

N° d'ordre : 07/2017-D/PH

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene

Faculté de Physique

THESE

Présentée pour l'obtention du grade de DOCTEUR EN SCIENCES

En : PHYSIQUE

Spécialité : Sciences Nucléaires

Par : MEHDI Si Khaled

Sujet

**Systemes de bosons par l'ensemble canonique.
Inéquivalence entre ensembles canonique et grand canonique**

Soutenue publiquement, le 19/02/2017, devant le jury composé de :

Mme F.Z. IGHEZOU	Professeur à l'USTHB	Présidente
M. S. KESSAL	Professeur à l'USTHB	Directeur de thèse
M. M. BENAROUS	Professeur à l'UHBB Chlef	Examineur
M. M. DJEBLI	Professeur à l'USTHB	Examineur
M. B. GIRAUD	Directeur de Recherche au CEA Saclay	Examineur
M. D.E. MEDJADI	Professeur à l'ENS Kouba	Examineur

Remerciements

Cette thèse a été réalisée au sein du laboratoire des Sciences Nucléaires et Interactions Rayonnements Matière (SNIRM) de la faculté de physique de l'US.T.H.B. Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance au Professeur Salem KESSAL, directeur du laboratoire SNIRM pour avoir encadré ce travail. Je tiens à lui exprimer, plus particulièrement, ma profonde gratitude pour les discussions fructueuses et enrichissantes ainsi que pour les explications minutieuses concernant ce travail. Enfin, je lui suis reconnaissant pour sa compréhension et surtout pour la patience dont il a fait preuve tout au long de ce travail.

J'exprime ma profonde reconnaissance à Madame F.Z. IGHEZOU, professeure à la faculté de physique d'avoir bien voulu me faire l'honneur de présider le jury de cette thèse.

Je remercie vivement les membres du jury, les professeurs D.E. MEDJADI de l'Ecole Normale Supérieure de Kouba (Alger), M. BENAROUS de l'Université Hassiba Ben Bouali de Chlef, M. DJEBLI de la faculté de physique de l'USTHB et B.G. GIRAUD Directeur de Recherche au CEA de Saclay (Paris) pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail de thèse.

Je tiens à exprimer mes remerciements au Professeur A.C. CHAMI pour sa sympathie et ses encouragements ainsi qu'au professeur M. BOUDJEMA.

J'adresse mes vifs remerciements à N. ADIMI, K. KHALAL et M. HAMHAMI, mes collègues du laboratoire SNIRM pour leur soutien. Merci à N. REDJDAL et N. DJOUHRI pour leurs encouragements.

Je ne saurais oublier le Professeur Youcef BOUDOUMA, pour ses précieux conseils, son soutien moral, ses encouragements et surtout sa disponibilité. Qu'il en soit ici vivement remercié.

Merci à mes amis, ma petite famille et mes parents qui m'ont toujours soutenu pour terminer cette thèse.

Sommaire

Sommaire

Introduction	6
Chapitre I	
Statistiques quantiques	
<u>I.1 Introduction</u>	9
<u>I.2 Grandeurs thermodynamiques dans la théorie de Gibbs</u>	12
<u>I.2.1 L'hypothèse ergodique</u>	12
a) <u>Moyenne temporelle</u>	12
b) <u>Moyenne d'Ensemble</u>	13
c) <u>Hypothèse ergodique.</u>	13
<u>I.2.2 Ensemble Microcanonique</u>	13
a) <u>Distribution Microcanonique</u>	13
b) <u>Grandeurs thermodynamiques</u>	14
<u>I.2.3 Ensemble canonique</u>	15
a) <u>Distribution canonique</u>	15
b) <u>Fonction de Partition et grandeurs thermodynamiques</u>	16
c) <u>Fluctuations de l'énergie</u>	17
<u>I.2.4 Ensemble Grand canonique</u>	18
a) <u>Distribution grand canonique</u>	18
b) <u>Grande Fonction de partition et grandeurs thermodynamiques</u>	20
<u>I.3. Principe d'indiscernabilité</u>	22
a) <u>Distribution de Fermi-Dirac</u>	22
b) <u>Distribution de Bose-Einstein</u>	23
c) <u>Limite classique</u>	23

Chapitre II

Systèmes Bosoniques dans l'ensemble canonique

<u>II.1 Introduction</u>	27
<u>II.2 Systèmes de bosons à nombre fini de niveaux d'énergie</u>	28
<u>II.2.1 Niveaux non dégénérés</u>	28
<u>II.2.1.1 Fonction de partition</u>	28
a) <u>Niveaux quelconques</u>	28
b) <u>Niveaux d'énergie équidistants</u>	30
<u>II.2.1.2 Energie moyenne</u>	31
a) <u>Statistique quantique</u>	32
b) <u>Limite haute température</u>	32
c) <u>Statistique classique</u>	34
<u>II.2.1.3 Capacité calorifique</u>	37
a) <u>Statistique classique</u>	37
b) <u>Statistique quantique</u>	38
<u>II.2.1.4 Corrélations quantiques</u>	41
<u>II.2.2 Niveaux dégénérés</u>	49
a) <u>Fonction de partition</u>	49
b) <u>Energie moyenne</u>	50
<u>II.2.3 Conclusion</u>	52

Chapitre III

Inéquivalence ensembles canonique et grand canonique pour les systèmes bosoniques

<u>III.1 Introduction</u>	53
<u>III.2 Systèmes à deux niveaux d'énergies</u>	56
<u>III.2.1 Ensemble canonique</u>	56
<u>III.2.2 Ensemble Grand canonique</u>	57
<u>III.2.3 Comparaison</u>	58
<u>III.3 Systèmes à trois niveaux d'énergies et plus</u>	62

Sommaire

<u>III.3.1 Ensemble canonique</u>	62
<u>III.3.2 Ensemble Grand canonique</u>	63
<u>III.4 Conclusion</u>	66
Conclusion générale	67
Références	67

Introduction

L'étude d'un problème concret en physique statistique nécessite de préciser dans quel cadre cette étude se fera et de définir le système à étudier avec toutes les contraintes extérieures qui y réfèrent. L'ensemble statistique correspondant sera alors utilisé pour établir des relations entre les grandeurs observables du système. [Ngô88].

En général, et pour un grand nombre de particules de systèmes quantiques (bosons et fermions), le calcul de la fonction de partition canonique dans des systèmes statistiques réels est une tâche très difficile et compliquée. Ceci est dû à l'indiscernabilité des particules identiques.

Par exemple, pour un gaz parfait de fermions ou de bosons à 3 dimensions et à N particules, le calcul de fonction partition canonique est inextricable et devient une tâche considérable, même pour un petit nombre de particules.

Pour remédier à cette difficulté, le calcul est souvent effectué dans la limite de statistique classique où les niveaux sont très serrés (la sommation sur les niveaux d'énergie revient alors à une intégration sur l'espace des phases, avec un état par volume h^3 de cet espace, où h est la constante de Planck). Hors de cette limite, on passe à l'ensemble grand canonique. On y détermine la grande fonction de partition, plus facile mais au prix de l'introduction d'un paramètre, la fugacité z du gaz, liée au nombre de particules N par une relation difficile à expliciter sous forme de fonction.

Comme la fonction de partition grand canonique est plus facilement traitable, les quantités thermodynamiques sont calculées en utilisant l'ensemble grand canonique.

Introduction

Les ensembles canonique et grand canonique sont supposés équivalents dans la limite thermodynamique [Rue69], mais lorsque la taille du système est limitée, les résultats obtenus dans les deux ensembles diffèrent les uns des autres.

En plus, il y a de nombreux systèmes avec un nombre fixe de particules où la description canonique est plus appropriée [Kos08], mais il est souvent beaucoup plus facile d'effectuer les calculs dans l'ensemble grand canonique correspondant. Pour ces systèmes, comme les noyaux chauds [Ros94], les nanoparticules métalliques [Del01], les gaz de bosons ou de fermions dans les pièges atomiques [Pol96], [Her97] et les atomes dans les plasmas [Gil04], la description canonique est plus adaptée.

Il est généralement indiqué dans la littérature que les différents ensembles statistiques sont équivalents, au moins dans la limite thermodynamique [Sal01, Rei98]. Ces ensembles sont censés donner les mêmes grandeurs thermodynamiques dans cette limite. Mais, au cours des deux dernières décennies, cette équivalence a eu un regain d'intérêt. Il a été montré, en premier lieu, que l'ensemble microcanonique et l'ensemble grand canonique ne sont pas équivalents pour le calcul de la population de l'état fondamental dans le cas d'un condensat de Bose Einstein [Gros96].

Plus tard, l'équivalence entre l'ensemble microcanonique et l'ensemble canonique a été activement étudiée. Il a été prouvé que ces ensembles sont équivalents uniquement lorsque l'entropie microcanonique est une fonction concave de l'énergie [Tou11], [Cos06], [Cos05], [Tou04].

Pour les systèmes de spins, il a été démontré que l'équivalence est réalisée uniquement lorsque les interactions sont à courte portée [Cas07], [Kas10], [Kas10b] ; elle n'est pas réalisée lorsque les interactions sont à longue portée.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à tester l'équivalence des ensembles canonique et grand canonique pour les systèmes de bosons sans interactions dans le cas d'un nombre fini de niveaux.

Dans le chapitre 1, nous commencerons notre présentation par un rappel de quelques notions de physique statistique en introduisant les ensembles canoniques et grand canoniques avec toutes les grandeurs thermodynamiques qui s'y attachent.

Dans le second chapitre, nous étudions, par l'ensemble canonique, un système dans lequel N bosons se placent sur des niveaux d'énergie en nombre relativement réduit. Le calcul de la fonction de partition canonique est alors gérable. Nous nous attelons à calculer la fonction de partition pour déduire les grandeurs thermodynamiques de ces systèmes.

Introduction

Nous commençons d'abord par considérer le cas d'un système avec un nombre fini de particules réparties sur un nombre fini de niveaux d'énergie. Nous ferons le calcul pour deux, trois,.....et dix niveaux. Nous considérons, dans une première étape, des niveaux non dégénérés; nous examinerons, ensuite, le cas de niveaux dégénérés.

Dans le troisième chapitre, nous étudions l'inéquivalence entre les ensembles canonique et grand canonique pour l'énergie moyenne et, nous terminerons par une conclusion générale.

Chapitre I

Statistiques quantiques

I.1 Introduction

La physique statistique est l'une des plus importantes théories physiques, fondée dans la seconde moitié du XIXe siècle (Clausius, Maxwell, Gibbs et Boltzmann (dans sa version classique)), puis enrichie par le développement de la mécanique quantique au cours de la première moitié du XXe siècle. Elle s'attelle à l'étude des systèmes à très grand nombre de degrés de liberté.

Les précurseurs sont Daniel Bernoulli (1700-1782), John Herapath (1790-1868) et James Prescott Joule (1818-1889) pour leurs tentatives de construction d'une théorie cinétique des gaz. Cependant les véritables fondateurs de la physique statistique sont Rudolf J. E. Clausius (1822-1888), James Clerk Maxwell (1831-1879) et surtout, Ludwig Eduard Boltzmann (1844-1906) et Josiah Willard Gibbs (1839-1903) [Bal92], [Pat11].

Le champ d'étude de la physique statistique recouvre partiellement celui de la thermodynamique; aussi il convient de préciser la relation entre les deux théories.

La thermodynamique est une théorie phénoménologique ; elle ne cherche pas à fonder ses résultats sur une description microscopique, comme le fera la physique statistique, mais se place directement à l'échelle macroscopique.

La physique statistique permet de comprendre les propriétés macroscopiques des systèmes constitués d'un grand nombre de particules à partir de leurs constituants microscopiques. Elle établit un lien entre le monde microscopique, où chaque particule doit être prise en considération, et le monde macroscopique dans lequel un système est décrit avec un nombre restreint de paramètres accessibles à la mesure.

En effet, la physique statistique couvre un large éventail de domaines d'études, dont on peut juger l'importance en examinant la petite liste d'exemples d'application : propriétés thermodynamiques des gaz et des fluides (fluides normaux, superfluides), une grande partie de la physique des solides (vibrations des atomes des cristaux, dynamique des électrons dans les métaux, semi-conducteurs, défauts et alliages, propriétés magnétiques), thermodynamique du rayonnement dans une étoile, stabilité des étoiles naines blanches et des étoiles à neutrons; matière molle (polymères, cristaux liquides,...), physique des plasmas, thermochimie, biophysique, informatique théorique, étude des réseaux (réseaux de neurones, réseaux de communication, internet...). Les questions posées peuvent concerner aussi bien des situations à l'équilibre (thermodynamique d'un solide, vibrations,...) que des aspects hors équilibre (transport de chaleur, de masse,...).

L'étude d'un problème concret en physique statistique nécessite de préciser dans quel cadre cette étude se fera et on doit définir le système à étudier avec toutes les contraintes extérieures qui s'y exercent. L'ensemble statistique correspondant sera alors utilisé pour établir des relations entre les grandeurs observables du système. [Ngô88].

Dans son recueil, en 1902, J.W.Gibbs [Gib02], en se basant sur l'hypothèse ergodique, a initialement proposé l'étude des propriétés d'un ensemble formé par un grand nombre de systèmes mécaniques indépendants, chacun d'entre eux de nature identique, mais ayant ses propres conditions initiales qui suivent une loi de distribution de probabilité. Cette loi caractérise l'ensemble et fait partie des données de problèmes physiques; c'est pourquoi une partie importante des propriétés physiques du comportement de l'ensemble doit nécessairement être de nature statistique.

Cette théorie est basée sur l'étude d'un ensemble constitué du système donné et d'un très grand nombre de copies virtuelles de ce système qui diffèrent au niveau microscopique et qui se trouvent dans le même état macroscopique

Un état thermodynamique ou macro-état est caractérisé par la spécification d'un certains nombres de grandeurs, par exemple la température, la pression, la densité, la masse totale, etc...

Ainsi, un ensemble pourrait être une collection de toutes les façons dont un nombre N de particules pourraient être organisées dans un système de volume fixé.

Les systèmes statistiques sont des systèmes complexes dont nous ne pouvons pas obtenir toutes les informations pour les caractériser complètement du fait du grand nombre de particules qui les caractérisent. Il est possible de comprendre les propriétés d'un système complexe, sans connaître toutes ces informations car les propriétés qui nous intéressent ne dépendent pas de tous les détails du système.

Dans un système isolé, tous les états microscopiques possibles apparaissent avec une probabilité égale. Cela signifie que le système a un certain nombre d'états pour lesquels ces quantités prennent les mêmes valeurs. Nous pouvons imaginer que nous avons de nombreuses copies du système, toutes caractérisées par le même état macroscopique avec un certain nombre de grandeurs, tels que l'énergie totale, la pression, etc. Toutefois, chaque copie peut être dans un état microscopique différent possible qui semble apparaître le même nombre de fois entre les copies du système au cours d'une longue période de temps.

Selon que les systèmes étudiés soient isolés ou ouverts, à nombre de particules fixé ou variable, on définit plusieurs types d'ensembles. Toutes les propriétés thermodynamiques peuvent être calculées dans n'importe quel ensemble. On distingue :

- L'ensemble micro canonique : systèmes isolés.
- L'ensemble canonique : systèmes avec un nombre fixe de particules (systèmes fermés) et en équilibre thermique avec un réservoir de chaleur. L'équilibre est réalisé lorsque le système a la même température que le réservoir.
- L'ensemble grand canonique : pour les systèmes ouverts, en contact thermique avec un réservoir de chaleur et de particules. L'équilibre est réalisé lorsque le système a le même potentiel chimique et la même température que le réservoir.

I.2 Grandeurs thermodynamiques dans la théorie de Gibbs

I.2.1 L'hypothèse ergodique

Il est difficile de donner une définition simple de la théorie ergodique, car elle utilise des techniques et des exemples de nombreux domaines tels que la théorie des probabilités, la mécanique statistique, la théorie des nombres,....

L'hypothèse ergodique, ou hypothèse d'ergodicité, est une hypothèse fondamentale de la physique statistique. Elle fut formulée initialement par Ludwig Boltzmann en 1871 en introduisant le mot ergoden. Le mot ergodique est un mélange de deux mots grecs: ergon (travail) et Odos (chemin). Elle s'applique alors aux systèmes composés d'un très grand nombre de particules et, affirme, qu'à l'équilibre, la valeur moyenne d'une grandeur calculée de manière statistique est égale à la moyenne d'un très grand nombre de mesures prises dans le temps. La première valeur est celle que la physique statistique permet de calculer, la seconde valeur est proche de ce qu'on peut mesurer expérimentalement. L'hypothèse ergodique est donc fondamentale pour un bon rapprochement entre la théorie et l'expérience.

Un système pour lequel l'hypothèse ergodique est vérifiée sera qualifié de système ergodique. Dans la plupart des cas, il est difficile de démontrer rigoureusement si un système est ergodique ou non. L'analyse mathématique de ce problème a donné naissance à la théorie ergodique qui précise la nature mathématique de l'hypothèse et donne des résultats sur ses conditions de validité.

Dans un système ergodique, on fait l'hypothèse qu'une particule du système passe, sur un temps suffisamment long, par tous les états qui lui sont accessibles. D'autre part, un système d'un grand nombre de particules qui satisfait cette hypothèse, donne à un instant donné, une image de tous les états accessibles à ce système. C'est ainsi que la moyenne temporelle (sur un temps suffisamment long) sera égale à la moyenne d'ensemble.

a) Moyenne temporelle

La valeur mesurée d'une certaine grandeur J d'un système donné, telle que mesurée par le dispositif macroscopique (par exemple, la pression d'un baromètre, la température d'un thermocouple,...) est en fait une moyenne temporelle qui s'écrit sous la forme :

$$\langle J \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t J(u) du \quad (\text{I.1})$$

b) Moyenne d'Ensemble

La moyenne des valeurs instantanées de J sur chaque représentation virtuelle du système se trouvant dans le même état macroscopique mais dans des états microscopiques différents, d'un ensemble est donnée par :

$$\langle J \rangle = \sum_{i=1}^M p_i J_i \quad (\text{I.2})$$

où M représente toutes les représentations virtuelles du système et p_i la probabilité correspondante.

c) Hypothèse ergodique.

L'hypothèse ergodique indique que la moyenne d'ensembles est équivalente à la moyenne temporelle (sur un temps suffisamment long).

$$\langle J \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t J(u) du = \sum_{i=1}^M p_i J_i \quad (\text{I.3})$$

I.2.2 Ensemble microcanonique

En physique statistique, l'ensemble microcanonique est l'ensemble des répliques fictives d'un système réel dont l'énergie (E), le volume (V) et le nombre de particules (N) sont fixés. Cet ensemble statistique a une importance particulière. C'est sur cet ensemble que le postulat de base de la physique statistique s'applique. Cet ensemble permet aussi de déterminer l'ensemble canonique et l'ensemble grand-canonique, à l'aide d'échanges d'énergie ou de particules avec un réservoir. Toutefois, l'ensemble microcanonique a deux inconvénients : les calculs explicites sont souvent extrêmement compliqués et il exige la connaissance de l'énergie avec une précision absolue [Ngô88].

a) Distribution microcanonique

Le postulat de base de la physique statistique s'applique à un système isolé (E, V, N fixés) : étant donné un système isolé en équilibre, il se trouve avec des probabilités égales

dans chacun de ses micro-états accessibles, c'est-à-dire à dire que les Ω états accessibles du système sont également équiprobables.

