\frac{C_{v,2}^G}{k} = \frac{aze^{-a}}{1-ze^{-a}} + \frac{aze^{-a} \left(\frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) + aze^{-a} \right)}{(1-ze^{-a})^2} \quad (\text{III-19})$$

III-3 Système à trois niveaux:

Nous utilisons maintenant des systèmes à trois et quatre niveaux d'énergie, chacun contenant N particules.

III-3-1 Ensemble canonique :

III-3-1-1 La fonction de partition pour trois niveaux d'énergie équidistants:



i, j et k sont les nombres de particules qui pouvant occuper respectivement les niveaux a, b et c , tels que : $i+j+k = N$

D'après (III-1) on peut écrire la fonction de partition sous la forme :

$$Q_3^N = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} e^{-(a.i+b.j+c.(N-i-j))} \quad (\text{III-20})$$

En prenant trois niveaux équidistants : $\epsilon_1 = 0, \epsilon_2 = \epsilon$ et $\epsilon_3 = 2\epsilon$ on a :

$$Q_3^N = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} e^{-\beta\epsilon(2N-2i-j)} \quad (\text{III-21})$$

III-3-1-2L'énergie interne :

L'énergie interne s'écrit :

$$U_3^C = \frac{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \varepsilon(2N-2i-j) e^{-\beta \varepsilon(2N-2i-j)}}{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} e^{-\beta \varepsilon(2N-2i-j)}} \quad (\text{III-22})$$

En utilisant la variable a définie par (III-8) l'énergie moyenne prend la forme :

$$\frac{U_3^C}{kT} = a \frac{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} (2N-2i-j) e^{-a(2N-2i-j)}}{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} e^{-a(2N-2i-j)}} \quad (\text{III-23})$$

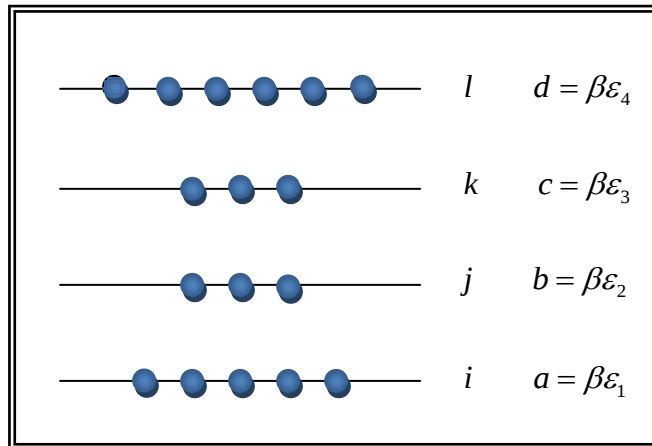
III-3-1-3 Capacité calorifique :

La capacité calorifique, à volume constant, pour trois niveaux équidistants est donnée par la relation :

$$\frac{C_{v,3}^C}{k} = a^2 \frac{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} (2N-2i-j)^2 e^{-a(2N-2i-j)} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} e^{-a(2N-2i-j)} - \left(\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} (2N-2i-j) e^{-a(2N-2i-j)} \right)^2}{\left(\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} e^{-a(2N-2i-j)} \right)^2} \quad (\text{III-24})$$

III-3-1-4 La fonction de partition pour quatre niveaux d'énergie équidistants :

On considère un système à quatre niveaux d'énergie a, b, c et d sur lesquels on répartit N bosons.



i, j, k et l sont les nombres de particules qui peuvent occuper respectivement les niveaux a, b, c et d , tels que : $i + j + k + l = N$

De manière générale, la fonction de partition à N particules s'écrit sous la forme :

$$Q_4^N = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} e^{-(a.i+b.j+c.k+d.(N-i-j-k))} \quad (\text{III-25})$$

Si $\varepsilon_1 = 0, \varepsilon_2 = \varepsilon, \varepsilon_3 = 2\varepsilon$ et $\varepsilon_4 = 3\varepsilon$ (niveaux d'énergie équidistants), nous avons :

$$Q_4^N = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} e^{-\beta\varepsilon(3N-3i-2j-k)} \quad (\text{III-26})$$

III-3-1-5 L'énergie interne :

L'énergie interne prend la forme :

$$U_4^C = \frac{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} \varepsilon(3N-3i-2j-k) e^{-\beta\varepsilon(3N-3i-2j-k)}}{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} e^{-\beta\varepsilon(3N-3i-2j-k)}} \quad (\text{III-27})$$

En multipliant par β, U^c est tel que :

$$\frac{U_4^C}{kT} = a \frac{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} (3N-3i-2j-k) e^{-a(3N-3i-2j-k)}}{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} e^{-a(3N-3i-2j-k)}} \quad (\text{III-28})$$

III-3-1-6 Capacité calorifique :

Elle a pour expression :

$$\frac{C_{v,4}^c}{k} = a^2 \left(\frac{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} (3N-3i-2j-k)^2 e^{-a(3N-3i-2j-k)}}{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} e^{-a(3N-3i-2j-k)}} - \left(\frac{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} (3N-3i-2j-k) e^{-a(3N-3i-2j-k)}}{\sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} \sum_{k=0}^{N-i-j} e^{-a(3N-3i-2j-k)}} \right)^2 \right) \quad (\text{III-29})$$

III-3-2 Ensemble grand canonique :

III-3-2-1 La grand fonction de partition :

D'après (III-12), la grande fonction de partition, pour trois niveaux d'énergie, s'écrit :

$$Z_G = \frac{1}{(1-z)} \frac{1}{(1-ze^{-\beta\varepsilon})} \frac{1}{(1-ze^{-2\beta\varepsilon})} \quad (\text{III-30})$$

III-3-2-2 L'énergie interne :

En utilisant (III-14), l'énergie interne de l'ensemble grand canonique devient :

$$U_3^G = \frac{z\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}}{1-ze^{-\beta\varepsilon}} + \frac{2\varepsilon z e^{-2\beta\varepsilon}}{1-ze^{-2\beta\varepsilon}} \quad (\text{III-31})$$

