

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA  
FACULTE DES SCIENCES



MEMOIRE

*Présenté en vue de l'obtention du diplôme de*

**MASTER**

Spécialité : **PHYSIQUE**

Option : **PHYSIQUE COMPUTATIONNELLE**

*Par*

**FATMI HANANE**

*Sur le thème*

**LA CONDENSATION DE BOSE-EINSTEIN**

Soutenu le 26 Juin 2018 devant le jury composé de :

<b>MM. KOUIDRI S.</b>	<b>Président</b>	<b>M.C.B</b>	<b>Université de Saida</b>
<b>HAMADA L.</b>	<b>Rapporteur</b>	<b>M.C.A</b>	<b>Université de Saida</b>
<b>ABADA A.</b>	<b>Examineur</b>	<b>M.C.B</b>	<b>Université de Saida</b>
<b>MESKINE M.</b>	<b>Examineur</b>	<b>M.C.A</b>	<b>Université de Saida</b>

**Année Universitaire 2017 - 2018**

*Tout d'abord, nous remercions mon dieu, notre créateur de  
nos avoir donné la force, la patience et le courage afin  
d'accomplir ce travail modeste*

*On remercie tous nos enseignants du primaire jusqu'à la  
2ème année master*

*Nous adressons le grand remerciement à notre encadreur  
Mr Hamada qui a proposé le thème de ce mémoire, pour  
ces conseils et ses dirigé du début jusqu'à la fin de ce  
travail.*

*Nous tenons également à remercier messieurs les membres  
de jury pour honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de  
siéger à notre soutenance, nous avoir fait honneur de  
présider le jury de cette mémoire.*

*Finalement, nous tenons à exprimer notre profonde  
gratitude à nos familles qui nous ont toujours soutenues et  
à tout ce qui participe de réaliser ce mémoire. Ainsi que  
l'ensemble des enseignants qu'ont contribué à notre  
formation.*

## *Dédicace.*

---

*Je dédie ce travail :*

*À mes parents les très chers dans le monde, pour leur soutien et  
encouragement.*

*À mes frères et sœurs.*

*À toute ma famille du petit au grand.*

*Aux étudiants de la 02ème promotion au LMD, Surtout les  
étudiants de spécialité «physique computationnelle»*

*À ma promotrice Mr L. Hamada pour ses conseils et ses*

*Consultations qui m'ont aidé à la réalisation de mon travail.*

*Et surtout à mes très chères amies qui font mon équilibre, pour  
leur présence dans ma vie*

*Fatmi Hanane*

<b>Remerciements</b>	<b>i</b>
<b>Dédicace</b>	<b>ii</b>
<b>Table des matières</b>	<b>iii</b>
<b>Introduction générale.....</b>	<b>7</b>
<b>I. les différentes statistiques.....</b>	<b>10</b>
I.1- Introduction.....	11
I.2-statistique Maxwell Boltzmann.....	11
I.2.1- système de particules discernables: statistique de Maxwell Boltzmann .....	11
I.2.1.1- calcul de la probabilité thermodynamique.....	11
I.2.1.2- répartition à l'équilibre.....	12
I.2.1.3- fonctions thermodynamiques.....	14
I.3-système de particules indiscernables: statistiques quantiques.....	15
I.3.1- règle de symétrisation.....	15
I.3.1.1- règle de Pauli.....	15
I.3.1.2-Bosons et fermions.....	16
I.4- statistique Fermi-Dirac.....	17
I.4.1-loi de répartition de Fermi-Dirac.....	17
I.4.2- la fonction de Fermi.....	18
I. 4.3- limite thermodynamique.....	20
I.5- Statistique de Bose-Einstein.....	21
I.5.1- loi de répartition de Bose-Einstein.....	21
I.5.2- distribution de Bose-Einstein.....	22
I.5.2.1- facteur de Bose.....	22
I.5.2.2- fonctions thermodynamiques.....	23
I.5.2.3- limite thermodynamique.....	24
I.5.2.4- température de Bose.....	25
I.6- Statistique de Maxwell-Boltzmann corrigée.....	26