Si on note p_i la probabilité associée à chaque micro-état i , on obtient alors :

$$p_i = \frac{1}{\Omega} \quad (\text{I.4})$$

b) Grandeurs thermodynamiques

J.W. Gibbs a proposé une définition plus générale de l'entropie statistique S que celle donnée par Boltzmann.:

$$S = -k \sum_s p_s \ln p_s \quad (\text{I.5})$$

où $k = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ est la constante de Boltzmann et la sommation s'effectue sur tous les états notés s du système, de probabilité p_s .

Le premier principe de la thermodynamique nous permet d'écrire la variation d'énergie interne sous la forme :

$$dE = dQ + dW + \mu dN \quad (\text{I.6})$$

où dQ est la chaleur, dW le travail échangé et μ le potentiel chimique du système.

L'équation précédente peut être réécrite en fonction de la température T , de la pression P , du volume V et du nombre de particules N du système.

$$dE = TdS - PdV + \mu dN \quad (\text{I.7})$$

Et donc :

$$dS = \frac{1}{T} dE + \frac{P}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN \quad (\text{I.8})$$

De l'équation précédente, on déduit :

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{N,V}, P = T \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{N,E}, \mu = -T \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V} \quad (\text{I.9})$$

On remarque que la connaissance de la fonction $S(N,V,E)$ pour l'ensemble microcanonique permet de déduire les grandeurs thermodynamiques T, P, μ .

I.2.3 Ensemble canonique

L'ensemble canonique est introduit pour les raisons suivantes :

- Pouvoir traiter des systèmes qui ne sont pas isolés mais en contact thermique avec un thermostat.
- Simplifier les calculs pour les systèmes macroscopiques, par rapport à l'utilisation de l'ensemble microcanonique.

Les inconvénients de l'ensemble microcanonique cités plus haut ont amené Gibbs [Gib02] à introduire une nouvelle mesure où l'énergie n'est pas fixée; le système a un nombre de particules fixé mais peut échanger de l'énergie avec son environnement. On va l'introduire de manière axiomatique [Hua 87].

a) Distribution canonique

Dans l'ensemble canonique, c'est la température qui est fixée ainsi que le nombre de particules. Ceci correspond à un système mis en contact avec un réservoir thermique à la température T , et qui est en équilibre thermique avec ce réservoir ; l'énergie par contre n'est pas fixée.

Un réservoir thermique R (un thermostat) est un système très grand par rapport au système Σ , tel que son interaction avec ce dernier ne modifie pas sa température.

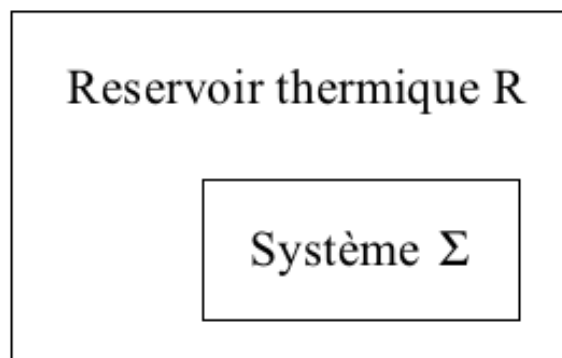


Figure I.1 : illustration d'un système statistique placé dans un réservoir thermique

Les probabilités d'états différents sont différentes; la probabilité d'un état caractérisé par l'énergie E_i est donnée par :

$$p_i = A e^{\frac{-E_i}{kT}} \quad (\text{I.10})$$

où A est une constante qui est déterminée en prenant la somme de toutes les probabilités p_i égale à 1.

Il y a plusieurs façons de retrouver ce résultat, soit à partir de l'ensemble microcanonique du système composé (système + réservoir) ou en utilisant l'énergie libre [Lan84].

Ce résultat fondamental constitue la distribution canonique caractéristique d'un système en équilibre avec un thermostat.

b) Fonction de partition et grandeurs thermodynamiques

En physique statistique, on appelle fonction de partition ou somme d'états, la grandeur Q , définie par:

$$Q = \sum_s e^{-\beta E_s} \quad (\text{I.11})$$

où $e^{-\beta E_s}$, est le facteur de Boltzmann et $\beta = 1/kT$.

Dans le cas où les niveaux d'énergie E_s présentent une dégénérescence $g(E_s)$ la relation précédente se réécrit :

$$Q = \sum_s g(E_s) e^{-\beta E_s} \quad (\text{I.12})$$

Dans le cas d'un continuum d'énergie, si les niveaux d'énergie ne sont plus considérés comme discrets, la sommation précédente se réécrit sous forme intégrale :

$$Q = \int_{E_0}^{\infty} \rho(E) e^{-\beta E} dE \quad (\text{I.13})$$

où $\rho(E)$ est la densité d'états du système et E_0 l'énergie de l'état fondamental, prise souvent égale à zéro.

La fonction de partition dépend donc du coefficient β et des niveaux d'énergie à N particules. Donc on peut réécrire Q , comme une fonction de $T, V, et N$.

$$Q = Q(T, V, N) \quad (\text{I.14})$$

Nous pouvons déduire à partir de la connaissance de la fonction de partition Q les grandeurs thermodynamiques liées à notre système comme l'énergie moyenne, l'entropie et l'énergie libre.

Et nous pouvons aussi déterminer S, μ et P connaissant l'énergie libre de Helmholtz F , qui est la fonction thermodynamique pratique dans ce cas :

$$\text{L'énergie libre de Helmholtz est : } F = -kT \ln Q \quad (\text{I.15})$$

$$\text{L'énergie moyenne est : } \bar{E} = kT^2 \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial T} \right)_{V, N} \quad (\text{I.16})$$

$$\text{Sachant que : } dF = -SdT + \mu dN - PdV, \quad (\text{I.17})$$

on obtient alors :

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{N, V}, P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{N, T}, \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T, V} \quad (\text{I.18})$$

c) Fluctuations de l'énergie

L'ensemble canonique permet de décrire un système d'énergie moyenne \bar{E} qui est en équilibre thermique avec un thermostat. Toutefois, cette énergie n'est pas constante, mais fluctue autour de sa valeur moyenne. On peut mesurer aisément l'énergie moyenne du système et l'incertitude sur la mesure de cette grandeur est donnée par l'écart quadratique moyen ou fluctuation quadratique moyenne ΔE . La fluctuation relative autour de \bar{E} est donnée par :

$$\frac{\Delta E}{\bar{E}} = \frac{\sqrt{kT^2 c_v}}{\bar{E}} \quad (\text{I.19})$$

D'une part l'énergie moyenne \bar{E} et la capacité calorifique c_v , étant toutes les deux des grandeurs extensives, donc proportionnelles au nombre de particule N et, d'autre part la température étant un grandeur intensive, nous avons :

$$\frac{\Delta E}{\bar{E}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (\text{I.20})$$

On voit donc que les fluctuations relatives sont très faibles quand le nombre de particules est grand. On peut alors considérer que l'énergie du système peut être prise comme étant égale à sa valeur moyenne \bar{E} .

I.2.4 Ensemble grand canonique

L'ensemble grand canonique décrit le comportement statistique à l'équilibre d'un système, qui échange à la fois de l'énergie et des particules avec un réservoir, avec lequel il interagit faiblement. On suppose ce réservoir suffisamment grand pour que les échanges de chaleur et de particules avec le système étudié ne modifient fortement ni sa température, ni son potentiel chimique.

a) Distribution grand canonique

Soit un système (S), de volume V , plongé dans un réservoir (S'), avec lequel il peut échanger de l'énergie et des particules. Le système (S) est beaucoup plus petit que le réservoir (S'). Le système global formé de (S) et (S') est supposé isolé et en équilibre statistique ; son énergie est E_0 , son nombre de particules N_0 et son volume V .

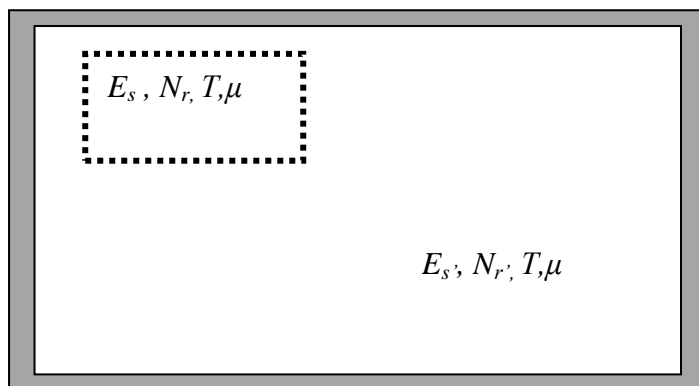


Figure I.2 : Système (S) en contact avec un réservoir (S'). Il y a échange d'énergie et de particules.

Si à un instant particulier t , le système (S) est dans un état caractérisé par le nombre de particules N_r tel que $N_r \ll N_0$ et l'énergie E_s telle que $E_s \ll E_0$, alors le réservoir aura un nombre de particules $N_{r'}$ et une énergie $E_{s'}$, tels que :

$$\begin{cases} N_r + N_{r'} = N_0 \\ E_s + E_{s'} = E_0 \end{cases} \quad (\text{I.21})$$

La probabilité p_{rs} que le système (S) soit dans l'état caractérisé par le nombre de particules N_r et l'énergie E_s s'écrit donc :

$$p_{rs} = \frac{\Omega(E_0 - E_s, N_0 - N_r)}{\Omega_T} = \frac{\Omega(E_{s'}, N_{r'})}{\Omega_T} \quad (\text{I.22})$$

où $\Omega(E_{s'}, N_{r'})$ est le nombre de micro-états correspondants du réservoir. Ω_T est égal au nombre total de micro-états accessibles au système global ($S+S'$).

On peut donc écrire :

$$p_{rs} = C \Omega(E_0 - E_s, N_0 - N_r) \quad (\text{I.23})$$

C , étant une constante déduite en normalisant la probabilité ($\sum p_{rs} = 1$).

Comme le système est beaucoup plus petit que le réservoir, on peut faire un développement limité de $\text{Ln}[\Omega(E_0 - E_s, N_0 - N_r)]$ au voisinage de E_0, N_0 :

$$\begin{aligned} \text{Ln}[\Omega(E_0 - E_s, N_0 - N_r)] &= \text{Ln}[\Omega(E_0, N_0)] - \\ &E_s \left(\frac{\partial \text{Ln}[\Omega(E_{s'}, N_{r'})]}{\partial E} \right)_{E=E_0} - N_r \left(\frac{\partial \text{Ln}[\Omega(E_{s'}, N_{r'})]}{\partial N} \right)_{N=N_0} + \dots \end{aligned} \quad (\text{I.24})$$

Les dérivées partielles intervenant dans l'expression ci-dessus sont reliées à la température du réservoir et au potentiel chimique par [Pat11]:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial \text{Ln}[\Omega(E_{s'}, N_{r'})]}{\partial E} \right)_{E=E_0} = \beta = 1/kT \\ \left(\frac{\partial \text{Ln}[\Omega(E_{s'}, N_{r'})]}{\partial N} \right)_{N=N_0} = -\beta \mu = -\mu/kT \end{cases} \quad (\text{I.25})$$

On aura alors :

$$\text{Ln}[\Omega(E_0 - E_s, N_0 - N_r)] = \text{Ln}[\Omega(E_0, N_0)] - \beta E_s + \beta \mu N_r \quad (\text{I.26})$$

$$\Omega(E_0 - E_s, N_0 - N_r) = \Omega(E_0, N_0) e^{-\beta E_s + \beta \mu N_r} \quad (\text{I.27})$$

où $\Omega(E_0, N_0)$ est une constante.

On peut alors écrire :

$$p_{rs} = \frac{e^{-\beta(E_s - \mu N_r)}}{\sum_{r,s} e^{-\beta(E_s - \mu N_r)}} \quad (\text{I.28})$$

C'est la distribution grand canonique.

b) Grande Fonction de partition et grandeurs thermodynamiques

On appelle grande fonction de partition la somme :

$$\Xi = \sum_{r,s} e^{-\alpha N_r - \beta E_s} \quad (\text{I.29})$$

où la sommation est effectuée sur tous les états accessibles (en énergie et en nombre de particules) au système étudié.

En introduisant la fugacité du système :

$$z = e^{-\alpha} = e^{\mu/kT} \quad (\text{I.30})$$

où μ est le potentiel chimique, $\beta = 1/kT$, k étant la constante de Boltzmann et T la température du système.

En effectuant la sommation sur E (à N constant), nous pouvons écrire la grande fonction de partition sous la forme :

$$\Xi = \sum_{\ell} z^{N_{\ell}} Q_{N_{\ell}}(V, T) \quad (\text{I.31})$$

où $Q_{N_\ell}(V, T)$ est la fonction de partition canonique du système quand il a N_ℓ particules dans un volume V , à la température T .

$$\mathcal{E} = \sum_{\ell} e^{-\beta(E_{\ell} - \mu N_{\ell})} \quad (\text{I.32})$$

La sommation sur ℓ porte sur tous les micro états possibles du système, sans restriction sur leurs énergies E_{ℓ} et leurs nombres de particules N_{ℓ} ; la seule contrainte dans le choix des micro états est que le volume V soit fixé.

La connaissance de la grande fonction de partition \mathcal{E} permet d'obtenir toutes les propriétés thermodynamiques du système :

- Le nombre de particules moyen du système :

$$\bar{N} = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln \mathcal{E}}{\partial \mu} \right)_{T, V} \quad (\text{I.33})$$

- L'énergie moyenne du système :

$$\bar{E} = - \left(\frac{\partial \ln \mathcal{E}}{\partial \beta} \right)_{z, V} \quad (\text{I.34})$$

- L'entropie du système se calcule en utilisant sa définition générale :

$$S = k \left(\frac{\partial T \ln \mathcal{E}}{\partial T} \right)_{\mu, V} \quad (\text{I.35})$$

Par analogie avec l'énergie libre en distribution canonique, on définit une nouvelle grandeur thermodynamique J que nous appellerons le grand potentiel, sous la forme:

$$J = -kT \ln \mathcal{E} \quad (\text{I.36})$$

On retiendra que : $J = \bar{E} - \mu \bar{N} - TS \quad (\text{I.37})$

Le grand potentiel est une fonction de la température, du potentiel chimique ainsi que des autres paramètres extérieurs, tels que le volume.

$$dJ = -PdV - SdT - \bar{N}d\mu \quad (\text{I.38})$$

On peut écrire :

$$S = - \left(\frac{\partial J}{\partial T} \right)_{\mu, V} \quad \bar{N} = - \left(\frac{\partial J}{\partial \mu} \right)_{T, V} \quad P = - \left(\frac{\partial J}{\partial V} \right)_{T, \mu} \quad (\text{I.39})$$

I.3. Principe d'indiscernabilité

Les différents ensembles décrits précédemment, s'appliquent pour des systèmes de particules qui peuvent être discernables ou indiscernables. Ceci nous amène à parler d'un principe qui a des conséquences très importantes sur la statistique et qui est le principe d'indiscernabilité. Le principe d'indiscernabilité est une propriété quantique qui conduit à la symétrie ou l'antisymétrie des fonctions d'ondes dans l'échange des particules.

En effet, en mécanique quantique, on distingue deux types de particules : les fermions et les bosons. La distinction entre les deux est liée à leur moment angulaire intrinsèque, le spin. Ces particules sont indiscernables : la mesure (donc la probabilité de présence) est insensible à l'échange de deux particules quantiques identiques.

Les fermions sont les particules de spin demi-entier, ainsi que tous les ensembles formés d'un nombre impair de fermions. Ils sont indiscernables et obéissent à la statistique de Fermi-Dirac ; ils satisfont au principe de Pauli qui interdit à deux fermions identiques de se trouver dans le même état quantique.

Les bosons sont les particules de spin entier, ainsi que les ensembles de bosons et les ensembles formés d'un nombre pair de fermions. Les bosons obéissent à la statistique de Bose-Einstein [Ein25]. Ils sont indiscernables ; on peut en mettre autant que l'on veut sur un niveau.

a) Distribution de Fermi-Dirac

Les fermions obéissent à la statistique de Fermi-Dirac. On ne peut avoir plus d'un fermion par état quantique.

Considérons un système composé de N fermions identiques qui se placent sur les i niveaux d'énergie différents, de dégénérescence g_i .

On a alors dans chaque niveau i , n_i sous-niveaux occupés et $(g_i - n_i)$ sous-niveaux inoccupés. Ceci peut être réalisé de $\frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}$ Manières.

Le nombre total de configurations du système est donné par la relation suivante :

$$\Omega = \prod_i C_{g_i}^{n_i} = \prod_i \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!} \quad (\text{I.40})$$

En prenant le logarithme du nombre total de configurations et, en faisant usage de la formule de Stirling, on obtient :

$$\ln\Omega = \sum_i [g_i \ln(g_i) - n_i \ln(n_i) - g_i \ln(g_i - n_i) + n_i \ln(g_i - n_i)] \quad (\text{I.41})$$

La distribution la plus probable, est telle que :

$$d\ln\Omega = 0 \quad (\text{I.42})$$

où la variation est effectuée par rapport aux nombres de particules n_i . Or nous avons, par conservation du nombre de particules et de l'énergie, les deux contraintes:

$$\sum_i n_i = N \quad \text{et} \quad \sum_i n_i \varepsilon_i = E \quad (\text{I.43})$$

Pour tenir compte de ces contraintes, données par l'équation (I.43); on introduit les multiplicateurs de Lagrange α et β :

$$d\ln\Omega - \alpha \sum \delta n_i - \beta \sum \varepsilon_i \delta n_i = 0 \quad (\text{I.44})$$

Les contraintes sur l'énergie et le nombre de particules, imposent l'utilisation de la méthode des multiplicateurs de Lagrange qui est une méthode permettant de trouver des points stationnaires (maximum, minimum...) d'une fonction dérivable d'une ou plusieurs variables.

En tenant compte des contraintes cette sommation doit être nulle pour toute variation δn_i . On doit avoir

$$\ln(n_i) - \ln(g_i - n_i) + \alpha + \beta \varepsilon_i = 0 \quad (\text{I.45})$$

Ce qui nous amène à la distribution de Fermi-Dirac (notée n_i^{FD}) :

$$n_i^{FD} = \frac{g_i}{e^{(\alpha + \beta \varepsilon_i)} + 1} \quad (\text{I.46})$$

où $\alpha = -\mu/kT$ et $\beta = 1/kT$ (\text{I.47})

Nous avons alors :

$$n_i^{FD} = \frac{g_i}{e^{\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}} + 1} \quad (\text{I.48})$$

b) Distribution de Bose-Einstein

Soit un système composé de N bosons identiques qui se placent sur i niveaux différents, chaque niveau i d'énergie ε_i , est dégénéré g_i fois et contient n_i bosons.

Ce système de bosons peut être représenté en considérant la répartition de n_i particules dans g_i boîtes. Une manière de construire g_i boîtes est de le faire en utilisant $(g_i - 1)$ cloisons. Considérons alors une entité qui peut être une particule ou une cloison : on a ainsi $(n_i + g_i - 1)$ entités.

Le nombre de permutations possibles sur ces entités est $(n_i + g_i - 1)!$. Mais les permutations sur les particules (au nombre de $n_i!$) ainsi que les permutations sur les cloisons (au nombre de $(g_i - 1)!$), ne changent pas la configuration.