En multipliant par β , U_3^G devient :

$$\frac{U_3^G}{kT} = \frac{z a e^{-a}}{1-ze^{-a}} + \frac{2 a z e^{-2a}}{1-ze^{-2a}} \quad (\text{III-32})$$

III-3-2-3 Capacité calorifique :

L'expression du nombre de particules est :

$$N = \sum_{i=0}^2 \frac{1}{1-ze^{-\beta\varepsilon_i}} \quad (\text{III-33})$$

On utilise (II-9), et on dérive le nombre de particules pour trouver la variation de la fugacité en fonction de la température T :

On utilise (III-16), nous trouvons :

$$\frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) = -ae^{-a} \frac{\left(\frac{1}{(1-ze^{-a})^2} + \frac{2e^{-a}}{(1-ze^{-2a})^2} \right)}{\left(\frac{1}{(1-z)^2} + \frac{e^{-a}}{(1-ze^{-a})^2} + \frac{e^{-2a}}{(1-ze^{-2a})^2} \right)} \quad (\text{III-34})$$

La capacité calorifique, à volume constant, grand canonique a pour expression :

$$\frac{C_{v,3}^G}{k} = \frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \left(\frac{zae^{-a}}{(1-ze^{-a})^2} + \frac{2zae^{-2a}}{(1-ze^{-2a})^2} \right) + \frac{za^2e^{-a}}{(1-ze^{-a})^2} + \frac{4za^2e^{-2a}}{(1-ze^{-2a})^2} \quad (\text{III-35})$$

III-3-2-4 La grande fonction de partition :

La grande fonction de partition, pour quatre niveaux d'énergie, s'écrit :

$$Z_G = \frac{1}{(1-z)} \frac{1}{(1-ze^{-\beta\epsilon})} \frac{1}{(1-ze^{-2\beta\epsilon})} \frac{1}{(1-ze^{-3\beta\epsilon})} \quad (\text{III-36})$$

III-3-2-5 L'énergie interne :

En utilisant (I-6), l'énergie interne s'écrit :

$$U_4^G = \frac{z\epsilon e^{-\beta\epsilon}}{1-ze^{-\beta\epsilon}} + \frac{2\epsilon ze^{-2\beta\epsilon}}{1-ze^{-2\beta\epsilon}} + \frac{3\epsilon ze^{-3\beta\epsilon}}{1-ze^{-3\beta\epsilon}} \quad (\text{III-37})$$

En multipliant par β nous avons :

$$\frac{U_4^G}{kT} = \frac{zae^{-a}}{1-ze^{-a}} + \frac{2aze^{-2a}}{1-ze^{-2a}} + \frac{3aze^{-3a}}{1-ze^{-3a}} \quad (\text{III-38})$$

III-3-2-6 Capacité calorifique :

De la même manière nous dérivons l'expression du nombre de particules pour trouver la variation de fugacité par rapport la température T donc:

L'expression du nombre de particules est :

$$N^4 = \sum_{i=0}^3 \frac{1}{1 - ze^{-\beta \epsilon_i}} \quad (\text{III-39})$$

En utilisant , (III-16), nous trouvons :

$$\frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right) = -a \frac{\left(\frac{e^{-a}}{(1 - ze^{-a})^2} + \frac{2e^{-2a}}{(1 - ze^{-2a})^2} + \frac{3e^{-3a}}{(1 - ze^{-3a})^2} \right)}{\left(\frac{1}{(1 - z)^2} + \frac{e^{-a}}{(1 - ze^{-a})^2} + \frac{e^{-2a}}{(1 - ze^{-2a})^2} + \frac{e^{-3a}}{(1 - ze^{-3a})^2} \right)} \quad (\text{III-40})$$

La capacité calorifique grand canonique est telle que:

$$\frac{C_{v4}^G}{k} = \frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \left(\frac{zae^{-a}}{(1 - ze^{-a})^2} + \frac{2zae^{-2a}}{(1 - ze^{-2a})^2} + \frac{3zae^{-3a}}{(1 - ze^{-3a})^2} \right) + \frac{za^2e^{-a}}{(1 - ze^{-a})^2} + \frac{4za^2e^{-2a}}{(1 - ze^{-2a})^2} + \frac{9za^2e^{-3a}}{(1 - ze^{-3a})^2} \quad (\text{III-41})$$

III-4 Les écarts relatifs :

- Energie interne : Nous calculons l'écart relatif de l'énergie interne pour différent nombre de niveaux d'énergie (deux, trois et quatre niveaux).

$$\frac{\Delta U_n}{U_n} = \frac{|U_n^G - U_n^C|}{U_n^G} \quad (\text{III-42})$$

- Capacité calorifique : Nous calculons aussi l'écart relatif de la capacité calorifique à volume constant pour deux, trois et quatre niveaux d'énergie.

$$\frac{\Delta C_{v n}}{C_{v n}} = \frac{|C_{v n}^G - C_{v n}^C|}{C_{v n}^G} \quad (\text{III-43})$$

III-5 Calculs numériques :

Nous avons établi un programme fortran pour déduire les écarts relatifs pour l'énergie interne U et la capacité calorifique C_v pour ces systèmes à deux, trois et quatre niveaux d'énergie équidistants. Pour un nombre de particules connues, on donne des valeurs à a et on ajuste la valeur de la fugacité pour obtenir le nombre de particules fixé à une valeur mésoscopique allant de 10^2 à 10^8 . Pour les faibles valeurs de a et quand le nombre de niveaux augmente, les sommations se font sur des nombres très grands et le calcul dure longtemps. Les résultats obtenus sont donnés sur les figures qui suivent.