I.6.1- Distribution et fonctions thermodynamiques.....	26
I.6.2- relation de distribution.....	27
I.6.3- Fonctions thermodynamiques.....	27
I.7- conclusion.....	28
<b>II. Gaz parfait et condensation de Bose-Einstein.....</b>	<b>29</b>
II.1- introduction.....	30
II.2-Gaz parfait de Bose.....	30
II. 3- Condensation de Bose-Einstein.....	44
II.3.1- Population du niveau fondamental.....	44
II.3.2- Répartition des particules.....	45
II.3.3- fonctions thermodynamiques d'un gaz de Bose dégénéré.....	46
II.4-conclusion.....	48
<b>III-condensation de Bose dans les solides.....</b>	<b>49</b>
III.1- Introduction.....	50
III.2- la préparation et la caractérisation d'un condensat.....	51
III.2.1- le piégeage des atomes.....	51
III.3-1e refroidissement par évaporation.....	52
III.4- l'observation des condensats.....	53
III.5-la cohérence des condensats.....	54
III.6-les atomes condensables et les dispositifs expérimentaux.....	55
III.7-description théorique du condensat.....	56
III.7-1 Contrôle des interactions entre atomes.....	56
III.7.2- Equation de Gross-Pitaevskii.....	57
<b>-conclusion générale.....</b>	<b>62</b>

## Table de Matières.

---

<b>Annexe</b>	<b>64</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>70</b>
<b>Résumé</b>	<b>71</b>

## Chapitre I Introduction

---

La condensation de Bose-Einstein a eu un destin historique plutôt inhabituel dans l'histoire de la physique. Habituellement, c'est assez rapidement que les grandes percées théoriques sont reconnues par les contemporains, et donnent lieu à des vérifications expérimentales. Ici, non seulement l'idée d'Einstein a été accueillie avec des doutes sérieux, mais environ 70 ans se sont écoulés avant que des observations expérimentales vraiment indiscutables permettent de contrer clairement l'analyse théorique initiale. Il faut en effet réaliser à quel point l'article original d'Einstein de 1924 est apparu tôt dans l'histoire de la physique quantique, en fait avant même que les lois de la mécanique quantique aient vraiment émergées. Par exemple l'équation de Schrödinger, qui peut être considérée comme le fondement de la physique quantique moderne, n'a été introduite qu'un an plus tard. On peut même souligner un contraste réel entre l'introduction de la condensation de Bose-Einstein et la découverte la plus connue d'Einstein, la relativité restreinte. Cette dernière s'appuyait sur de longs travaux d'approche menés par des physiciens aussi célèbres que Lorentz et Poincaré. Il semble parfaitement possible que, sans Einstein, d'autres auraient assez rapidement introduit des idées très semblables. Rien de tel dans le cas de l'introduction de la condensation de Bose-Einstein, totalement en avance sur son temps ; comme nous l'avons déjà mentionnée, son idée a été accueillie plutôt avec un certain scepticisme.

Les condensats de Bose-Einstein sont des objets quantiques mythiques : les particules y perdent leur individualité et se comportent comme si elles ne faisaient qu'une. Pour qu'une assemblée de bosons présente une telle condensation, il est nécessaire que ces particules interagissent, c'est-à-dire que leur longueur d'onde de Broglie soit supérieure à la distance entre particules. Ce critère est satisfait à une température d'autant plus élevée que la particule est légère. Ainsi, avec l'utilisation des polaritons de cavité, quasi-particules mixtes de matière et de photons (dont la masse est  $5 \times 10^8$  fois plus petite que celle de l'atome de rubidium), il a été observé la condensation de Bose-Einstein à 20 K, au lieu de  $0.2 \mu\text{K}$  pour le rubidium.