Donc le nombre total de configurations est égal à :

$$\Omega = \prod_i \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!} \quad (\text{I.49})$$

Rendre $\text{Log}\Omega$ maximum (et donc Ω maximum) en tenant compte des contraintes (I.43), nous conduit à l'équation.

$$\ln(n_i) - \ln(g_i + n_i - 1) + \alpha + \beta\varepsilon_i = 0 \quad (\text{I.50})$$

Ceci entraîne que n_i est donné par la distribution de Bose-Einstein (notée n_i^{BE}) qu'on peut écrire sous la forme :

$$n_i^{BE} = \frac{g_i}{e^{\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right)} - 1} \quad (\text{I.51})$$

c) Limite classique

Les deux distributions quantiques décrites précédemment s'écrivent en une seule équation sous la forme :

$$n_i^{FD-BE} = \frac{g_i}{e^{\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right)} \pm 1} \quad (\text{I.52})$$

Dans la limite classique, il n'y a plus de différence entre fermions et bosons. Ceci n'est possible que si on néglige le terme ± 1 dans l'expression (I.52) devant $e^{\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right)}$.

$$n_i^{FD} \approx n_i^{BE} \approx g_i e^{-\left(\frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}\right)} \quad (\text{I.53})$$

L'expression (I.51) n'est autre que la distribution de Maxwell-Boltzmann corrigée (statistique classique). Nous avons donc :

$$n_i^{FD} \approx n_i^{BE} \approx n_i^{MB} \quad (\text{I.54})$$

Lorsque $\frac{n_i}{g_i} \ll 1$. C'est le cas des faibles densités.

En ce qui concerne un système où nous avons un grand nombre de particules libres dans un volume V , ce qui est le cas pour un gaz, la condition pour la limite classique est donnée par [And09] :

$$n\lambda_{DB}^3 \ll 1 \quad (\text{I.55})$$

où $\lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}$ est la longueur d'onde thermique de De Broglie, m , la masse de la particule et, n la densité des particules.

On représente les particules par des paquets d'onde de largeur λ . Lorsque la longueur d'onde de De Broglie est très inférieure à la distance moyenne entre les particules, les fonctions d'onde ne se recouvrent pas ou présentent un faible recouvrement et les effets quantiques deviennent négligeables. C'est la limite classique.

La figure I.3 montre la différence entre les trois distributions : Fermi-Dirac (FD), Bose-Einstein (BE) et Maxwell-Boltzmann (MB), ainsi que leur correspondance dans la limite classique.

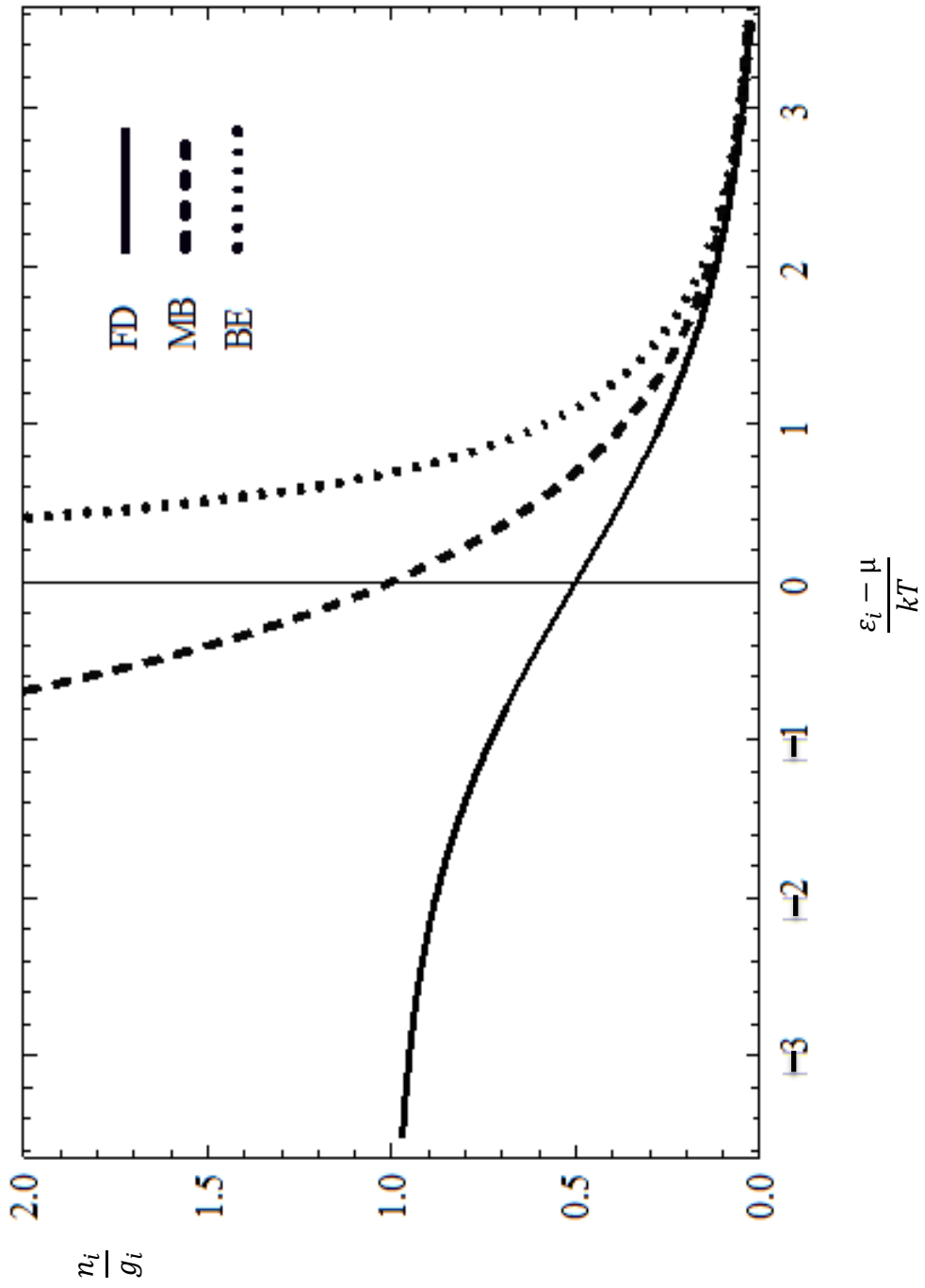


Figure I.3 : Variation de l'occupation $\frac{n_i}{g_i}$ d'un état i d'énergie ϵ_i en fonction de $\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}$ pour les trois distributions (FD, MB, BE)

Chapitre II

Systèmes Bosoniques dans l'ensemble canonique

II.1 Introduction

En général, le calcul de la fonction de partition canonique dans les systèmes statistiques réels est compliqué, quand on prend en compte l'indiscernabilité des particules (calcul en statistique quantique). Si on prend l'exemple du gaz parfait à 3 dimensions à N particules, le calcul est inextricable. Pour y remédier, le calcul est effectué souvent dans la limite de la statistique classique où les niveaux sont très serrés (la sommation sur les niveaux d'énergie revient alors à une intégration sur l'espace des phases, avec un état par volume h^3 de cet espace, où h est la constante de Planck). Hors de cette limite, on passe à l'ensemble grand canonique. On y détermine la grande fonction de partition, plus facile mais au prix de l'introduction d'un paramètre, la fugacité z du gaz, liée au nombre de particules N par une relation difficile à expliciter sous forme de fonction.

Dans ce travail, nous étudions, par l'ensemble canonique, un système dans lequel N bosons se placent sur des niveaux d'énergie en nombre relativement réduit (une dizaine de niveaux). Le calcul de la fonction de partition canonique est alors gérable.

Nous nous attelons à calculer la fonction de partition canonique pour en déduire les grandeurs thermodynamiques de ces systèmes.

Nous considérons d'abord le cas d'un système avec un nombre fini de particules réparties sur un nombre fini de niveaux d'énergie. Nous ferons le calcul pour deux, trois,.....et dix niveaux. Nous considérons dans une première étape, des niveaux non dégénérés; nous examinerons ensuite le cas de niveaux dégénérés.

II.2 Systèmes de bosons à nombre fini de niveaux d'énergie

Nous nous intéressons aux systèmes de bosons répartis sur un petit nombre de niveaux d'énergie. La fonction de partition canonique est calculable dans ce cas. Nous pouvons alors déterminer l'énergie moyenne canonique. Nous la comparerons plus tard à l'énergie moyenne déduite de l'ensemble grand canonique.

II.2.1 Niveaux non dégénérés

II.2.1.1 Fonction de partition

La fonction de partition est une grandeur fondamentale qui englobe les propriétés statistiques d'un système à l'équilibre thermodynamique. Elle décrit aussi comment n particules sont réparties entre les différents niveaux d'énergie d'un système donné.

a) Niveaux quelconques

Considérons un système de N bosons de spin nul répartis sur deux niveaux respectivement d'énergies a et b . Sans perte de généralité, nous considérons le cas d'un spin nul; celui d'un spin non nul, se traite simplement en ajoutant une dégénérescence due au spin.

Ce système est en équilibre à la température T . Pour calculer la fonction de partition, nous avons besoin des énergies accessibles au système. Pour cela nous distribuons i particules sur le niveau d'énergie a et $(N - i)$ sur le niveau d'énergie b ; nous faisons ensuite varier i de zéro à N .

Dans ce cas la fonction de partition canonique pour un système à deux niveaux s'écrit comme suit :

$$Q_2 = \sum_{i=0}^N e^{-\beta(a i + b (N-i))} \quad (\text{II.1})$$

où, $\beta = 1/kT$ et k est la constante de Boltzmann

En utilisant la relation donnant la somme géométrique:

$$\sum_{i=0}^N e^{\alpha i} = \frac{1 - e^{\alpha(N+1)}}{1 - e^{\alpha}} \quad (\text{II.2})$$

On peut mettre Q_2 sous la forme simple et symétrique:

$$Q_2 = \frac{e^{-\beta a(N+1)}}{e^{-\beta a} - e^{-\beta b}} + \frac{e^{-\beta b(N+1)}}{e^{-\beta b} - e^{-\beta a}} \quad (\text{II.3})$$

On considère maintenant un système à trois niveaux d'énergies, notés respectivement a , b et c . Pour parcourir toutes les configurations possibles, on place i particules dans le niveau d'énergie a , j particules dans le niveau d'énergie b et $(N - i - j)$ particules dans le niveau d'énergie c . On fait varier i de zéro à N , et pour une valeur de i donnée, j de zéro à $(N - i)$. La fonction de partition canonique, est alors donnée par la relation suivante :

$$Q_3 = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} e^{-\beta(a i + b j + c (N-i-j))} \quad (\text{II.4})$$

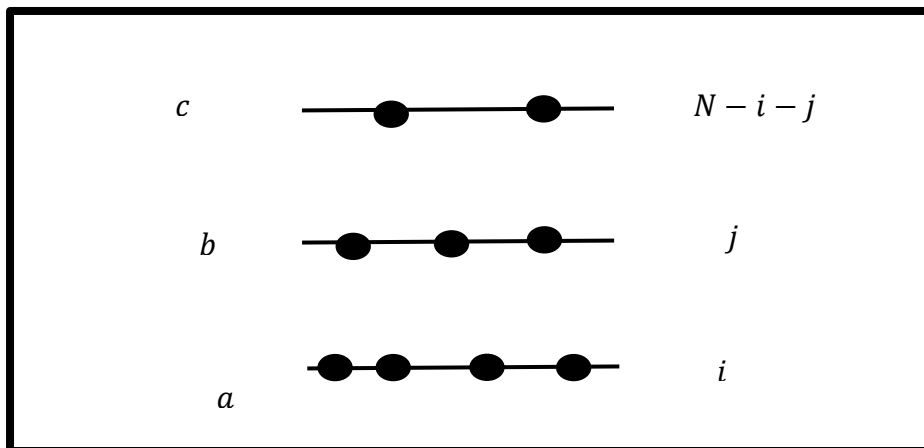


Figure II.1 : répartition de N particules indiscernables (bosons de spin nul) sur trois niveaux d'énergie distincts.

En effectuant les sommations et en groupant les termes, cette relation peut être réduite à la forme simple et symétrique :

$$Q_3 = \frac{e^{-\beta a (N+2)}}{(e^{-\beta a} - e^{-\beta b})(e^{-\beta a} - e^{-\beta c})} + \frac{e^{-\beta b (N+2)}}{(e^{-\beta b} - e^{-\beta a})(e^{-\beta b} - e^{-\beta c})} + \frac{e^{-\beta c (N+2)}}{(e^{-\beta c} - e^{-\beta a})(e^{-\beta c} - e^{-\beta b})} \quad (\text{II.5})$$

En se basant sur ces résultats, et en raisonnant par récurrence, on peut aisément déduire l'expression de la fonction de partition pour N bosons de spin nul répartis sur quatre niveaux a, b, c et d :

$$Q_4 = \frac{e^{-\beta a (N+3)}}{(e^{-\beta a} - e^{-\beta b})(e^{-\beta a} - e^{-\beta c})(e^{-\beta a} - e^{-\beta d})} + \frac{e^{-\beta b (N+3)}}{(e^{-\beta b} - e^{-\beta a})(e^{-\beta b} - e^{-\beta c})(e^{-\beta b} - e^{-\beta d})} \\ + \frac{e^{-\beta c (N+3)}}{(e^{-\beta c} - e^{-\beta a})(e^{-\beta c} - e^{-\beta b})(e^{-\beta c} - e^{-\beta d})} + \frac{e^{-\beta d (N+3)}}{(e^{-\beta d} - e^{-\beta a})(e^{-\beta d} - e^{-\beta b})(e^{-\beta d} - e^{-\beta c})} \quad (\text{II.6})$$

La généralisation à n niveaux d'énergie est directe.

b) Niveaux d'énergies équidistants

Dans le cas où les niveaux d'énergies sont équidistants d'une valeur ε de telle sorte que $a = 0, b = \varepsilon, c = 2\varepsilon, \text{etc...}$; les expressions précédentes de la fonction de partition se simplifient et permettent de donner une forme récurrente.

Prenons l'exemple d'un système à deux niveaux d'énergies équidistants; on aura pour expression de la fonction de partition :

$$Q_2 = \frac{1}{1 - e^{-\beta \varepsilon}} + \frac{e^{-\beta \varepsilon (N+1)}}{e^{-\beta \varepsilon} - 1} = \frac{1 - e^{-\beta \varepsilon (N+1)}}{1 - e^{-\beta \varepsilon}} \quad (\text{II.7})$$

qui peut se réduire à l'expression suivante :

$$Q_2 = \frac{e^{\beta \varepsilon} - e^{-N \beta \varepsilon}}{e^{\beta \varepsilon} - 1} \quad (\text{II.8})$$

Dans le cas d'un système à trois niveaux, l'expression devient :

$$Q_3 = \frac{1-e^{-\beta\varepsilon(N+1)}}{1-e^{-\beta\varepsilon}} \times \frac{1-e^{-\beta\varepsilon(N+2)}}{1-e^{-2\beta\varepsilon}} \quad (\text{II.9})$$

qu'on peut mettre sous la forme récurrente :

$$Q_3 = \frac{e^{\beta\varepsilon} - e^{-N\beta\varepsilon}}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \times \frac{e^{2\beta\varepsilon} - e^{-N\beta\varepsilon}}{e^{2\beta\varepsilon} - 1} = Q_2 \times \frac{e^{2\beta\varepsilon} - e^{-N\beta\varepsilon}}{e^{2\beta\varepsilon} - 1} \quad (\text{II.10})$$

Et on peut facilement en déduire l'expression pour 4 niveaux équidistants, qui prend la forme :

$$Q_4 = Q_3 \times \frac{e^{3\beta\varepsilon} - e^{-N\beta\varepsilon}}{e^{3\beta\varepsilon} - 1} \quad (\text{II.11})$$

Et d'une manière plus générale, pour un système à n niveaux équidistants, on aura l'expression suivante :

$$Q_n = \frac{e^{\beta\varepsilon} - e^{-N\beta\varepsilon}}{e^{\beta\varepsilon} - 1} \times \frac{e^{2\beta\varepsilon} - e^{-N\beta\varepsilon}}{e^{2\beta\varepsilon} - 1} \times \dots \times \frac{e^{(n-1)\beta\varepsilon} - e^{-N\beta\varepsilon}}{e^{(n-1)\beta\varepsilon} - 1} = Q_{n-1} \times \frac{e^{(n-1)\beta\varepsilon} - e^{-N\beta\varepsilon}}{e^{(n-1)\beta\varepsilon} - 1} \quad (\text{II.12})$$

II.2.1.2 Energie moyenne

A partir de la fonction de partition, on calcule l'énergie moyenne, en utilisant la relation suivante :

$$\overline{E}_n = - \frac{\partial \text{Log}(Q_n)}{\partial \beta} \quad (\text{II.13})$$

Compte tenu du nombre fini de niveaux que nous avons considérés, la fonction de partition prend une forme simple. Il est pratique de considérer le cas où les niveaux d'énergies sont équidistants.

a) Statistique quantique

Nous considérons un système de N bosons de spin nul répartis sur deux niveaux d'énergie 0 et ε . Ce système est en équilibre à la température T . L'expression de l'énergie moyenne sera comme suit :

$$\overline{E_{2q}} = \varepsilon \left[\frac{1}{e^{\beta \varepsilon} - 1} - \frac{N+1}{e^{(N+1)\beta \varepsilon} - 1} \right] \quad (\text{II.14})$$

Dans le cas où le système contient trois niveaux équidistants, l'énergie moyenne sera une combinaison de l'énergie moyenne pour un système à deux niveaux et d'un terme récurrent :

$$\overline{E_{3q}} = \overline{E_{2q}} + \varepsilon \left[\frac{2}{e^{2\beta \varepsilon} - 1} - \frac{N+2}{e^{(N+2)\beta \varepsilon} - 1} \right] \quad (\text{II.15})$$

Les calculs seront similaires pour des systèmes à 4, 5...et même n niveaux équidistants....

On remarque qu'à chaque fois l'énergie moyenne sera incrémentée d'un terme récurrent. On peut écrire :

$$\overline{E_{nq}} = \overline{E_{(n-1)q}} + \varepsilon \left[\frac{(n-1)}{e^{(n-1)\beta \varepsilon} - 1} - \frac{(N+n-1)}{e^{(N+n-1)\beta \varepsilon} - 1} \right] \quad (\text{II.16})$$

b) Limite haute température

Il est intéressant de chercher la limite vers laquelle tend l'énergie moyenne par particule, quand on augmente la température, c'est-à-dire voir le comportement asymptotique de cette énergie et sa variation en fonction du nombre de niveaux d'énergie du système étudié, dans la limite $\beta \varepsilon \ll 1$ ($T \nearrow \nearrow$).