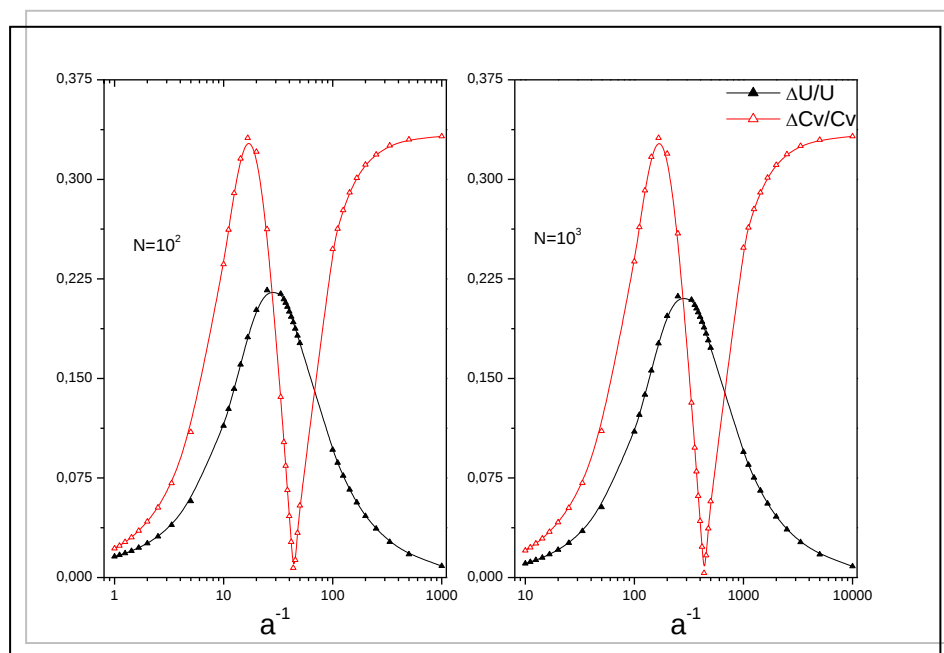


fig III-1 Variation des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique, à volume constant, en fonction de la température T pour $N = 10^2$ et $N = 10^3$ (Système à deux niveaux).

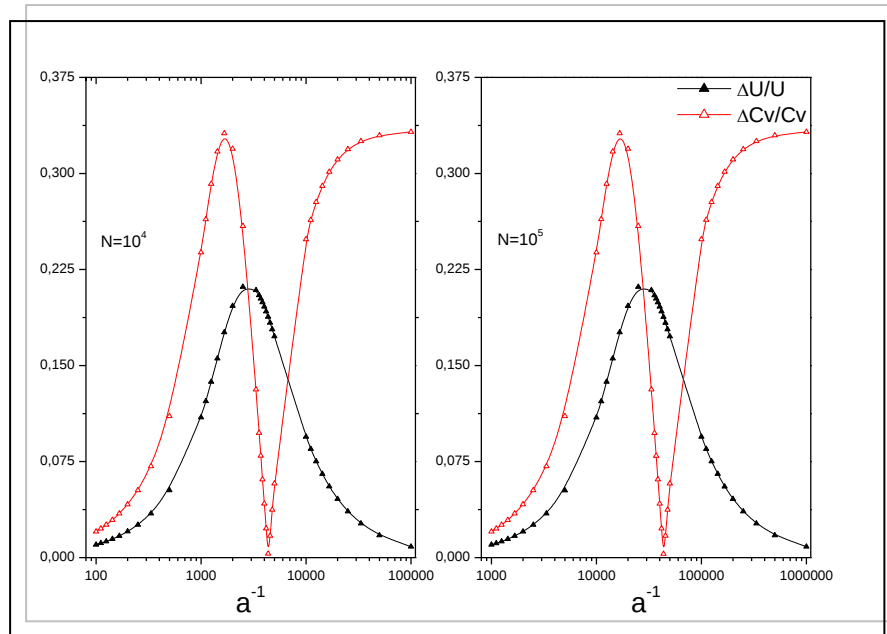


fig III-2 Variation des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique, à volume constant, en fonction de la température T pour $N = 10^4$ et $N = 10^5$ $N = 10^3$ (Système à deux niveaux).

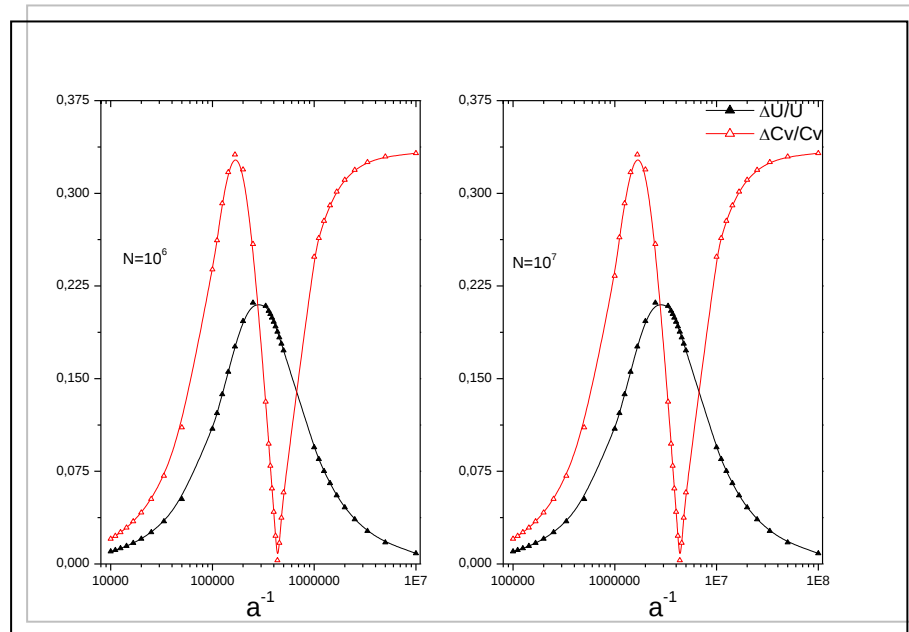


fig III-3 Variation des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique, à volume constant, en fonction de la température T pour $N = 10^6$ et $N = 10^7$ (Système à deux niveaux).