Ainsi toutes les particules élémentaires découvertes à ce jour peuvent se répartir dans deux catégories, suivant la valeur de leur spin et la nature de leur fonction d'onde. D'une part, nous avons des bosons du spin entier, qui obéissent à la statistique de Bose-Einstein, dont l'une des spécificités est de permettre l'occupation d'un même état quantique par plusieurs bosons. Par opposition, les fermions ont des spins demi-entiers, et obéissent au principe d'exclusion de Pauli, qui interdit à deux fermions d'occuper le même état quantique. La condensation de Bose-Einstein, formulée par Einstein en 1925 à la suite des travaux de Bose, prédit une occupation massive de l'état fondamental d'un système de bosons sous certaines conditions de température et de densité de particules. Une façon simple de décrire cette transition est de considérer un gaz de bosons sans interaction, en équilibre thermique à une température  $T$ , et de comparer leur longueur d'onde thermique de Broglie  $\lambda_{DB}$  avec la distance

moyenne entre particules  $d$ . La longueur d'onde de Broglie représente en quelque sorte l'extension spatiale de la particule massive. Lorsque  $T$  est élevée et  $N$  faible, nous avons  $\lambda_{DB} \ll d$  et le comportement des  $N$  bosons peut être prédit par la théorie classique des gaz. En revanche, lorsqu'on baisse suffisamment la température,  $\lambda_{DB}$  peut devenir comparable à  $d$ , et la statistique de Bose-Einstein doit être utilisée pour décrire la distribution des bosons dans le système. Un phénomène extraordinaire peut alors se produire en dessous d'une certaine température critique : une large fraction des bosons dans le gaz occupe l'état fondamental ( $N_0 \sim N$ , où  $N_0$  étant la population de l'état fondamental), alors que l'occupation des états excités suit une distribution « thermique » classique de type Maxwell-Boltzmann ( $N_e \ll N$ ,  $N_e$  étant la population de l'état excité). Cette distribution bimodale est la signature typique de la condensation de Bose-Einstein à température finie.

L'hélium liquide est resté longtemps l'exemple classique de la condensation de Bose-Einstein, après la découverte de ses propriétés superfluides à 2.2 K (1938). Cependant ce système reste fort éloigné du cadre théorique traité par Einstein à cause des fortes interactions qui existent entre bosons, limitant ainsi la fraction condensée à moins de 10% des atomes en présence, même aux plus basses températures. Ce n'est qu'en 1995 que la condensation proche du cas idéal a pu être réalisée dans un gaz dilué d'atomes de rubidium (Rb) ultra refroidis (groupe d'E. Cornell et C. Wieman (atomes de rubidium), puis W. Ketterle (atomes de sodium)). Les interactions entre atomes sont très faibles, et la fraction condensée dépasse les 90 %. Cependant, à cause de la masse très élevée des atomes Rb – plus de 100 000 fois la masse de l'électron libre –, il a fallu abaisser la température du gaz aux alentours de  $1\mu K$ , très proche du « zéro absolu », pour que la longueur d'onde de Broglie des atomes soit comparable à leur séparation moyenne (de l'ordre de  $0.1\mu m$ ). À côté de ces travaux assez largement connus sur les gaz d'atomes ultra froids, la condensation de Bose-Einstein dans les semi-conducteurs a fait l'objet d'études dès les années 60, avec les travaux théoriques de Moskalenko et de Blatt (1962) sur les excitons. Dans un solide, la périodicité du réseau cristallin introduit une bande d'énergie interdite aux électrons ou « gap » et, dans un semi-conducteur, ce gap sépare la bande de valence de la bande de conduction. Aux très basses températures, la bande de valence est la bande de plus haute énergie occupée par les électrons. Par excitation optique, on peut amener un électron de la bande de valence à la bande de conduction, laissant un état vide d'électron ou « trou » dans la bande de valence. Pour le solide, ce trou se comporte comme une quasi-particule de charge positive, et peut donc se lier avec l'électron dans la bande de conduction (chargé négativement) par interaction de Coulomb, formant ainsi un système comparable à un atome d'hydrogène appelé exciton. Bien que l'électron et le trou soient des fermions, l'exciton est une quasi-particule de type boson, candidate potentielle pour l'observation de la condensation de Bose-Einstein.