Pour simplifier les expressions calculées précédemment, nous utilisons l'approximation suivante, dans le cas où x est très petit :

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} \quad (\text{II.17})$$

Ce qui nous donnera pour la valeur de l'énergie moyenne :

$$\overline{E_2} \approx \varepsilon \left(\frac{N}{2} - \left(\frac{N}{6} + \frac{N^2}{12} \right) \beta \varepsilon \right) + O[\beta \varepsilon]^3 \quad (\text{II.18})$$

En utilisant l'approximation :

$$\lim_{\beta \varepsilon \ll 1} \overline{E_2} \approx \lim_{\beta \varepsilon \ll 1} \varepsilon \left(\frac{N}{2} - \left(\frac{N}{6} + \frac{N^2}{12} \right) \beta \varepsilon \right) \approx N \frac{\varepsilon}{2} \quad (\text{II.19})$$

L'énergie moyenne par particule notée $\overline{E_{2p}}$, est égale à :

$$\overline{E_{2p}} = \frac{\varepsilon}{2} \quad (\text{II.20})$$

Dans le cas d'un système à 3 niveaux d'énergie équidistants, l'expression obtenue de l'énergie moyenne par particule est la suivante:

$$\overline{E_{3p}} = \overline{E_{2p}} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon \quad (\text{II.21})$$

Les calculs seront similaires pour des systèmes à quatre, cinq niveaux...etc...Nous avons remarqué qu'à chaque fois qu'on ajoute un niveau d'énergie au système, l'énergie moyenne par particule sera incrémentée d'une valeur égale à $\frac{\varepsilon}{2}$, dans la limite haute température. C'est-à-dire que pour un système à quatre niveaux, on aura :

$$\overline{E_{4p}} = \frac{3\varepsilon}{2} \quad (\text{II.22})$$

D'une façon plus générale, pour un système à n niveaux équidistants (n étant un nombre fini de niveaux), dont l'énergie du premier niveau est égale à zéro, le deuxième niveau est égale à ε , etc... , l'énergie moyenne par particule est donnée par l'expression suivante :

$$\overline{E_{np}} = (n - 1) \frac{\varepsilon}{2} \quad (\text{II.23})$$

c) Statistique classique

Nous allons nous intéresser, cette fois-ci, au calcul des fonctions de partition et déduire les énergies moyennes pour les mêmes systèmes étudiés précédemment dans le cas de la statistique classique (particules discernables).

Pour un système à deux niveaux d'énergies équidistants, la fonction de partition notée Q_{2cl} s'écrit sous la forme suivante, où ε représente l'écart d'énergie entre les niveaux et N le nombre de particules :

$$Q_{2cl} = (1 + e^{-\beta \varepsilon})^N \quad (\text{II.24})$$

Ce qui nous donne comme expression de l'énergie moyenne par particule, en utilisant la relation (II.13) :

$$\frac{\overline{E_{2cl}}}{N} = \frac{e^{-\beta \varepsilon}}{1 + e^{-\beta \varepsilon}} \varepsilon = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon} + 1} \varepsilon \quad (\text{II.25})$$

On peut obtenir de la même façon l'expression de l'énergie moyenne pour un système à 3 niveaux :

$$\frac{\overline{E_{3cl}}}{N} = \frac{e^{\beta \varepsilon} + 2}{e^{2\beta \varepsilon} + e^{\beta \varepsilon} + 1} \varepsilon \quad (\text{II.26})$$

Il est intéressant de voir l'évolution de l'énergie moyenne par particule en fonction de la température pour des systèmes traités soit par la statistique classique soit par la statistique quantique. Sur les figures ci-dessous, nous avons représenté respectivement cette variation pour des systèmes à deux et trois niveaux (traitement classique : figure II.2) et pour un système à deux niveaux pour un nombre de particules $N = 100$ et 1000 (traitement quantique : figure II.3).

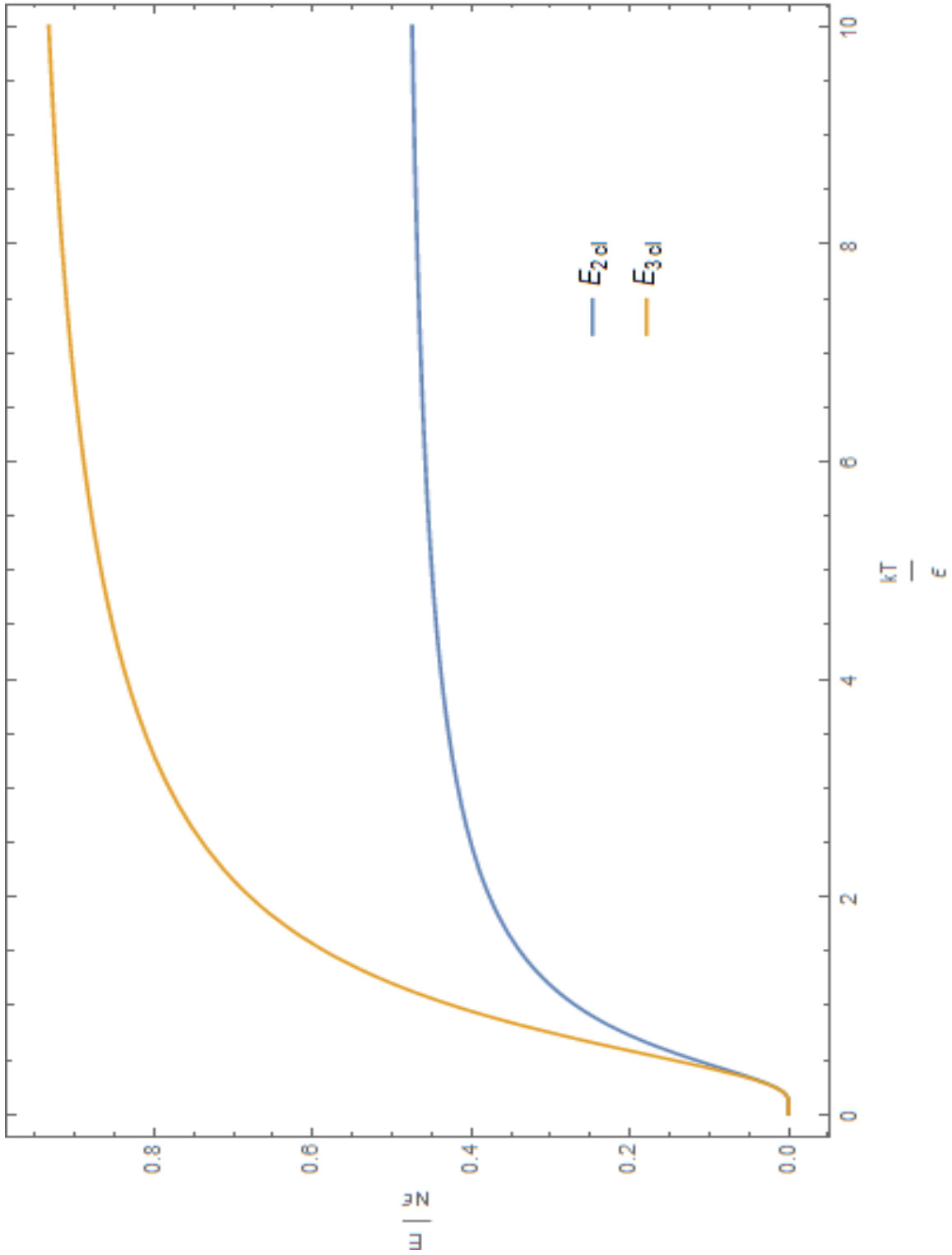


Figure II.2 : Energie moyenne par particule $\frac{E_{ncl}}{N\epsilon} = f\left(\frac{k}{\epsilon} T\right)$ pour un système à 2 et 3 niveaux d'énergies équidistants, en fonction de la température, calculée par la statistique classique.

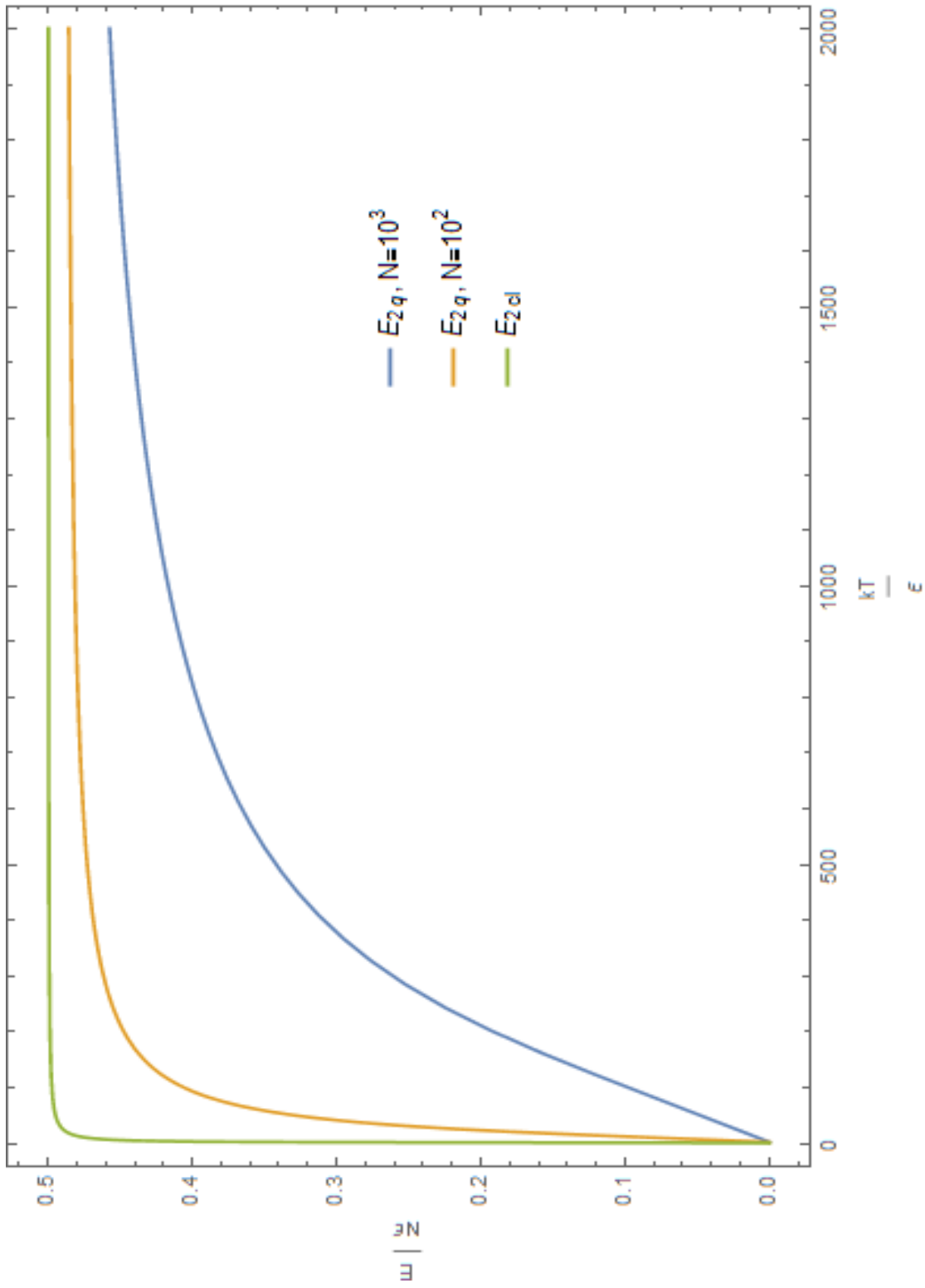


Figure II.3 : Energie moyenne par particule pour un système à deux niveaux, calculée par les statistiques classique et quantique, pour un nombre de particules $N = 100$ et 1000 .

Nous constatons qu'à haute température ($\beta\varepsilon \ll 1$) les deux énergies moyennes convergent vers une même valeur (voir figure II.3). Cependant dans les régions de basse température, l'écart entre ces deux énergies est bien apparent. Cet écart pourrait être expliqué par la corrélation quantique entre les particules, corrélation nulle dans le cas classique; sachant que l'énergie moyenne par particule dans le cas de la statistique classique est indépendante du nombre de particule, ce qui n'est pas le cas dans la statistique quantique. Il est bien entendu que nous considérons des particules sans interactions, autres que les corrélations quantiques.

Ce qui ressort de l'interprétation de la courbe, est que l'énergie moyenne tend vers la valeur asymptotique classique plus lentement quand le nombre de particules augmente.

II.2.1.3 Capacité calorifique

La capacité calorifique à volume constant est donnée par la relation suivante :

$$C_V = \left. \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right|_{V,N} = -k \beta^2 \left. \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \right|_{N,V} \quad (\text{II.27})$$

Nous avons étudié le cas d'un système à deux et trois niveaux équidistants par la statistique classique et un système à deux, trois et n niveaux équidistants par la statistique quantique.

a) Statistique classique

En remplaçant la relation (II.25) et (II.26) dans la relation (II.27), on trouve la capacité calorifique, à volume constant, respectivement pour les systèmes à deux et trois niveaux équidistants :

$$C_{v2cl} = N k (\beta\varepsilon)^2 e^{\beta\varepsilon} \left[\frac{1}{(1+e^{\beta\varepsilon})^2} \right] \quad (\text{II.28})$$

$$C_{v3cl} = N k (\beta\varepsilon)^2 e^{\beta\varepsilon} \left[\frac{1}{(e^{2\beta\varepsilon} + e^{\beta\varepsilon} + 1)} + \frac{3e^{\beta\varepsilon}}{(e^{2\beta\varepsilon} + e^{\beta\varepsilon} + 1)^2} \right] \quad (\text{II.29})$$

b) Statistique quantique

En tenant compte des expressions de l'énergie moyenne calculée précédemment (expressions (II.14), (II.15)) la capacité calorifique à volume constant est donnée dans ce cas pour un système de N bosons répartis sur deux niveaux (ou trois niveaux) équidistants par l'expression suivante :

$$C_{v2q} = k (\beta\varepsilon)^2 \left[\frac{e^{\beta\varepsilon}}{(e^{\beta\varepsilon}-1)^2} - \frac{(N+1)^2 e^{(N+1)\beta\varepsilon}}{(e^{(N+1)\beta\varepsilon}-1)^2} \right] \quad (\text{II.30})$$

$$C_{v3q} = C_{v2q} + k (\beta\varepsilon)^2 \left[\left(\frac{2}{e^{2\beta\varepsilon}-1} \right)^2 e^{2\beta\varepsilon} - \left(\frac{N+2}{e^{(N+2)\beta\varepsilon}-1} \right)^2 e^{(N+2)\beta\varepsilon} \right] \quad (\text{II.31})$$

D'une façon plus générale, la capacité calorifique à volume constant, prend une forme récurrente, comme c'est le cas de l'énergie moyenne :

$$C_{v n q} = C_{v(n-1)q} + k (\beta\varepsilon)^2 \left[\left(\frac{n-1}{e^{(n-1)\beta\varepsilon}-1} \right)^2 e^{(n-1)\beta\varepsilon} - \left(\frac{N+n-1}{e^{(N+n-1)\beta\varepsilon}-1} \right)^2 e^{(N+n-1)\beta\varepsilon} \right] \quad (\text{II.32})$$

où n représente le nombre de niveaux et N , le nombre de particules

Nous avons représenté sur les figures suivantes la variation en fonction de la température de la capacité calorifique à volume constant divisée par Nk , déduite de la statistique classique et quantique.

Le terme $\frac{C_v}{Nk}$ est indépendant du nombre de particule dans le cadre de la statistique classique et dépend de ce même nombre de particule dans le cadre de la statistique quantique, nous avons donc représenté aussi cette variation pour différentes valeurs du nombre N de bosons.

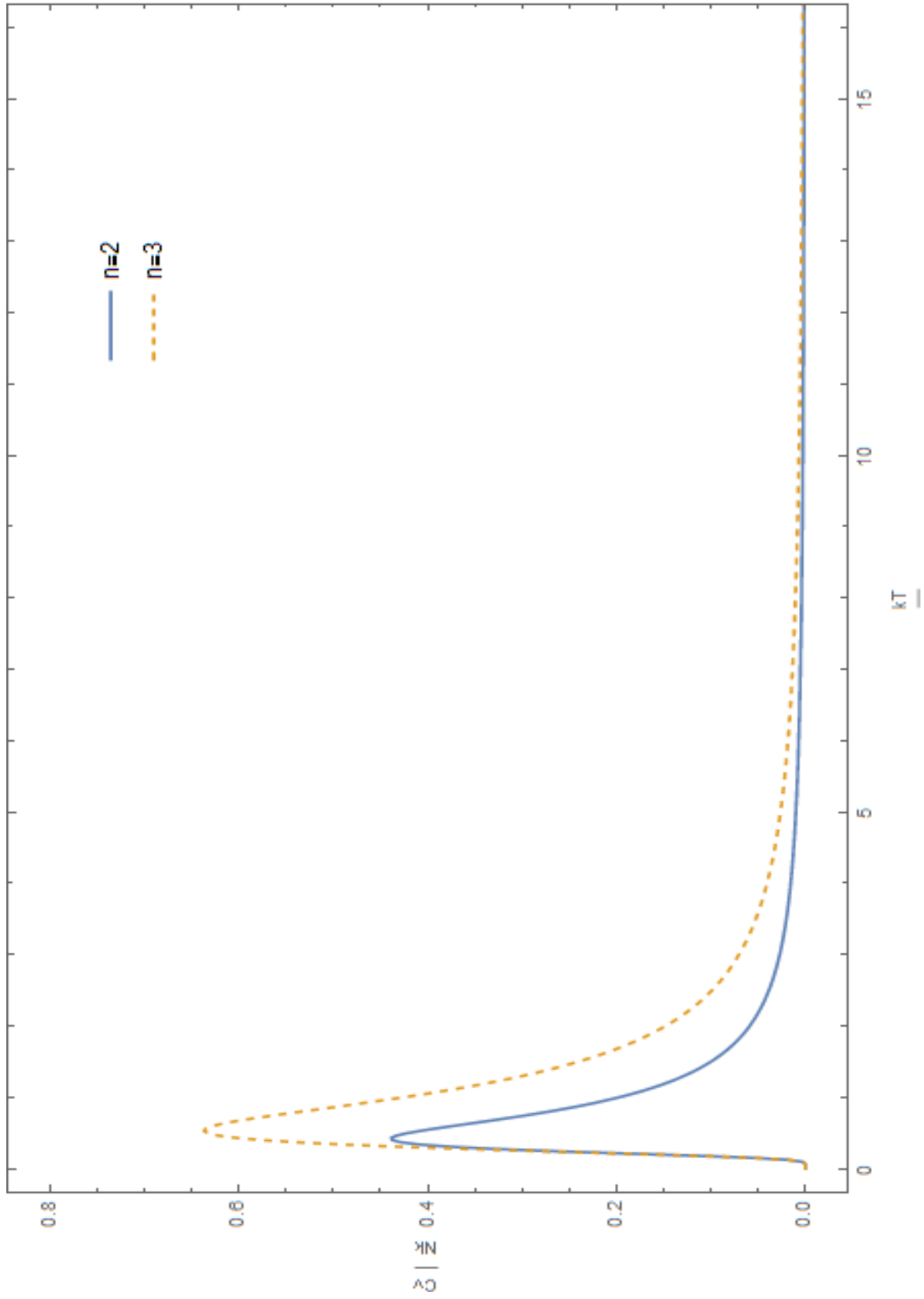


Figure II.3a : Capacité calorifique à volume constant en fonction de la température, pour un système à deux et trois niveaux, calculée par la statistique classique.