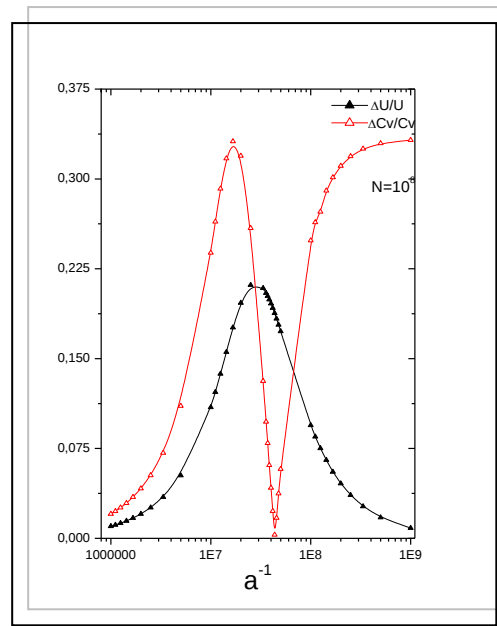


fig III-4 Variation des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique, à volume constant, en fonction de la température T pour un système à deux niveaux d'énergie ($N = 10^8$)

Cas d'une trois niveaux d'énergie équidistants :

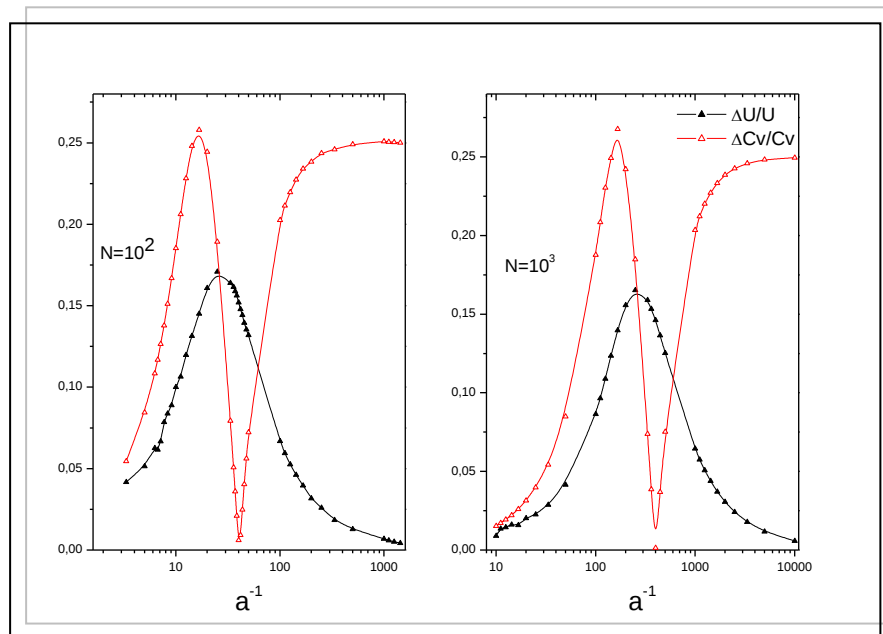


fig III-5 Variation des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique, à volume constant, en fonction de la température T pour $N = 10^2$ et $N = 10^3$ dans le cas d'un système à trois niveaux d'énergie.

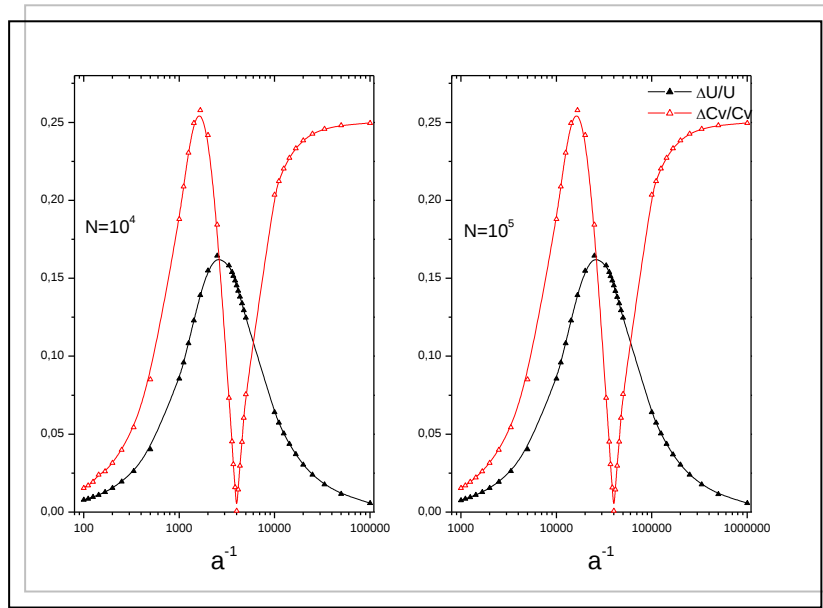


fig III-6 Variation des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique, à volume constant, en fonction de la température T pour $N=10^4$ et $N=10^5$ dans le cas d'un système à trois niveaux d'énergie.

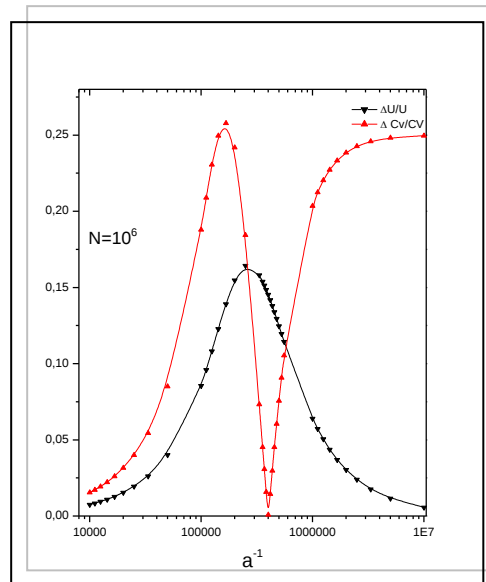


fig III-7 Variation de l'écart relatif moyen de l'énergie et la capacité calorifique, à volume constant, en fonction de la température T pour un système à trois niveaux d'énergie ($N=10^6$).