## Chapitre I Introduction

---

Le gaz d'excitons présente des avantages et des inconvénients pour réaliser le condensat. Comme principal avantage, est qu'il est possible de créer des excitons très facilement, avec une source laser d'énergie supérieure au gap par exemple. De plus leur masse effective est très petite, de l'ordre de la masse de l'électron libre, ce qui leur assure une longueur d'onde de Broglie suffisamment grande pour satisfaire le critère de condensation de Bose-Einstein à une température critique voisine de 1 K, température facilement accessible en laboratoire avec les techniques classiques de cryogénie. L'inconvénient avec les excitons est leur durée de vie finie, typiquement de quelques dizaines de picosecondes, qui est manifestement trop courte pour leur permettre de parvenir à l'équilibre thermique avec le réseau environnant. De plus, l'exciton n'est pas un « vrai » boson mais un boson composite, formé de deux fermions : électron et trou. On peut alors montrer que les excitons ne peuvent être assimilés à des bosons que si la distance entre excitons est beaucoup plus grande que la distance entre les fermions formant l'exciton. Ceci peut se traduire par l'inégalité  $Na_B^3 \ll 1$ , où  $N$  est la densité volumique d'excitons et  $a_B$  le rayon de Bohr de l'exciton.

Reste à savoir si cette densité  $N$  peut être suffisante pour satisfaire le critère de la condensation, ce qui fait que, dans la pratique, les excitons les plus adaptés pour les études de condensation sont ceux des semi-conducteurs à grand gap, car leur rayon de Bohr est beaucoup plus petit (environ 1.5 nm dans *ZnO* de gap 3.4 eV, contre 12 nm dans *GaAs* de gap 1.4 eV). Cependant, pour diverses raisons techniques et physiques, aucune démonstration convaincante de condensation d'excitons n'a pu être apportée durant les trois dernières décennies.

Dans ce mémoire nous décrivons dans le premier chapitre, de façon très détaillée, les différentes statistiques et leur limite.

Le deuxième chapitre consiste à développer avec tous les détails le gaz parfait de Bose ainsi que le phénomène de condensation de Bose-Einstein.

Le chapitre trois qui constitue la condensation dans les solides s'étale sur la préparation et la caractérisation d'un condensat, le piégeage des atomes, le refroidissement par évaporation, la description théorique et l'équation de Gross-Pitaevskii.

Enfin on termine par une conclusion générale.

# Chapitre I

# les différentes statistiques

## **I.1 Introduction:**

Les postulats définissent et prévoient la façon avec laquelle, à partir d'un modèle microscopique, comment les propriétés macroscopiques d'un système à l'équilibre donne à la probabilité thermodynamique.

Dans ce chapitre nous déterminerons les expressions de  $W$  (probabilité thermodynamique) dans les différents cas et nous en déduirons l'état macroscopique correspondant à d'équilibre (loi de répartition et fonctions thermodynamiques) des systèmes de particules indépendantes.

Nous serons amené à distinguer deux cas principaux selon que les particules sont discernables ou non, le calcul des probabilités thermodynamiques est différent dans ces deux cas et conduit respectivement à la statistique de Maxwell-Boltzmann et aux statistiques quantiques. Il existe deux statistiques quantiques selon la nature des particules : les particules de spin demi-entier (fermions) obéissent à la statistique de Fermi-Dirac et celles de spin entier (bosons) à la statistique de Bose-Einstein. Nous montrerons qu'à la limite des faibles densités de population des niveaux d'énergies, ces deux statistiques quantiques convergent vers une même limite désignée par statistique de Maxwell-Boltzmann corrigée.

## **I.2-STATISTIQUE MAXWELL BOLTZMANN**

### **I.2.1 Système de particules discernables : statistique de Maxwell-Boltzmann :**

#### **I.2.1.1-Calcul de la probabilité thermodynamique :**

Lorsque les particules sont localisées, donc discernables, on se trouve dans le cadre de la statistique de Maxwell-Boltzmann. Cherchons, dans ce cas, l'expression de la probabilité thermodynamique  $W$  d'un état macroscopique caractérisé par la donnée des nombres  $N_1, \dots, N_i, \dots, N_r$ .