Chapitre 2
Systèmes Bosoniques dans l'ensemble canonique

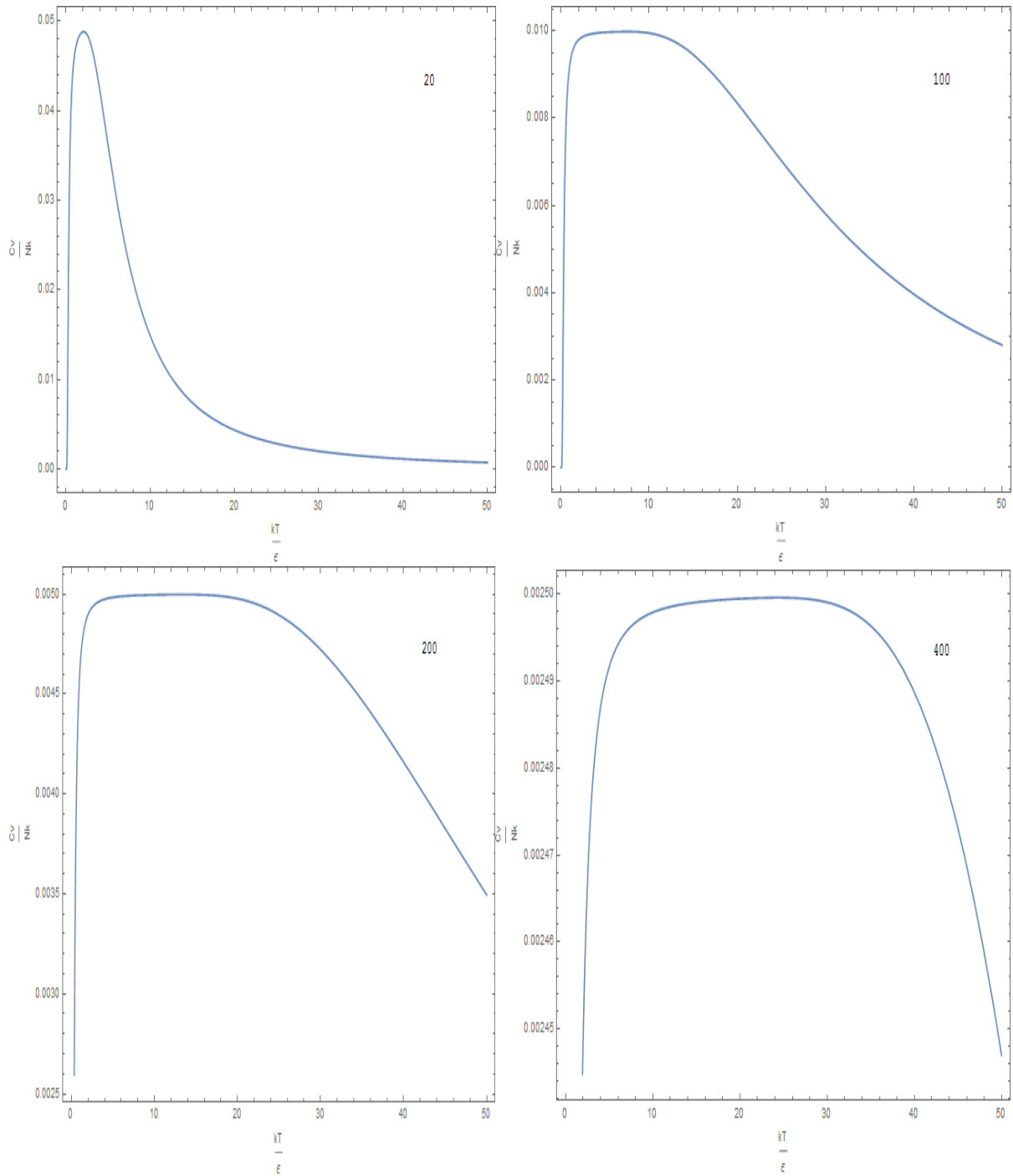


Figure II.3b : Capacité calorifique à volume constant en fonction de la température, pour un système à deux niveaux, calculée par la statistique quantique pour différents nombre de particules N (20, 100, 200 et 400).

Pour un système de N bosons répartis sur deux niveaux, la capacité calorifique à volume constant, déduite par les deux statistiques, classique et quantique, tend vers la même valeur constante à haute et à basse température (voir figure (II.3a et 3b)).

La capacité calorifique à volume constant déduite par la statistique quantique est toujours plus basse que celle obtenue par la statistique classique.

Il existe une zone en température où la capacité calorifique à volume constant passe par un maximum.

Ce maximum est beaucoup plus important dans le cas du calcul classique par rapport au calcul quantique. Par exemple pour un nombre de bosons $N = 20$, la capacité calorifique calculée par la statistique classique est 8 fois plus importante que celle donnée par la statistique quantique et 40 fois plus importante pour $N = 100$.

II.2.1.4 Corrélations quantiques.

Dans ce qui suit, on va s'intéresser à l'effet induit par les corrélations quantiques entre les particules sur le calcul des énergies moyennes par particule, calculées dans les cas quantique et classique.

En statistique classique, pour un système de N particules réparties sur un nombre fini de niveaux équidistants (dans notre cas, nous avons fait les calculs pour des systèmes à 2, 3 ou 4 niveaux équidistants), l'énergie moyenne sera donnée dans la limite haute température et, dans le cas d'un système à deux niveaux par l'équation (II.33) :

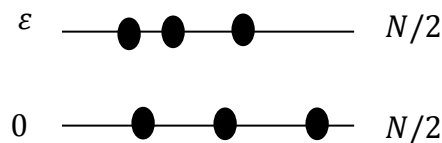


Figure II.4 : Répartition de particules sur deux niveaux équidistants

$$\overline{E}_2 = \frac{N}{2} * 0 + \frac{N}{2} * \varepsilon = N \frac{\varepsilon}{2} \quad (\text{II.33})$$

De même pour un système à trois et quatre niveaux

$$\overline{E}_3 = \frac{N}{3} * 0 + \frac{N}{3} * \varepsilon + \frac{N}{3} * 2\varepsilon = N\varepsilon \quad (\text{II.34})$$

$$\overline{E}_4 = \frac{N}{4} * 0 + \frac{N}{4} * \varepsilon + \frac{N}{4} * 2\varepsilon + \frac{N}{4} * 3\varepsilon = N \frac{3\varepsilon}{2} \quad (\text{II.35})$$

Cette limite est retrouvée facilement par l'expression de l'énergie moyenne dans le cas de la statistique classique (haute température). Toutefois pour une température T fixée, l'expression de l'énergie moyenne sera déduite à partir de la fonction de partition Q_{ncl} en utilisant l'équation (II.13).

Pour les systèmes de particules sans interaction, la différence entre le cas quantique et la limite classique est liée aux corrélations quantiques. On définit alors la quantité corrélation quantique en énergie notée ρ_n , par l'expression suivante :

$$\rho_n = \frac{\overline{E_{nq}} - \overline{E_{ncl}}}{N \varepsilon} \quad (\text{II.36})$$

où, n représente le nombre de niveaux, les indices q et cl indiquent les calculs quantique et classique respectivement.

Nous avons tracé la courbe montrant la variation du facteur de corrélation donné par l'expression (II.36) en fonction de la température, pour différentes valeurs du nombre de particules N .

Dans le cas d'un système de N bosons répartis sur deux niveaux d'énergie, l'expression du facteur de corrélation en fonction de la température est donnée par :

$$\rho_2(T) = \frac{1}{1 + e^{\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)}} - \left(\frac{1}{N}\right) \left[\frac{e^{\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)}}{e^{\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)} - 1} - \frac{e^{\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)} + N e^{-N\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)}}{e^{\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)} - e^{-N\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)}} \right] \quad (\text{II.37})$$

Chapitre 2
Systèmes Bosoniques dans l'ensemble canonique

Nous constatons que le facteur de corrélation quantique en énergie (voir figure II.5) est nul à $T = 0^{\circ}K$ (les deux statistiques classique et quantique conduisent toutes les deux à des particules toutes placées dans l'état fondamental) et tend vers zéro lentement quand la température est très grande, en passant par une zone où il est maximum.

Ce maximum présente une évolution assez particulière en fonction du nombre de niveaux pour un nombre de particules fixé (voir figure II.6)

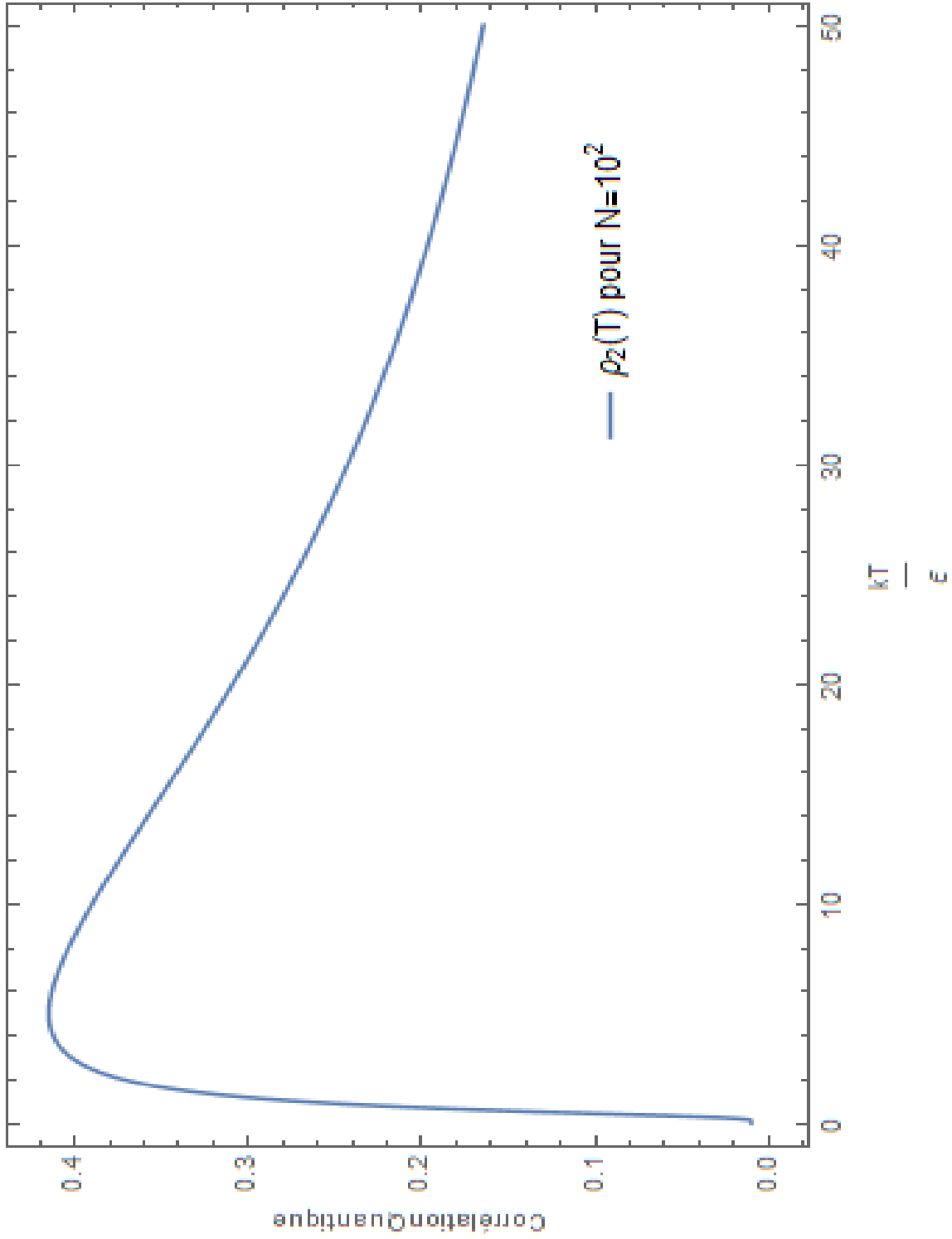


Figure II.5 : Facteur de corrélation quantique en énergie en fonction de la température pour un système à deux niveaux d'énergie pour $N = 100$.

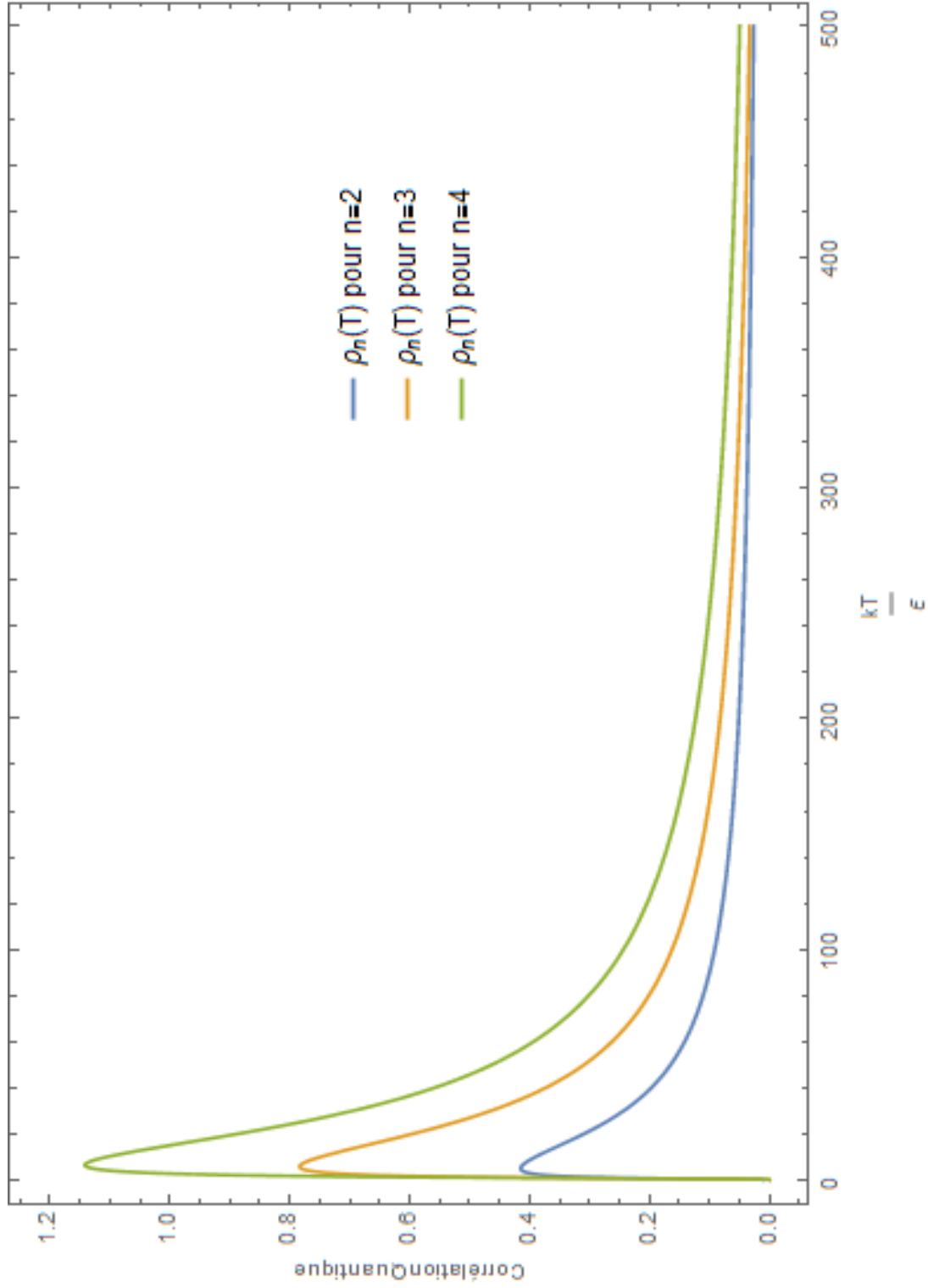


Figure II.6 : Facteur de corrélation quantique en énergie en fonction de la température et pour différents nombre de niveaux pour un nombre de particules fixé : $N = 100$.

L'effet de la corrélation quantique s'estompe à très haute température (quand T tend vers l'infini) et à très basse température (quand T tend vers zéro).

Nous avons constaté la présence d'une zone où cette corrélation quantique présente un maximum. Cette région se trouve autour de la valeur $\frac{kT}{\varepsilon} \approx 5.75$ quel que soit le nombre de niveaux (voir tableau II.1). On a aussi remarqué, qu'en ce maximum, la valeur de la corrélation tend vers la valeur de l'énergie moyenne par particule dans la limite haute température.

Nombre de niveaux n	kT/ε	Corrélation ρ_{\max}
2	5.02	0.412
3	5.75	0.783
4	6.4	1.14

Tableau II.1 : Position de la zone de corrélation quantique en énergie maximale en fonction du nombre de niveaux, pour un nombre de particules $N=100$.

Du tableau précédent, on peut conclure que la position du maximum de la corrélation quantique en énergie est peu sensible au nombre de niveaux. Par contre la valeur ρ_{\max} du maximum varie avec le nombre de niveaux.

Nous nous sommes aussi intéressés à l'évolution de la corrélation quantique en énergie en fonction du nombre de particules (voir figure II.7). Dans ce cas on se limitera au système à deux niveaux.

De manière générale pour un nombre de niveaux fixé, la corrélation quantique en énergie d'abord nulle, augmente jusqu'à atteindre une valeur maximale puis tend vers zéro quand le nombre de particules augmente indéfiniment.

Nous constatons, que la position du maximum de la corrélation quantique en énergie, varie assez peu avec le nombre de particules (voir figure II.8) et que, quand N augmente, la valeur de ce maximum tend vers la limite haute température de l'énergie moyenne par particule.

La limite des hautes températures fait tendre ρ vers zéro, mais cette décroissance est plus lente pour un nombre de niveaux plus élevé ou un nombre de particules plus élevé.