Cas d'une quatre niveaux d'énergie équidistants :

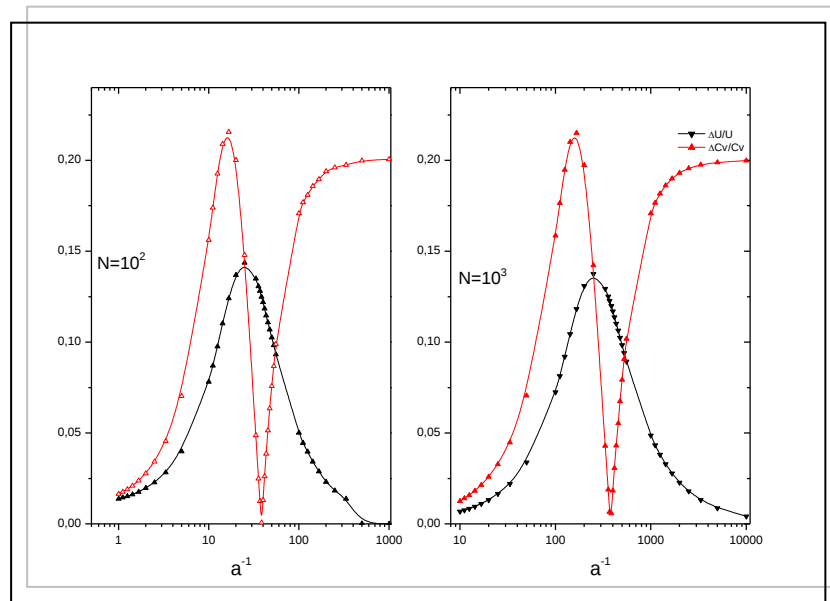


fig III-8 Variation des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique, à volume constant, en fonction de la température T pour $N = 10^2$ et $N = 10^3$ dans le cas d'un système à quatre niveaux d'énergie.

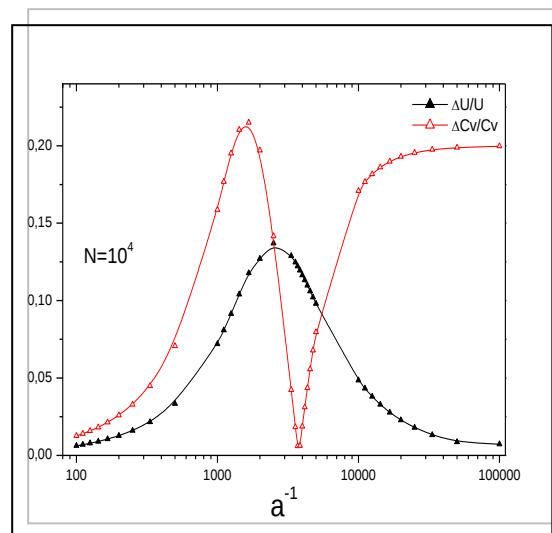


fig III-9 Variation des écarts relatifs moyens de l'énergie et de la capacité calorifique à volume constante en fonction de la température T pour un système à quatre niveaux d'énergie $N = 10^4$.

Les courbes obtenues ont des allures gaussiennes pour les écarts relatifs moyens de l'énergie dont les maxima sont autour de 21%, 17% et 13% pour deux, trois et quatre niveaux d'énergie respectivement. Ces maxima sont tels que le produit NT^{-1} est constant. Pour la capacité calorifique à volume constant, nous constatons que les allures des écarts relatifs moyens ont des maxima et minima. Ensuite l'écart relatif moyen de la capacité calorifique à volume constant croît uniformément pour redevenir constant à la même valeur maximale. Ces maxima T_1^{-1} et minima T_2^{-1} sont tels que le produits NT_1^{-1} et NT_2^{-1} respectivement sont constants. La valeur du minimum de C_v est proche de zéro.

En traçant les maxima des écarts relatifs moyens de l'énergie en fonction de niveaux d'énergie, nous trouvons la courbe ci-dessous :

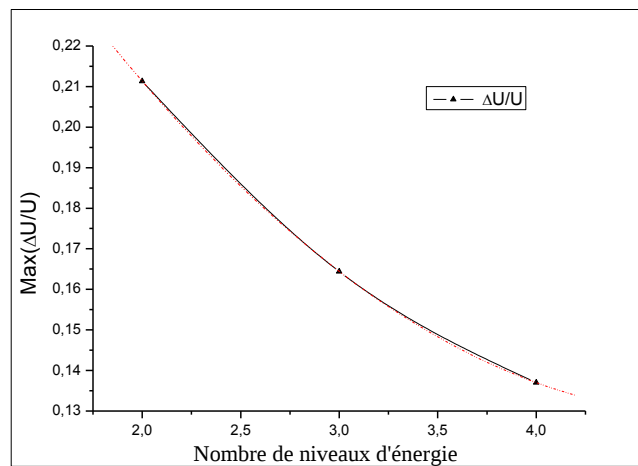


fig III-10 Variation du maximum de l'écart relatif moyen de l'énergie en fonction du nombre de niveaux d'énergie.

Discussion :

- La variation du maximum de l'écart relatif moyen de l'énergie décroît uniformément en fonction de nombre de niveaux d'énergie.

- Quand le nombre de niveaux d'énergie augmente, les deux ensembles canonique et grand canonique conduisent à la limite thermodynamique.
- Quand le nombre de niveaux d'énergie est faible, l'ensemble canonique et l'ensemble grand canonique sont sensiblement différents [Kes10, Meh10], ce qui n'est pas en accord avec les chercheurs [Kos08].

Conclusion :

Nous avons considéré des systèmes bosoniques à faible nombre de niveaux d'énergie (deux, trois et quatre niveaux). Nous calculons la fonction de partition canonique dans ces cas. Nous en déduisons l'énergie moyenne et la capacité calorifique de ces systèmes. Nous comparons les valeurs obtenues à celles qui découlent d'un ensemble grand canonique, de même nombre de particules (en moyenne). Nous avons tracé la différence relative de ces énergies et de ces capacités calorifiques, à volume constant, en fonction de la température T , pour différents niveaux d'énergie et pour différentes valeurs du nombre de particules. Les courbes obtenues ont des allures gaussiennes pour l'énergie interne et pour les différents nombre de particules dont les maxima sont tels que le produit NT^{-1} est constant. De même pour l'énergie, la capacité calorifique, à volume constant, présente des maxima et des minima en fonction de la température. Puis la capacité calorifique, à volume constant, croît uniformément pour redevenir constante. A faible nombre de niveaux d'énergie, l'ensemble canonique et l'ensemble grand canonique sont différents. Cette différence décroît quand le nombre de niveaux d'énergie croît et tend vers la limite thermodynamique. Nous en concluons que les énergies moyennes et les capacités calorifiques, déduites des ensembles canonique et grand canonique, peuvent différer sensiblement pour les systèmes à faible nombre de niveaux d'énergie, ce qui n'est pas en accord avec les chercheurs [Kos08]. Par contre, au vu de la diminution du maximum de l'écart quand le nombre de niveaux augmente, on peut en déduire que les deux ensembles canoniques et grand canonique sont équivalents à la limite thermodynamique pour les systèmes à nombre infini de niveaux d'énergie, ce qui est alors en accord avec les conclusions de la littérature.

Conclusion :

Après avoir rappelé quelques généralités sur les statistiques quantiques, en particulier le formalisme de l'ensemble canonique qui est adapté à l'étude des systèmes en statistiques quantiques, nous avons présenté notre travail. Notre travail se compose de deux parties.

Dans la première partie, nous avons étudié un système de bosons libres dans une boîte à une, deux et trois dimensions. Nous avons considéré l'expression du nombre de particules N , de l'énergie totale U et de la capacité calorifique, à volume constant, C_v . Le calcul de ces grandeurs est basé sur des sommations sur les niveaux d'énergie. Ces sommations sont effectuées par trois méthodes différentes :

- une méthode basée sur des sommations discrètes sur les niveaux d'énergie.
- une méthode basée sur une approximation dite classique où l'énergie de l'état fondamental est prise nulle et les sommations discrètes remplacées par des intégrales. Cette méthode est celle qui est appliquée dans les travaux cités dans la littérature.
- une méthode basée sur une approximation que nous proposons où les sommations sont remplacées par des intégrales et où l'énergie du fondamental est prise non nulle.

Nous comparons les résultats donnés par ces trois méthodes.

- ✓ Dans les cas à une et deux dimensions, la littérature donne des résultats qui divergent à basse température. Notre approximation donne des résultats qui ne divergent pas et qui restent toujours proches de ceux donnés par les sommations exactes.
- ✓ Dans le cas de la boîte à trois dimensions, notre approximation conduit à des résultats toujours proches de ceux des sommations exactes ; ceux de la littérature en sont proches à haute température et s'en éloignent sensiblement à basse température.

Notre approximation s'est toujours avérée meilleure que celle de la littérature.

La deuxième partie de notre travail est liée à l'équivalence ensemble canonique-grand canonique. Les systèmes quantiques (bosons et fermions) sont étudiés dans l'ensemble grand canonique car la fonction de partition canonique est difficile à calculer alors que la fonction de partition grand canonique est plus aisée à exprimer. Les deux ensembles sont supposés conduire aux mêmes résultats, au moins dans la limite thermodynamique (nombre de particules infini). Nous avons considéré des systèmes de bosons à faible nombre de degrés de liberté. Nous arrivons à calculer la fonction de partition canonique dans ces cas. Nous en déduisons l'énergie moyenne et la capacité

calorifique à volume constant par l'ensemble canonique. Nous comparons les valeurs de ces grandeurs à celles déterminées par l'ensemble grand canonique. Nous avons constaté que deux de ces valeurs ne sont pas toujours égales : il existe un domaine où la différence relative peut atteindre 21% pour l'énergie et 33% pour la capacité calorifique à volume constant. Ces différences persistent même pour N très grand. Nous en avons conclu que ces deux ensembles ne sont pas toujours équivalents et qu'il faut être très prudent : il faut tenir compte du domaine d'étude pour des comparaisons.

Parmi les perspectives à ce travail, nous citerons les comparaisons entre ensemble canonique et ensemble microcanonique ainsi que les comparaisons entre ensemble grand canonique et ensemble microcanonique. La détermination de fonctions de partition canoniques pour les systèmes de bosons et de fermions dans des cas généraux en tenant compte d'interactions serait aussi très intéressante.

Fonction de Bose :

Les fonctions de Bose sont notées $g_n(z)$ ($n > 1$), elles sont définies sur l'intervalle $[0, 1]$, sur lequel elles sont croissantes, par :

Sachant que $z < 1$, on a :

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx$$

$\Gamma(n)$: fonction Gamma d'Euler.

$$g_n(z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{z^i}{i^n}$$

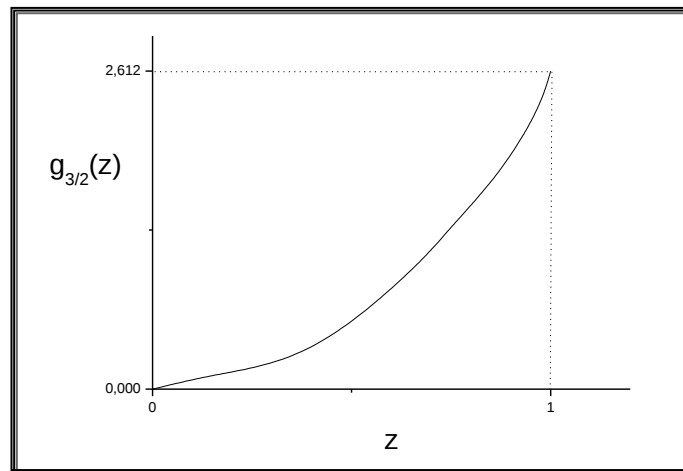
Elles ont les propriétés suivantes :

- $\frac{\partial g_n(z)}{\partial z} = \frac{1}{z} g_{n-1}(z)$
- Pour $z \ll 1$, $g_n(z) \approx z$
- Pour $z = 1$, $g_n(1) = \text{cst}$ quand $n > 1$

Par exemple : $g_{3/2}(1) = 2.612$, $g_{5/2}(1) = 1.341$.