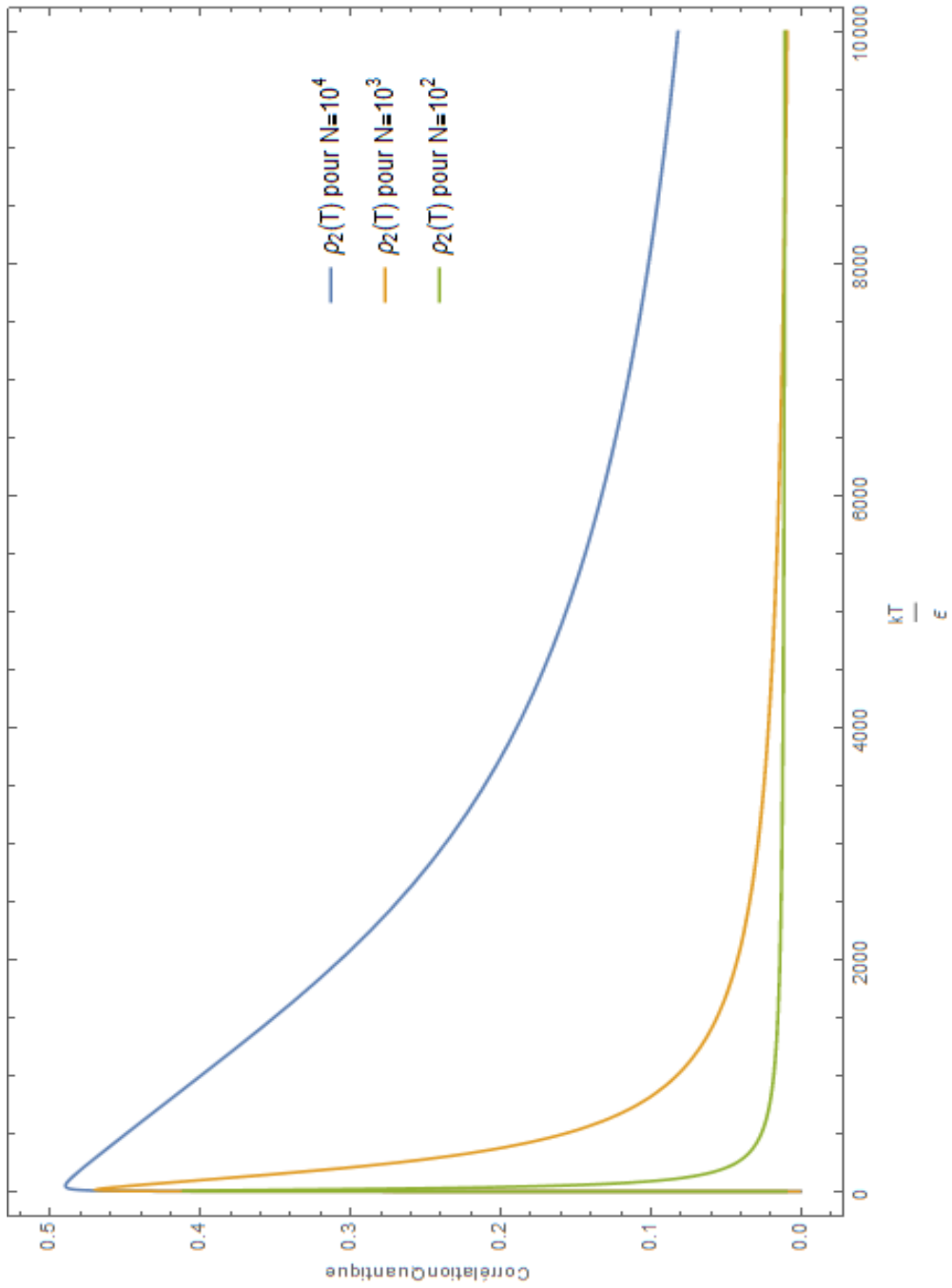


Figure II.7 : Facteur de corrélation quantique en énergie en fonction de la température (kT/ϵ) pour différentes valeurs du nombre de particules, pour un système à deux niveaux équidistants.

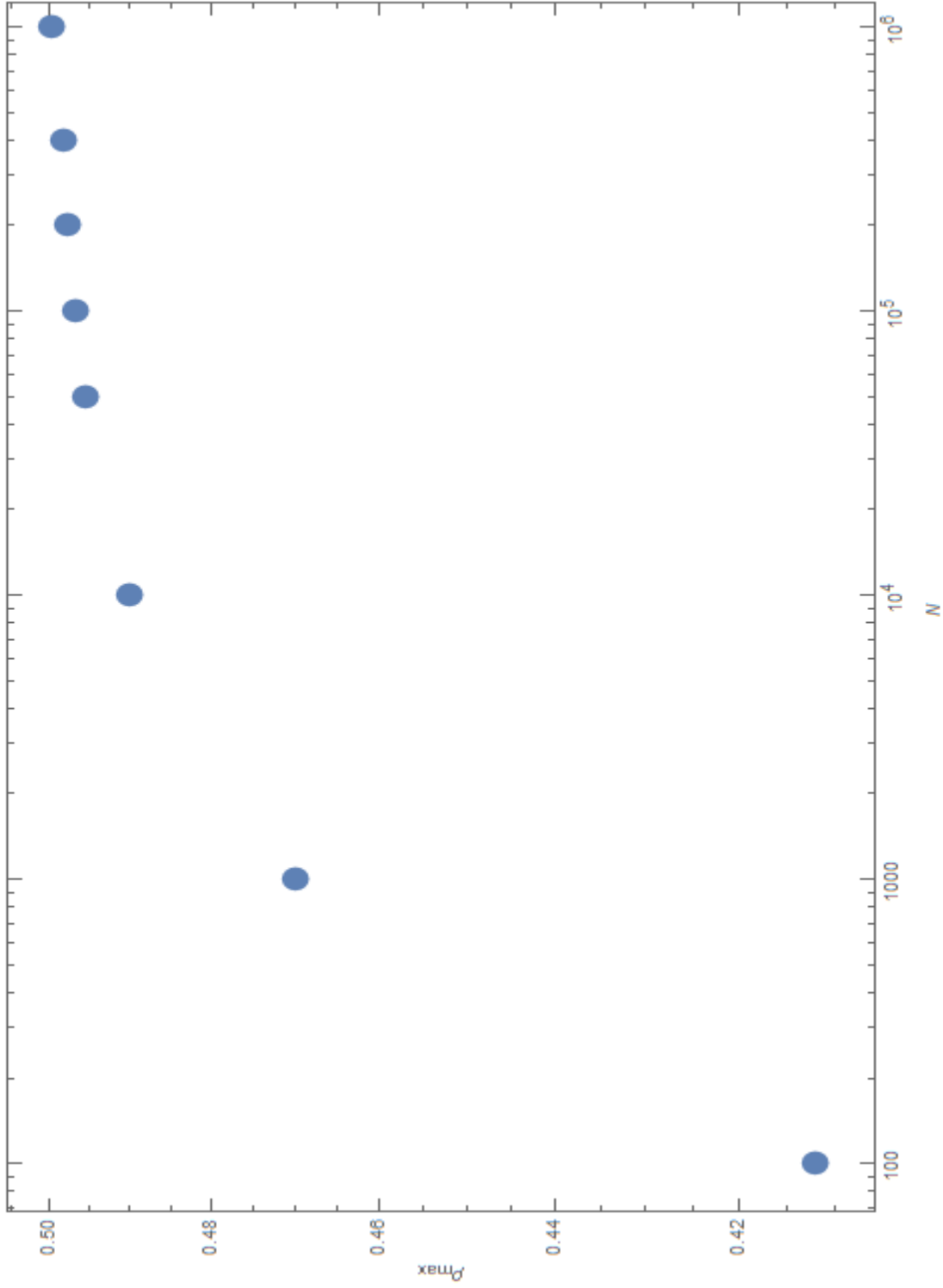


Figure II.8 : Valeur maximale du facteur de corrélation quantique en énergie en fonction du nombre de particules, pour un système à deux niveaux équidistants.

II.2.2 Niveaux dégénérés

Le traitement quantique d'un système à deux niveaux d'énergie, dont le second est deux fois dégénérés se fait, comme si on avait un système à trois niveaux d'énergies notés a , b et c , non dégénérés avec un écart δ très petit ($\delta/(b-a) \ll 1$) entre le second et le troisième niveau de telle sorte que l'énergie du niveau c s'écrit en fonction de celle du niveau b , comme suit :

$$c = b + \delta \quad (\text{II.38})$$

a) Fonction de partition

La fonction de partition pour un système à trois niveaux non dégénérés est donnée par :

$$Q_3 = \frac{e^{-\beta a (N+2)}}{(e^{-\beta a} - e^{-\beta b})(e^{-\beta a} - e^{-\beta c})} + \frac{e^{-\beta b (N+2)}}{(e^{-\beta b} - e^{-\beta a})(e^{-\beta b} - e^{-\beta c})} + \frac{e^{-\beta c (N+2)}}{(e^{-\beta c} - e^{-\beta a})(e^{-\beta c} - e^{-\beta b})} \quad (\text{II.39})$$

On peut considérer l'approximation suivante pour déterminer la fonction de partition d'un système à deux niveaux dont le deuxième niveau est deux fois dégénéré :

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} Q_3 = Q_{2dg} \quad (\text{II.40})$$

La fonction de partition devient alors :

$$Q_3 = \frac{e^{-\beta a (N+2)}}{(e^{-\beta a} - e^{-\beta b})(e^{-\beta a} - e^{-\beta(b+\delta)})} + \frac{e^{-\beta b (N+2)}}{(e^{-\beta b} - e^{-\beta a})(e^{-\beta b} - e^{-\beta(b+\delta)})} + \frac{e^{-\beta(b+\delta) (N+2)}}{(e^{-\beta(b+\delta)} - e^{-\beta a})(e^{-\beta(b+\delta)} - e^{-\beta b})} \quad (\text{II.41})$$

En utilisant, le fait que :

$$f'(x_0) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{f(x_0+\delta) - f(x_0)}{\delta} \quad (\text{II.42})$$

L'expression précédente devient :

$$Q_3 = \frac{e^{-\beta a (N+2)}}{(e^{-\beta a} - e^{-\beta b})^2 (1 + \frac{\delta e^{-\beta b}}{e^{-\beta a} - e^{-\beta b}})} + \frac{e^{-\beta (b+\delta) (N+2)}}{(e^{-\beta a} - e^{-\beta b}) \delta e^{-\beta b} (1 + \frac{\delta e^{-\beta b}}{e^{-\beta a} - e^{-\beta b}})} - \frac{e^{-\beta b (N+2)}}{(e^{-\beta a} - e^{-\beta b}) \delta e^{-\beta b}} \quad (\text{II.43})$$

Celle-ci se réduit, quand on fait tendre δ vers zéro (II.40), à l'expression suivante :

$$Q_{2dg} = \frac{e^{-\beta a (N+2)}}{(e^{-\beta a} - e^{-\beta b})^2} - \frac{e^{-\beta b (N+2)}}{(e^{-\beta b} - e^{-\beta a})^2} + \frac{(N+2)e^{-\beta b (N+1)}}{(e^{-\beta b} - e^{-\beta a})} \quad (\text{II.44})$$

Cette expression de la fonction de partition n'est pas symétrique comme c'est le cas pour un système non dégénéré (les deux niveaux n'ont pas des rôles équivalents).

b) Energie moyenne

Pour déduire l'énergie moyenne d'un système à deux niveaux dont le deuxième niveau est dégénéré deux fois, et pour simplifier le calcul, on considère l'énergie du niveau 1 et du niveau 2, respectivement égales à : $a = 0$ et $b = \varepsilon$. Donc l'expression précédente de la fonction de partition s'écrira ainsi factorisée:

$$Q_{2dg} = \frac{1}{(e^{-\beta \varepsilon} - 1)^2} [1 + (N+1)e^{-\beta \varepsilon (N+2)} - (N+2)e^{-\beta \varepsilon (N+1)}] \quad (\text{II.45})$$

On déduit alors l'énergie moyenne, qui a pour expression :

$$E_{2dg} = \varepsilon \left[\frac{2e^{-\beta \varepsilon}}{1 - e^{-\beta \varepsilon}} - \frac{(N-1)(N+2)e^{-\beta \varepsilon (N+1)} (1 - e^{-\beta \varepsilon})}{1 + (N+1)e^{-\beta \varepsilon (N+2)} - (N+2)e^{-\beta \varepsilon (N+1)}} \right] \quad (\text{II.46})$$

Il est intéressant de comparer l'évolution de l'énergie moyenne par particule en fonction de la température pour des systèmes à deux niveaux dégénérés par rapport à un autre système non dégénéré. Sur la figure ci-dessous, nous avons représenté respectivement cette variation pour un nombre de particules $N = 1000$.

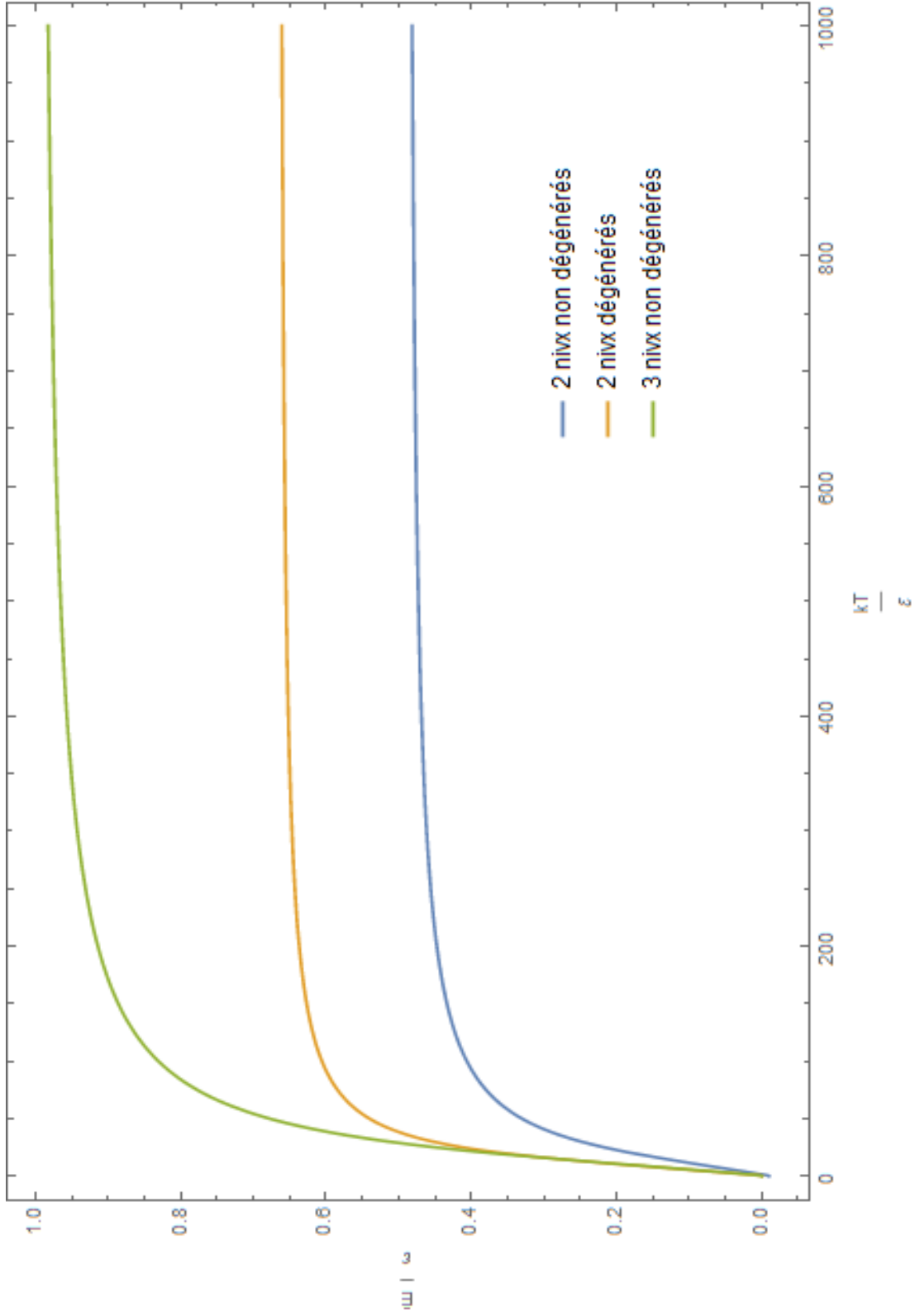


Figure II.9 : Energie moyenne par particule en fonction de la température, pour un nombre de particule $N = 1000$.
Pour des systèmes à deux, trois niveaux non dégénérés et un système à deux niveaux dégénérés

Ce qu'on peut tirer comme conclusion, c'est que le calcul de l'énergie moyenne et son évolution en fonction de la température, peuvent nous renseigner sur l'état de dégénérescence d'un système donné ; du fait que cette énergie moyenne se trouve comprise entre la valeur moyenne pour des systèmes à deux et trois niveaux non dégénérés.

Il faut noter qu'à haute énergie (dans la limite classique), l'énergie moyenne pour un système à N particules, à deux niveaux dont le second est dégénéré deux fois est donnée par l'expression suivante :

$$\langle E \rangle = N/3 * 0 + N/3 * \varepsilon + N/3 * \varepsilon = 2/3 N \varepsilon \quad (\text{II.41})$$

$$\frac{\langle E \rangle}{N \varepsilon} = \frac{2}{3} \cong 0.66 \quad (\text{II.42})$$

Ce qui correspond au résultat obtenu par notre calcul (voir figure II.9).

II.3 Conclusion

Nous avons étudié des systèmes de N bosons répartis sur un petit nombre de niveaux d'énergie. Nous avons considéré des situations où les niveaux d'énergie sont quelconques puis des cas où les niveaux sont équidistants.

Nous avons calculé la fonction de partition et avons déduit l'énergie moyenne dans chaque cas. En comparant avec le cas classique nous avons donné une expression de la corrélation quantique pour l'énergie moyenne pour ces systèmes.

Nous avons tracé cette corrélation quantique en fonction de la température, du nombre de niveaux et du nombre de particules. Nous avons constaté, en particulier, que cette corrélation quantique augmente avec le nombre de niveaux et aussi avec le nombre de particules.

Nous nous sommes aussi intéressés à des systèmes dégénérés. Nous avons constaté que le calcul de l'énergie moyenne peut nous renseigner sur l'état de dégénérescence de ce système donné.

Chapitre III

Inéquivalence ensembles canonique et grand canonique pour les systèmes bosoniques

III.1 Introduction

Pour un système quantique à grand nombre de particules (bosons et fermions), le calcul de la fonction de partition canonique est une tâche très difficile. Ceci est dû à l'indiscernabilité des particules identiques. L'utilisation de l'ensemble canonique est alors évitée. Comme la fonction de partition grand canonique est plus facilement traitable, les quantités thermodynamiques sont alors calculées en utilisant l'ensemble grand canonique.

Les ensembles canonique et grand canonique sont supposés équivalents dans la limite thermodynamique, mais il est admis que, lorsque la taille du système est limitée, les résultats obtenus dans les deux ensembles dévient les uns des autres.

Les résultats sont supposés être les mêmes dans la limite thermodynamique [Rue69]. Est-ce réellement toujours le cas? Il semble que, pour certains systèmes, ceci n'est pas le cas. De plus, il y a de nombreux systèmes avec un nombre fixe de particules où la description canonique est plus appropriée [Kos08].

Chaque fois que nous avons besoin de travailler avec un système à grand nombre de particules quantiques, il est beaucoup plus facile d'effectuer les calculs dans l'ensemble grand canonique que dans l'ensemble canonique.

Par exemple, les calculs de la fonction de partition grand canonique pour un gaz parfait de fermions ou de bosons dans une boîte de volume V est assez simple, alors que le calcul de la fonction partition canonique pour ce système devient une tâche considérable, même pour un petit nombre de particules. Une fois que la fonction de partition (canonique ou grand canonique) est connue, on peut en dériver les grandeurs thermodynamiques associées à ce système.

Il existe beaucoup de systèmes quantiques où la description canonique est plus appropriée car le nombre de particules est constant ; ceux-ci comprennent des systèmes de noyaux chauds [Ros94], les nanoparticules métalliques [Del01], les gaz de bosons ou de fermions dans les pièges atomiques [Pol96], [Her97] et les atomes dans les plasmas [Gil04].

Dans de nombreux cas, l'ensemble canonique fournit une description physique appropriée, mais il est souvent beaucoup plus facile d'effectuer les calculs dans l'ensemble grand-canonique correspondant.

Les ensembles microcanonique et canonique fournissent deux descriptions statistiques différentes des systèmes à plusieurs corps à l'équilibre. Bien que les deux ensembles donnent souvent des prédictions compatibles ou équivalentes dans la limite thermodynamique, cette équivalence n'est pas garantie par leurs définitions. Gibbs a remarqué ce point dès 1902 [Gib02].