$g_n(1)$ diverge pour $n \leq 1$

Les variations de $g_{3/2}(z)$ avec z sont représentées sur la figure ci-dessous



Expression de la capacité calorifique, à volume constant, dans l'approximation classique :

Lorsque la température T est supérieure à la température de condensation ($T > T_c$), l'expression du nombre de particules dans une boîte à trois dimensions de volume V s'écrit sous la forme :

$$N = \frac{V}{\lambda_{dB}^3} g_{3/2}(z) \quad (B-1)$$

L'expression de l'énergie interne est :

$$U = \frac{3}{2} \frac{V}{\lambda_{dB}^3} kT g_{5/2}(z) \quad (B-2)$$

On peut éliminer $\frac{V}{\lambda_{dB}^3}$ de (B-1) et (B-2), ce qui donne l'expression suivante de l'énergie interne :

$$U = \frac{3}{2} NkT \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \quad (B-3)$$

On définit l'expression de la capacité calorifique C_v , à volume constant, qui est calculée pour N et V constants par $C_v = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{N,V}$

En utilisant la relation, (B-3) nous trouvons :

$$\left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_{N,V} = \frac{3Nk}{2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} + \frac{3}{2} NkT \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right) \frac{\partial z}{\partial T} \quad (B-4)$$

On cherche $\frac{\partial z}{\partial T}$. On dérive la relation (B-1) par rapport à la température T et on aura :

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{g_{3/2}(z)}{\lambda_{dB}^3} \right) = 0$$

Ce qui conduit à :

$$\frac{\partial g_{3/2}(z)}{\partial T} \lambda_{dB}^3 = -g_{3/2}(z) \frac{3\lambda_{dB}^3}{2T} \frac{\partial T}{\partial T} \quad (B-5)$$

Sachant que : $\frac{\partial g_{3/2}(z)}{\partial T} = \frac{1}{z} g_{1/2}(z) \frac{\partial z}{\partial T}$ et en utilisant (B-5) on a :

$$\frac{\partial z}{\partial T} = -\frac{3z}{2T} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \quad (B-6)$$

Le deuxième terme de (B-4) conduit à :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right) = \frac{1}{z} \left(\frac{g_{3/2}^2(z) - g_{1/2}(z) g_{5/2}(z)}{g_{3/2}^2(z)} \right) \quad (B-7)$$

On remplace (B-6) et (B-7) dans (B-4), et on en déduit l'expression de capacité calorifique à volume constant

$$\frac{C_v}{Nk} = \frac{3}{4} \left(5 \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - 3 \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \right) \quad (B-8)$$

La sommation d'Euler Mac Laurin :

En mathématiques, la formule d'Euler Mac-Laurin (appelée parfois formule sommatoire d'Euler) est une relation entre sommes discrètes et intégrales. Elle fut découverte indépendamment, aux alentours de 1735, par le mathématicien suisse Leonhard Euler (pour accélérer le calcul de limites de séries lentement convergentes) et par l'écossais Colin Mac-Laurin (pour calculer des valeurs approchées d'intégrales).

Pour déterminer des développements asymptotiques de sommes et de séries, la forme la plus utile de la formule de sommation est sans doute :

$$\sum_{n=a}^b f(n) \sim \int_a^b f(x) dx + \frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{(2k)!} \left(f^{(2k-1)}(b) - f^{(2k-1)}(a) \right) \quad (C-1)$$

où a et b sont entiers. Ce développement reste souvent valide même lorsque l'on prend les limites quand $a \rightarrow -\infty$ ou $b \rightarrow +\infty$, ou les deux à la fois. B_{2k} sont les polynômes de Bernoulli.

- Les premiers polynômes de Bernoulli sont :

$$B_0 = 1$$

$$B_1 = x - \frac{1}{2}$$

$$B_2 = x^2 - x + \frac{1}{6}$$

$$B_3 = x^3 + \frac{3}{2}x^2 + \frac{x}{2}$$

$$B_4 = x^4 - 2x^3 + x^2 - \frac{1}{30}$$

- La relation entre les polynômes de Bernoulli et la fonction Zêta de Riemann est:

$$B_{2k} = (-1)^{k-1} \frac{\zeta(2k) 2(2k)!}{(2\pi)^{2k}} \quad (C-2)$$

En se limitant au premier ordre, on peut écrire :

$$\sum_{n=a}^b f(n) \simeq \int_a^b f(x) dx + \frac{f(a) + f(b)}{2} \quad (C-3)$$

Références:

[Abr70] M.Abramowitz, I.A.Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications (1970).

[All38] J.F. Allen, A.D. Misener, Nature 141, 75 (1938).

[And95] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M.R. Matthews, C.E. Wieman et E.A. Cornell, Observation of Bose Einstein Condensation in a dilute atomic vapour, Science 269, 198 (1995).

[And97] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, Science, 275, 637 (1997).

[Bal85] R. Balian, Physique Statistique. Cours de l'Ecole Polytechnique en France T1, T2, (Ellipses1985).

[Bel93] E.Belorizky, W.Goreki, Introduction à la Mécanique Statistique (1993).

[Bra95] C.C. Bradley, C.A. Sackett, J.J. Tollett, and R.G. Hulet, Evidence of Bose Einstein Condensation in an atomic vapor, Phys. Rev. Lett. 75, n°.9, 1687 (1995).

[Bos24] S.N. Bose, Z. Phys.26, 178 (1924).

[Chu98] S. Chu, Rev. Mod. Phys. 70, 685 (1998).

[Cor00] S.L. Cornish, N.R. Claussen, J.L. Roberts, E.A. Cornell, and C.E. Wieman, Stable ^{85}Rb Bose Einstein Condensates With Widely Tunable Interactions, Phys. Rev. Lett.85 (2000), n° 9, 1795.

[Dao09a] N. Daoudi, S.K. Mehdi, S. Kessal, Capacité Calorifique D'un Gaz de Bosons dans une Boite à Deux Dimensions (13^{ème} JSP 2009).

[Dao09b] N. Daoudi, S.K. Mehdi, S. Kessal, Capacité Calorifique D'un Gaz De Bosons Dans une Boite, les 26, 27 et 28 Mai 2009 (CNRA 2009).

[Dao10] N. Daoudi, S. Kessal, Une fugacité plus précise Pour des bosons Confinés dans une boîte (14^{èmes} JSP 2010).

[Dav95] K.B. Davis, H.O. mewes, M.R. Andrews, N.J. Van Druten, D.S. Druten, D.S. Durfree, D. M. Kurn and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett 75,3969 (1995).

[Diu89] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet, Physique Statistique (Hermann, Paris 1989).

URL: <http://cua.mit.edu/ketterle-group/>

[Ein25] A. Einstein. Quantentheorie des cinatomigin idealen Gases. Zweite Abhuhlung. Sitzungsb. Kgl. Preuss. Akad. Wiss, 3, (1925).

[Fri98] D.G. Fried, T.C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S.C. Moss, D. Kleppner, and T.J. Greytak, Bose Einstein Condensation Of Atomic Hydrogen, Physical Review Lett. 81, n° 18, 3811 (1998).

[Ing97] G. L. Ingold and al, Thermodynamics of non-Interacting Bose in low-dimensional potentials, arXiv: cond-mat/ 9611108v2.

[Her05] C. Hermann, Statistical Physics (Springer Science, 2001).

[Hes86] H. F. Hess et al., Phys. Rev. B34, R3476 (1986).

[Hua63] K. Huang, Statistical Mechanics (Wiley, New-york, 1963).

[Kap38] P. Kapitza, Nature 141, 74 (1938).

[Kes10] S. Kessal, N. Daoudi, S.K. Mehdi, Energie Moyenne De Systèmes Bosoniques par l'Ensemble Canonique (CNPA 2010).

[Ket02] W. Ketterle, Bose Einstein Condensation and the Atom Laser, Reviews of Modern Physics, volume 74, October 2008.

[Kos08] D. S. Kosov, M. F. Gelin, A. I. Vdovin, Calculations of Canonical Averages from the Grand Canonical Ensemble, Physical Review E 77, 021120 (2008)

- [Leb01] M. Le Bellac et F.Mortessagne, Thermodynamique Statistique (Dunod, Paris 2001).
- [Lon38] F. London, Nature 141.643 (1938).
- [Meh10] S.K. Mehdi, N. Daoudi, S. Kessal, Canonical and Grand Canonical Ensembles; Discrepancy in Thermodynamical Quantities, 11th Granada Seminar on Computational and Statistical Physics September 13-17, 2010.
- [Mod01] G. Modugno, G. Ferrari, G. Roati, R.J. Brecha, A. Simoni, and M. Inguscio, Bose Einstein Condensation Of Potassium Atoms By Sympathetic Cooling, Science 294, 1320 (2001).
- [Neu83] J.Von. Neumann, Mathematical foundations of quantum mechanics (Princeton 1955), reproduit dans J.A. Wheeler and W.H. Turek, quantum theory and measurement (Princeton, 1983).
- [Pai82] A. Pais, Subtle is the Lord (Oxford University Press, Oxford 1982).
- [Pat96] R. K. Pathria, Statistical Mechanics, Elsevier Butterworth Heinemann (Second Edition 1996).
- [Phi98] W. D. Phillips, Review Modern Physics 70, 721 (1998).
- [Pit03] L. Pitaevskii and S.Stringari, Bose Einstein Condensation (Oxford Science Publications, 2003).
- [Red09] K. Radaouia, Thèse de Magister, ENS, Kouba (2009).
- [Rei65] F. Reif, Fundamentals of statistical and thermal physics (McGraw-Hill, 1965).
- [Ric08] J.M. Richard, Note de Physique Statistique, M1, 2007/2008, Module CPhys-422.
- [Rob01] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, D. Boiron, C.I. Westbrook, and A. Aspect, A Bose Einstein condensate of metastable atoms, Science 292, 461 (2001).

- [Sal01] Silvio R.A.Salinas, Introduction to Statistical Physics (Springer, 2001).
- [Tak03] Y. Takasu, K. Maki, K. Komori, T. Takano, K. Honda, M. Kumakura, Yabuzaki, and Y. Takahashi, Spin-singlet Bose Einstein Condensation Of Two-Electron Atoms, Phys. Rev. Lett. 91, n° 4, 040404-1 (2003).
- [Tan77] C.C.Tannoudji, B.Diu, F.Laloe, Cours Mécanique quantique T1 et T2 (Hermann1977).
- [Tan97] C.C.Tannoudji, cours sur la condensation de Bose Einstein (bosons sans interaction dans une boîte) www.phys-ens.fr/cours/college-de-france/.
- [Tan98_a] C. Cohen- Tannoudji, Rev. Mod. Phys. 70, 707 (1998).
- [Tan98_b] C.C. Tannoudji, Cours de Physique Atomique et Moléculaire (1997-1998).
- [Tan03] C.C.Tannoudji, Séminaire Poincaré 2003, La condensation de Bose Einstein.
- [Tan05] C.C.Tannoudji, J. Dalibard et F. Laloe, La Condensation de Bose Einstein dans les gaz, «Dans Einstein Aujourd’hui Paris 2005 ».
- [Web03] T. Weber, J. Herbig, M. Mark, H.C. Nagerl, and R. Grimm, Bose Einstein Condensation of Cesium, Science 299, 232 (2003).
- [Yav75] B.Yavorski, A.Detlef, Aide Mémoire de Physique (Moscou, 1975).