Il est généralement indiqué dans les livres que les différents ensembles statistiques sont équivalents, au moins dans la limite thermodynamique [Sal01, Rei98]. Ces ensembles sont censés donner les mêmes quantités thermodynamiques dans cette limite. Mais au cours des deux dernières décennies, cette équivalence a eu un regain d'intérêt. Il a été montré, en premier lieu, que l'ensemble microcanonique et l'ensemble grand canonique ne sont pas équivalents pour le calcul de la population de l'état fondamental pour le condensat de Bose Einstein [Gros96].

Le résultat fondamental qui a émergé des travaux sur les systèmes à plusieurs corps impliquant des interactions à courte portée et stables, telles que les systèmes de spin à courte portée ou les systèmes de Coulomb écrantés, présentent toujours une équivalence entre ces deux ensembles, alors que les systèmes impliquant des interactions à longue portée, tels que les systèmes gravitant, les systèmes de Coulomb dipolaires ou non écrantés, conduisent à des ensembles non équivalents [Cam09].

Au niveau thermodynamique, ces deux ensembles deviennent non équivalents lorsque la capacité calorifique est négative dans le premier, mais est positive dans le second.

Ce phénomène surprenant, qui a été étudié d'abord dans le contexte des systèmes gravitationnels [Lyn68], [Lyn77], [Lyn99], [Her71], [Gro01], [Isp01], [Cha06], est maintenant connu pour se produire lorsque l'entropie thermodynamique dans l'ensemble microcanonique est une fonction non concave de l'énergie moyenne.

Étant donné que la thermodynamique est profondément enracinée dans la mécanique statistique, il est naturel de chercher, à savoir si la concavité de l'entropie détermine l'équivalence macroscopique des ensembles. Ce problème a été étudié par Eyink et Spohn [Eyi93] et plus tard par Ellis, Haven et Turkington [Eli00], qui ont prouvé que les deux ensembles sont, thermodynamiquement équivalents quand ils sont équivalents au niveau macroscopique [Tou04].

La condition que l'entropie soit concave est importante parce que des études récentes ont montré que de nombreux systèmes physiques ont des entropies non concaves dans la limite thermodynamique. Ainsi, la ligne de démarcation entre l'équivalence et la non-équivalence des ensembles est essentiellement entre les systèmes à interactions de courte portée et d'autres à longue portée : les premiers ont une entropie concave, et sont donc décrits de manière équivalente par l'ensemble microcanonique ou l'ensemble canonique, comme le prouve Ruelle [Rue69], [Gri72].

Récemment, des expériences basées sur les ions, les atomes froids et les pièges optiques ont été proposées pour observer les interactions à longue portée et entropies non concaves [Kas10], [Kas10a], [Oli14], [Cha13].

Plus tard, l'étude de l'équivalence entre l'ensemble microcanonique et l'ensemble canonique a été approfondie. Il a été prouvé que ces ensembles sont équivalents uniquement lorsque l'entropie microcanonique est une fonction concave de l'énergie [Tou11], [Cos06], [Cos05], [Tou04].

Pour les systèmes de spins, il a été démontré que l'équivalence entre ces deux ensembles est réalisée uniquement pour des interactions de courte portée [Cas07], [Kas10], [Kas10a].

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à tester l'équivalence des ensembles canonique et grand canonique pour les systèmes de bosons sans interaction dans le cas d'un nombre fini de niveaux d'énergie.

Dans ce chapitre, nous comparons l'énergie moyenne obtenue dans l'ensemble canonique à celle de l'ensemble grand canonique. Nous considérons un système de bosons sans interaction, répartis entre un petit nombre de niveaux d'énergie. Nous pouvons calculer la fonction de partition canonique dans ce cas et en déduire l'énergie moyenne canonique. Nous comparons ce résultat à celui déduit de l'ensemble grand-canonique (avec le même nombre moyen de particules) pour tester l'équivalence des deux ensembles en ce qui concerne l'énergie moyenne.

Pour nos calculs, nous utilisons les notations suivantes: l'indice (n) est pour le nombre de niveaux, l'indice (gc) pour l'ensemble grand canonique et (c) pour l'ensemble canonique.

III.2 Systèmes à deux niveaux d'énergies

Nous considérons un système où N bosons identiques sans interaction sont répartis entre deux niveaux d'énergie, avec des valeurs 0 et ε respectivement. Le système est en équilibre thermique avec un thermostat de température T .

Nous voulons calculer l'énergie moyenne en utilisant les ensembles canonique et grand canonique et comparer les valeurs obtenues.

III.2.1 Ensemble canonique

Comme on l'a vu dans le chapitre précédent, la fonction de partition canonique est calculable [Hua87] ; elle est donnée par la relation suivante :

$$Q_{2c} = \sum_{i=0}^N e^{-i \beta \varepsilon} \quad (\text{III.1})$$

où $\beta = 1/kT$. Cette somme est une série géométrique, avec le résultat suivant:

$$Q_{2c} = \frac{1 - e^{-\beta\varepsilon(N+1)}}{1 - e^{-\beta\varepsilon}} \quad (\text{III.2})$$

L'énergie moyenne du système est donnée par la relation:

$$\overline{E}_{2c} = \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon} - 1} - \frac{(N+1)\varepsilon}{e^{(N+1)\beta\varepsilon} - 1} \quad (\text{III.3})$$

Cette énergie est une fonction de N et de $\beta\varepsilon$.

III.2.2 Ensemble grand canonique

Pour ce système, la fonction de partition grand canonique est donnée par [Pat11] :

$$Q_{2gc} = \frac{1}{1 - e^{\beta\mu}} \times \frac{1}{1 - e^{\beta\mu - \beta\varepsilon}} \quad (\text{III.4})$$

où μ est le potentiel chimique.

Par définition, le nombre moyen de particules est donnée par la formule générale :

$$\overline{N}_{2gc} = \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \ln(Q_{2gc})}{\partial \mu} \right|_{V,T} \quad (\text{III.5})$$

Ce qui nous donne l'expression suivante :

$$\overline{N}_{2gc} = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} + \frac{1}{e^{\beta\varepsilon - \beta\mu} - 1} \quad (\text{III.6})$$

Cette relation nous permet de déterminer le potentiel chimique quand on fixe le nombre moyen de particules ; \overline{N}_{2gc} est une fonction de $\beta\mu$ et de $\beta\varepsilon$.

Pour l'énergie moyenne grand canonique, elle est facilement déduite de l'expression de la fonction de partition grand canonique :

$$\overline{E}_{2gc} = - \left. \frac{\partial \ln(Q_{2gc})}{\partial \beta} \right|_{z,\mu} = \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon - \beta\mu} - 1} \quad (\text{III.7})$$

où $z = e^{\beta\mu}$ est la fugacité. Notons aussi, que $\frac{\overline{E}_{2gc}}{\varepsilon}$ est fonction de $\beta\mu$ et de $\beta\varepsilon$.

III.2.3 Comparaison

Nous voulons comparer les énergies moyennes canonique et grand canonique pour les systèmes de même nombre de particules (au moins en moyenne). Pour réaliser cela, nous prenons le nombre de particules dans l'ensemble canonique égal au nombre moyen de particules dans l'ensemble grand-canonique.

$$N = \bar{N}_{gc}(\beta\varepsilon, \beta\mu) \quad (\text{III.8})$$

Avec ce choix, \bar{E}_{2c}/ε , devient une fonction de $\beta\mu$ et de $\beta\varepsilon$.

$$\frac{\bar{E}_{2c}(\beta\varepsilon, \beta\mu)}{\varepsilon} = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} - 1} - \frac{(\bar{N}(\beta\varepsilon, \beta\mu) + 1)}{e^{(\bar{N}(\beta\varepsilon, \beta\mu) + 1)\beta\varepsilon} - 1} \quad (\text{III.9})$$

Nous nous sommes intéressés à la différence relative des énergies moyennes calculées dans les deux ensembles, et qui est donnée par la relation suivante :

$$R(\beta\varepsilon, \beta\mu) = \left| \frac{E_{gc} - E_c}{E_{gc}} \right| \quad (\text{III.10})$$

Ce rapport est une fonction de $\beta\varepsilon$ et de $\beta\mu$.

Pour comprendre le comportement de la différence relative $R(\beta\varepsilon, \beta\mu)$ en fonction de la température et du potentiel chimique pour un système à deux niveaux d'énergie équidistants, nous traçons les contours des mêmes valeurs en fonction de $\beta\varepsilon$ et $\beta\mu$. Pour y arriver, nous avons mis au point un code de calcul.

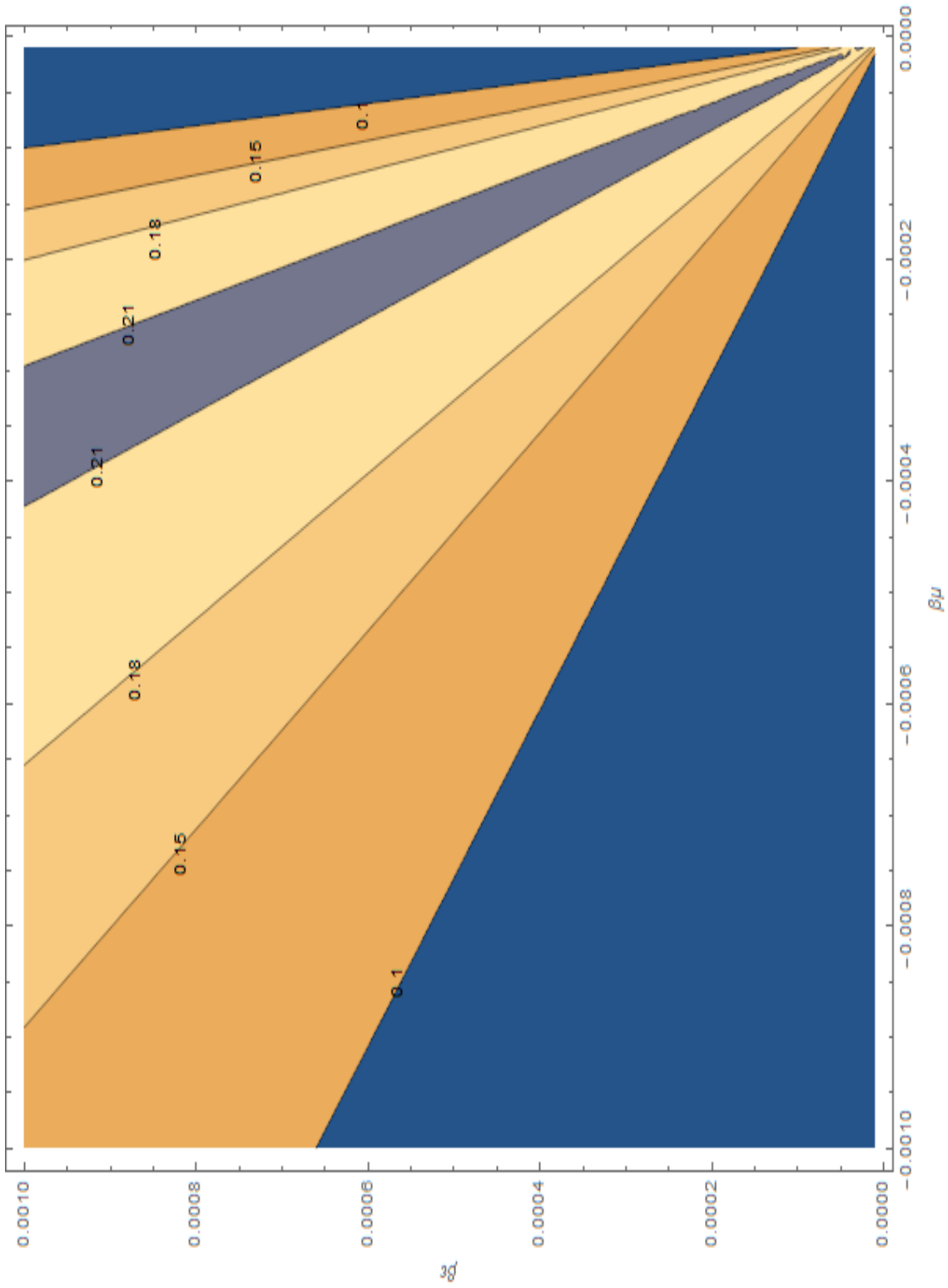


Figure III.1: Contours des valeurs constantes de $R(\beta\varepsilon, \beta\mu)$ en fonction de $\beta\varepsilon$ et $\beta\mu$ pour un système à deux niveaux d'énergie. Ces contours sont des lignes droites qui passent par l'origine. Les valeurs où $R(\beta\varepsilon, \beta\mu)$ est constant, sont indiquées sur les lignes.

Nous voyons sur la figure III.1 que les contours des valeurs constantes de $R(\beta\varepsilon, \beta\mu)$ sont des lignes droites à pente négative. Ces droites passent toutes par l'origine et elles sont telles que : $\beta\varepsilon = -\lambda \beta\mu$; λ est un paramètre positif, $(-\lambda)$ représente la pente des droites où $R(\beta\varepsilon, \beta\mu)$ est une constante.

La pente de ces droites peuvent être déduites, soit à partir du contourplot représenté sur la figure III.1 ou bien en résolvant l'équation (III.14) pour R constant.

Lorsque la pente de la ligne augmente la valeur de $R(\beta\varepsilon, \beta\mu)$ augmente; ce rapport atteint une valeur maximale (environ 0,21) et diminue ensuite, tout en gardant une certaine symétrie autour de la valeur $R = 0.21$.

Nous remarquons aussi que l'écart relatif varie fortement avec λ , il est donc préférable de l'écrire en fonction de λ et $\beta\mu$, que l'on notera comme $\bar{R}(\lambda, \beta\mu)$

$$\bar{R}(\lambda, \beta\mu) = R(-\lambda\beta\mu, \beta\mu) \quad (\text{III.11})$$

Le développement en série de l'expression $\bar{R}(\lambda, \beta\mu)$ au premier ordre en fonction de $\beta\mu$ s'écrit comme suit :

$$\bar{R}(\lambda, \beta\mu) = \frac{-1+e^{\frac{\lambda(2+\lambda)}{1+\lambda}} - 2\lambda - \lambda^2}{(-1+e^{\frac{\lambda(2+\lambda)}{1+\lambda}})\lambda} - \frac{((1+\lambda)(-1+e^{\frac{\lambda(2+\lambda)}{1+\lambda}} - 2\lambda - \lambda^2))}{2((-1+e^{\frac{\lambda(2+\lambda)}{1+\lambda}})\lambda)} \beta\mu + O[\beta\mu]^2 \quad (\text{III.12})$$

Le cas intéressant est la limite thermodynamique où les deux ensembles sont censés conduire aux mêmes résultats. Il est obtenu lorsque $\beta\mu$ tend vers zéro (car ainsi N tend vers l'infini ; cette limite est la limite thermodynamique). Cette limite est notée $R_{th}(\lambda)$.

Pour un système de deux niveaux d'énergie, l'expression de $R_{th}(\lambda)$ est obtenue, en faisant un développement limité à l'ordre 1, au voisinage de zéro de $\bar{R}(\lambda, \beta\mu)$ puis, en calculant sa limite quand $\beta\mu$ tend vers zéro.

$$R_{th}(\lambda) = \lim_{\beta\mu \rightarrow 0} \bar{R}(\lambda, \beta\mu) \quad (\text{III.13})$$

$$\text{On obtient :} \quad R_{2th}(\lambda) = \frac{1}{\lambda} - \frac{\lambda+2}{e^{\lambda(\lambda+2)/(\lambda+1)} - 1} \quad (\text{III.14})$$

L'indice 2 dans l'expression $R_{2th}(\lambda)$ représente le nombre de niveaux. Nous traçons

$R_{2th}(\lambda)$ en fonction de λ que nous représentons sur la figure III.2:

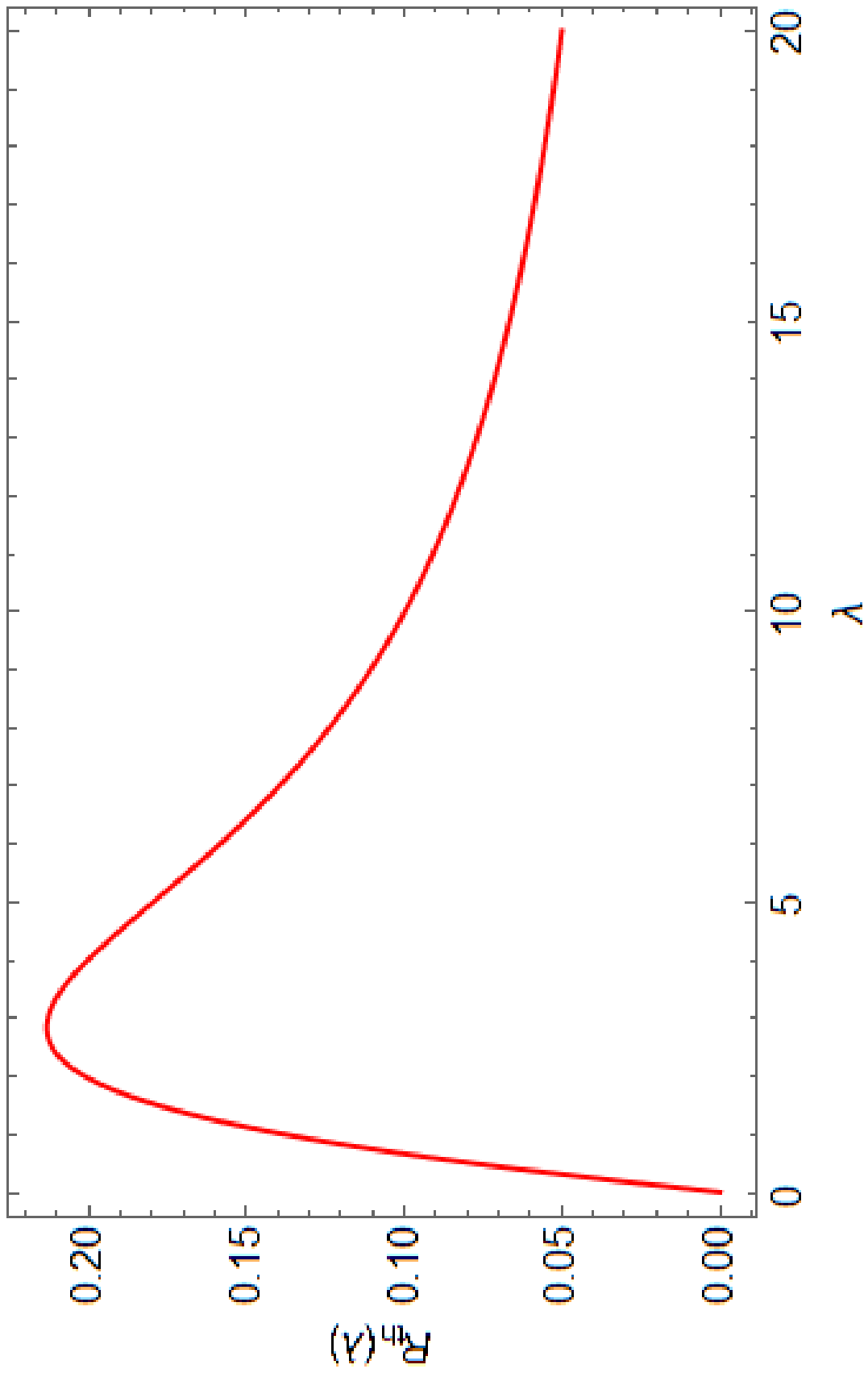


Figure. III.2: La Différence relative en énergie moyenne dans la limite thermodynamique $R_{th}(\lambda)$ en fonction de λ pour un système à deux niveaux.

De la figure III.2, nous voyons que $R_{th}(\lambda)$ ne s'annule pas. Il prend une valeur maximale qui est d'environ 21% pour une valeur λ d'environ 2.75. Nous pouvons conclure qu'il existe un domaine λ où les deux ensembles canonique et grand canonique ne sont pas équivalents pour l'énergie moyenne, même dans la limite thermodynamique pour un système à deux niveaux d'énergie.

III.3 Systèmes à trois niveaux d'énergies et plus

Nous considérons un système idéal de bosons répartis entre trois niveaux d'énergie équidistants, respectivement aux énergies : $0, \varepsilon, 2\varepsilon$.

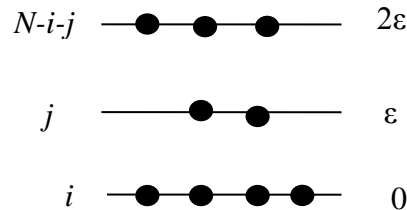


Figure III.3: Une représentation simple d'un système à N bosons sans interaction réparti entre trois niveaux équidistants.

III.3.1 Ensemble canonique

Une distribution de N particules peut être représentée par exemple: i particules sur l'état fondamental (d'énergie zéro), j particules dans le premier état excité (d'énergie ε) et $N - i - j$ particules dans le second état excité (d'énergie 2ε).

Pour décrire tous les états accessibles au système, et pour un i donné, on fait une sommation sur j variant de 0 à $N - i$ et ensuite nous sommes sur i variant de 0 à N . La fonction de partition canonique est donnée par :

$$Q_{3c} = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^{N-i} e^{-\beta(0i+\varepsilon j+2\varepsilon(N-i-j))} \quad (\text{III.15})$$

Elle peut alors s'écrire sous la forme :

$$Q_{3c} = \frac{1-e^{-\beta\varepsilon(N+1)}}{1-e^{-\beta\varepsilon}} \times \frac{1-e^{-\beta\varepsilon(N+2)}}{1-e^{-2\beta\varepsilon}} \quad (\text{III.16})$$

On en déduit facilement l'énergie moyenne, et qui est bien sûr, une fonction de N et $\beta\varepsilon$.

$$\overline{E}_{3c} = \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}-1} - \frac{(N+1)\varepsilon}{e^{(N+1)\beta\varepsilon}-1} + \frac{2\varepsilon}{e^{2\beta\varepsilon}-1} - \frac{(N+2)\varepsilon}{e^{(N+2)\beta\varepsilon}-1} \quad (\text{III.17})$$

III.3.2 Ensemble Grand canonique

Pour ce système, la fonction de partition grand canonique est:

$$Q_{3gc} = \frac{1}{1-e^{-\beta\mu}} \times \frac{1}{1-e^{-\beta\mu-\beta\varepsilon}} \times \frac{1}{1-e^{-\beta\mu-2\beta\varepsilon}} \quad (\text{III.18})$$

Le potentiel chimique est lié au nombre moyen de particules par la relation :

$$\overline{N}_{3gc} = \frac{1}{e^{-\beta\mu}-1} + \frac{1}{e^{\beta\varepsilon-\beta\mu}-1} + \frac{1}{e^{2\beta\varepsilon-\beta\mu}-1} \quad (\text{III.19})$$

Il en va de même pour l'énergie moyenne, dont l'expression est la suivante :

$$\overline{E}_{3gc} = \frac{\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon-\beta\mu}-1} + \frac{2\varepsilon}{e^{2\beta\varepsilon-\beta\mu}-1} \quad (\text{III.20})$$

Afin de comparer les énergies moyennes canonique et grand canonique, nous suivons la même procédure que l'on a déjà développée pour le système à deux niveaux: nous prenons le nombre de particules dans l'ensemble canonique égal au nombre moyen dans l'ensemble grand canonique.

Nous traçons la différence relative en fonction de $\beta\varepsilon$ et $\beta\mu$. Les contours des valeurs constantes de $R(\beta\varepsilon, \beta\mu)$ sont des lignes droites passant par l'origine.

Nous imposons alors une relation linéaire entre $\beta\varepsilon$ et $\beta\mu$. Nous calculons ensuite la différence relative entre les énergies moyennes dans la limite thermodynamique.

De la même façon, que pour des systèmes à deux niveaux, on déduit l'expression de $R_{th}(\lambda)$ qui est plus compliquée.

$$R_{3th}(\lambda) = \frac{-(2+\lambda)(1+2\lambda)^2 + (2+3\lambda) e^{\lambda + \frac{\lambda(2+3\lambda)}{(1+\lambda)(1+2\lambda)}}}{\lambda(3+4\lambda)(-1 + e^{\lambda + \frac{\lambda(2+3\lambda)}{(1+\lambda)(1+2\lambda)}})} \quad (\text{III.21})$$

Nous développons les mêmes calculs pour un système à quatre niveaux équidistants et pour un système avec dix niveaux équidistants.

Dans la figure III.4, nous représentons la différence relative de l'énergie moyenne dérivée des deux ensembles (les ensembles canonique et grand canonique) dans la limite thermodynamique pour différents nombres de niveaux.

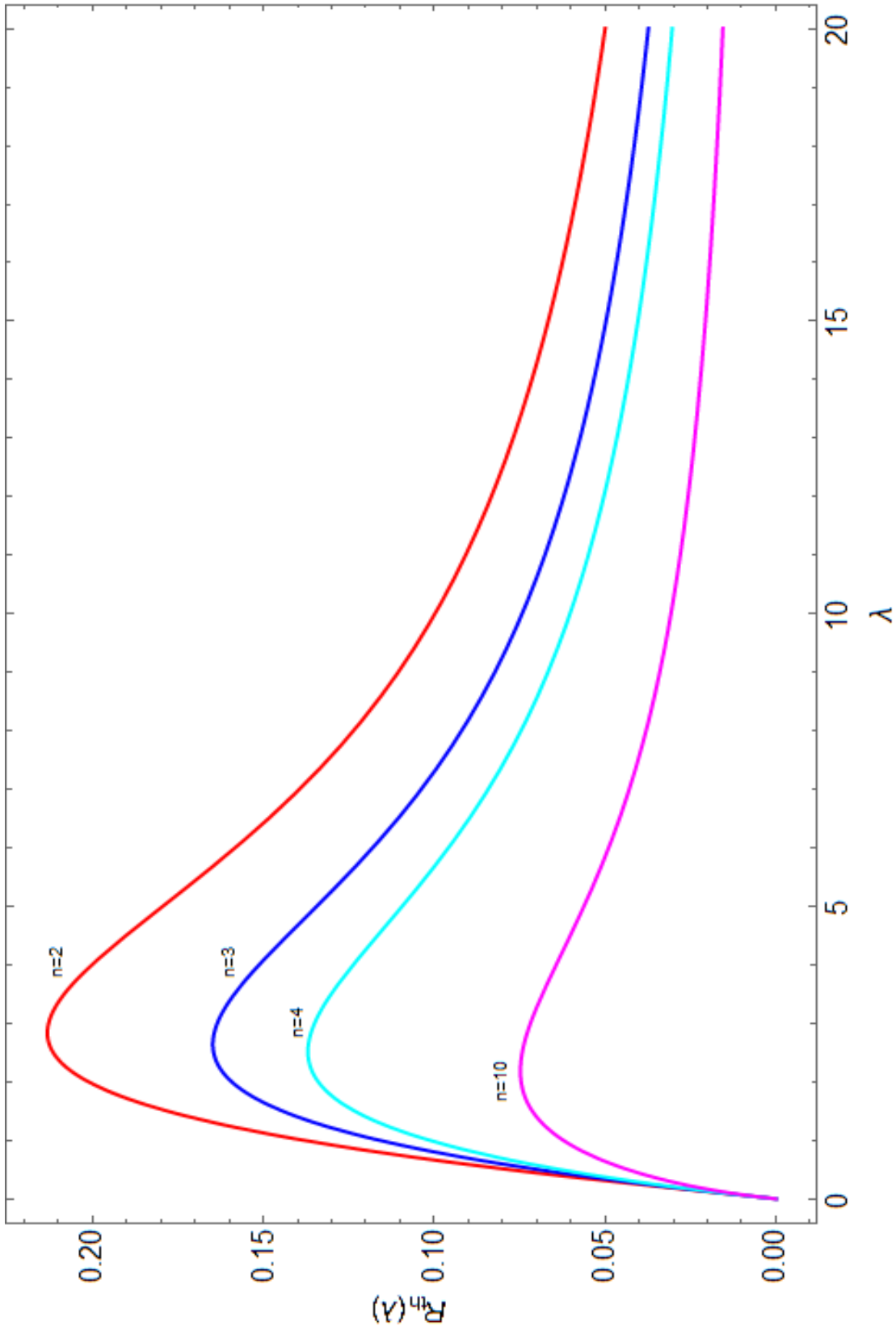


Figure. III.4: Ecart relatif $R_{th}(\lambda)$ en fonction de λ pour un système à deux, trois, quatre et dix niveaux. Les étiquettes sur les courbes représentent les nombres de niveaux.

Nous avons considéré des systèmes à N bosons sans interaction répartis entre un petit nombre de niveaux d'énergie. Nous avons déterminé l'énergie moyenne dans l'ensemble canonique et l'ensemble grand canonique. Nous avons calculé la différence par rapport à la limite thermodynamique. Cet écart s'est révélé être non nul, et peut atteindre la valeur de 21% pour un système à deux niveaux. Nous avons examiné également des systèmes avec 3, 4 et 10 niveaux d'énergies équidistants. L'écart est toujours non nul mais la valeur maximale diminue à mesure que le nombre de niveaux augmente. Il est de 7% pour un système à 10 niveaux d'énergie équidistants.

Nous concluons que ces deux ensembles ne sont pas équivalents pour les systèmes à faible nombre de niveaux. Compte tenu de la diminution régulière de la différence lorsque le nombre de niveaux augmente, on peut s'attendre à ce que cet écart soit nul lorsque le nombre de niveaux est infini.

Par conséquent, on peut donc penser que l'équivalence entre ces deux ensembles sera complète pour les systèmes avec un nombre infini de niveaux (cas des bosons libres dans une boîte et des bosons piégés dans un potentiel harmonique).

III.4 Conclusion

Nous avons étudié l'équivalence ensemble canonique et ensemble grand canonique à travers l'énergie moyenne. Nous avons calculé l'écart relatif entre ces deux énergies moyennes dans la limite thermodynamique. Cet écart étant non nul (21% pour les systèmes à deux niveaux d'énergies équidistants), nous en avons conclu que ces deux ensembles ne sont pas équivalents pour ce système de bosons répartis sur un petit nombre de niveaux équidistants, contrairement à ce qui était supposé dans la littérature.

Toutefois, l'écart diminue quand le nombre de niveaux augmente (7% pour un système à 10 niveaux équidistants). On peut penser que cet écart relatif s'annule pour des systèmes à nombre infini de niveaux d'énergie et que l'équivalence ensemble canonique ensemble grand canonique, telle que postulée dans la littérature, est valable pour ces systèmes.

Conclusion générale

Ce travail est composé de deux parties.

Dans une première partie nous avons étudié des systèmes formés de N bosons répartis sur un petit nombre de niveaux d'énergie. Nous arrivons à calculer la fonction de partition canonique alors qu'elle est très difficile à calculer dans un cas général de nombre de niveaux infinis. Nous avons considéré des situations où les niveaux d'énergie sont quelconques puis des cas où les niveaux sont équidistants. Nous en avons déduit l'énergie moyenne dans chaque cas. En comparant avec le cas classique, nous avons donné une expression de la corrélation quantique pour l'énergie moyenne pour ces systèmes. Nous avons tracé cette corrélation quantique en fonction de la température, du nombre de niveaux et du nombre de particules. Nous avons constaté, en particulier, que cette corrélation quantique en énergie augmente avec le nombre de niveaux d'énergie et aussi qu'avec le nombre de particules. Ceci peut être compris car les corrélations se font entre toutes les particules et donc elles sont plus importantes quand le nombre de particules est plus grand.

Dans une seconde partie, nous avons étudié l'équivalence ensemble canonique et ensemble grand canonique à travers l'énergie moyenne déterminée précédemment. Nous avons comparé l'énergie moyenne donnée dans l'ensemble canonique en utilisant les résultats de la première partie à l'énergie moyenne du même système donné dans l'ensemble grand canonique. Pour que les deux systèmes considérés soient entièrement équivalents, nous avons imposé que le nombre moyen de particules dans l'ensemble grand canonique soit égal au nombre de particules de l'ensemble canonique. Nous avons calculé l'écart relatif entre ces deux énergies moyennes dans la limite thermodynamique. Nous avons constaté que cet écart atteint 21% pour les systèmes à deux niveaux. Nous en avons conclu que ces deux ensembles ne sont pas équivalents pour ce système, contrairement à ce qui était supposé dans la littérature. Nous avons calculé cet écart relatif pour des systèmes à trois, quatre et dix niveaux d'énergie.

Conclusion générale

Cet écart est toujours non nul ; il diminue quand le nombre de niveaux augmente. On peut penser que cet écart relatif va être nul pour des systèmes à nombre infini de niveaux d'énergie (bosons libres dans une boîte, bosons piégés dans un oscillateur harmonique à une dimension) et que l'équivalence ensemble canonique ensemble grand canonique telle que postulée dans la littérature, est valable pour ces systèmes.

Comme perspective à ce travail, c'est d'étudier cette équivalence pour des systèmes à spectres généraux, à nombre de niveaux quelconques. Il faut pour cela, pouvoir déterminer pour ces systèmes la fonction de partition canonique exacte.

Références

- [Bal92] R. Balian, “From microphysics to macrophysics”. Volume I, Springer, Berlin (1992)
- [Cam09] A. Campa, T.Dauxois and S. Ruffo, Phys. Rep. 480 57 (2009).
- [Cas07] L. Casetti, M. Kastner, “Partial equivalence of statistical ensembles and kinetic energy” Physica A 384, 318-334 (2007).
- [Cha06] P.H. Chavanis, Int. J. Mod. Phys. B20 3113 (2006).
- [Cha13] M. Chalony, J. Barr, B. Marcos, A. Olivetti, and D. Wilkowski, “Long-range one-dimensional gravitational-like interaction in a neutral atomic cold gas,” Phys. Rev. A 87, 013401 (2013).
- [Cos05] M. Costeniuc, R.S. Ellis, H. Touchette, B. Turkington, “The generalized canonical ensemble and its universal equivalence with microcanonical ensemble” J. Stat. Phys. 119(5-6), (2005)
- [Cos06] M. Costeniuc, R.S. Ellis, H. Touchette, B. Turkington, “Generalized canonical ensembles and ensemble equivalence” Phys.Rev E73(2), 026105 (2006)
- [Del01] J. von Delft, D. C. Ralph, Phys. Rep. 345, 61 (2001).
- [Ein25] A. Einstein, S.Bose. preub. Akad.Wiss “Bose-Einstein condensation of an ideal gas”, Physik.-math.KI.23, 3(1925)
- [Eli00] R. S. Ellis, K. Haven, and B. Turkington, “Large deviation principles and complete equivalence and nonequivalence results for pure and mixed ensembles”, J. Stat. Phys. 101, 999–1064 (2000).
- [Eyi93] G. L. Eyink, H. Spohn, J. Stat. Phys.70 833 (1993).
- [Gib02] J. W. Gibbs “Elementary principles in statistical mechanics”, New Haven, Yale Univ. Press publisher (1902).
- [Gil04] F. Gilleron and J.-C. Pain, Phys. Rev. E 69, 056117 (2004)
- [Gri72] R. B. Griffiths, “Rigorous results and theorems,” in Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 1, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic Press, London, 1972) pp. 7–109.
- [Gro96] S.Grossmann, M.Holtaus, “Microcanonical fluctuations of a Bose system ground state occupation number” ,Phys.Rev. E **54**, 3495 (1996)
- [Gro01] Gross D. H. E., Microcanonical Thermodynamics: Phase Transitions in “Small” Systems Vol. 66 of Lecture Notes in Physics (World Scientific, Singapore) 2001.
- [Hua87] Kerson Huang, Statistical Mechanics, John Wiley & sons, 1987
- [Her71] Hertel P. and Thirring W., Ann. Phys. (N.Y.), 63 (1971) 520.

- [Her97] C. Herzog and M. Olshanii, Phys. Rev. A 55, 3254 (1997)
- [Isp01] I. Ispolatov, E. G. D. Cohen, Phys. Rev. Lett., 87 210601 (2001).
- [Kas10] M. Kastner, “Nonequivalence of ensembles for long-range quantum spin systems in optical lattices “Phys Rev Lett 104,240403 (2010).
- [Kas10b] M. Kastner, “Nonequivalence of ensembles in the Curie-Weiss anisotropic quantum Heisenberg model “ J. Stat. Mech. P07006 (2010)
- [Kos08] D.S. Kosov, M.P. Gelin and A.I. Vdovin, “Calculations of canonical averages from the grand canonical ensemble” Phys.Rev E77, 021120 (2008)
- [Lan84] L. Landau, E. Lifchitz, Physique théorique, Vol5 3em Edt 1984 Éditions MIR
- [Lyn68] D. Lynden-Bell, R. Wood, Mon. Notic. Roy. Astron. Soc., 138 495 (1968).
- [Lyn77] D. Lynden-Bell and R. M. Lynden-Bell, Mon. Notic. Roy. Astron. Soc., 181 405(1977).
- [Lyn99] Lynden-Bell D., Physica A, 263 293(1999).
- [Meh13] S.K. Mehdi, N. Daoudi, S. Kessal, Acta Physica Polonica B Vol. 44, N10 (2013)
- [Ngô88] C. Ngô, H. Ngô, Physique statistique Introduction, Dunod, Paris, 2008, 3eme édition, ISBN 978-2-10-053777-8
- [Oli14] G. Olivier and M. Kastner, “Microcanonical analysis of the Curie-Weiss anisotropic quantum Heisenberg model in a magnetic field”, J. Stat. Phys. 157, 456–473 (2014).
- [Pat11] R. K. Pathria and P. D. Beale, Statistical mechanics, Academic Press, Elsevier (2011), 3rd edition.
- [Pol96] H. D. Politzer, Phys. Rev. A 54, 5048 (1996).
- [Rei98] L.E. Reichl, “A Modern Course in Statistical Physics” John Wiley & sons, 1998
- [Ros94] R. Rossignoli and P. Ring, Ann. Phys. 235, 350 (1994).
- [Rue69] D. Ruelle “Statistical Mechanic Rigourous Results”, (Benjamin, Reading, 1969)
- [Sal01] S.R.A. Salinas, “Introduction to Statistical Physics” Springer-Verlag 2001
- [Tou04] H. Touchette, R.S. Ellis, and B. Turkington, “An Introduction to the Thermodynamic and Macrostate Levels of Nonequivalent Ensembles “ Physica A,340,138(2004)
- [Tou11] H. Touchette, “Ensemble equivalence for general many body systems” EPL 96(5), 50010 (2011)