Selon la méthode schématisée dans le tableau II-1-, nous évaluons tout d'abord le nombre  $W_0$  de façons de distribuer les  $N$  particules dans les domaines  $1, \dots, i, \dots, r$  selon la répartition macroscopique  $N_1, \dots, N_i, \dots, N_r$  choisie. Compte tenu de la discernabilité des particules, ce nombre est égal au nombre de façons de prendre  $N_1$  particules parmi les  $N$ , que multiplie le nombre de façons d'en prendre  $N_2$  parmi les  $N - N_1$  restantes, que multiplie le nombre de façons d'en prendre  $N_3$  parmi les  $N - N_1 - N_2$  restantes, etc., soit en termes de combinaisons :

$$W_0 = C_N^{N_1} \times C_{N-N_1}^{N_2} \dots C_{N-N_1-\dots-N_{r-1}}^{N_r} \quad (I-1)$$

# Chapitre I les différentes statistiques

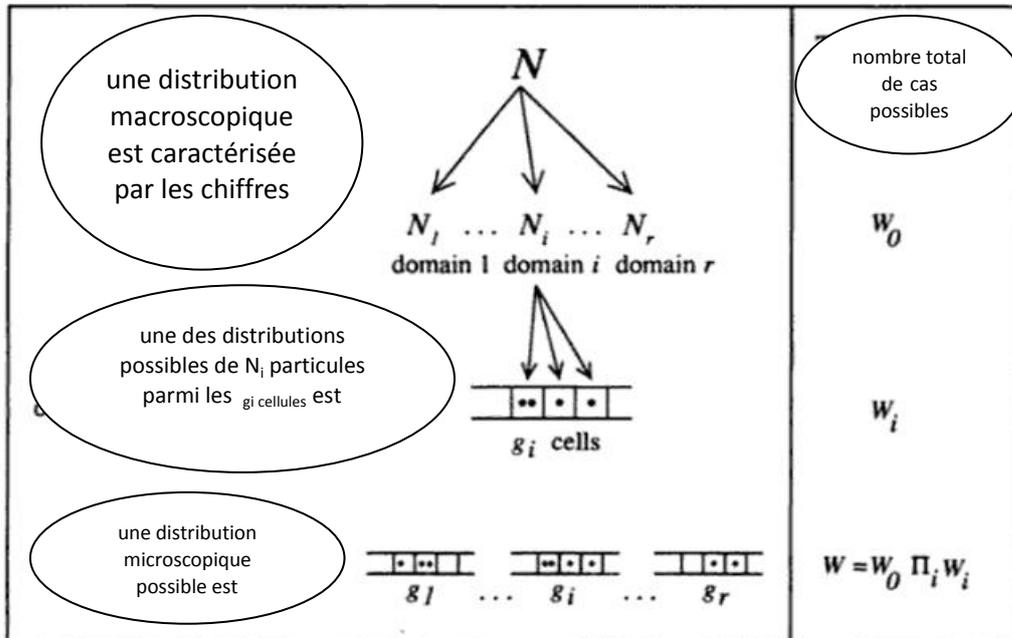
$$W_0 = \frac{N!}{N_1!(N - N_1)!} \times \frac{(N - N_1)!}{N_2!(N - N_1 - N_2)!} \times \dots \times \frac{(N - N_1 - \dots - N_{r-1})!}{N_r! \times 0!}$$

$$W_0 = \frac{N!}{N_1!N_2!\dots N_r!} = \frac{N!}{\prod_i N_i!} \quad (I-2)$$

Remarquons que ce résultat peut être retrouvé en considérant que les  $N!$  permutations des  $N$  particules doivent être divisées par celles des  $N_1, \dots, N_i, \dots, N_r$  particules. Nous devons maintenant évaluer le nombre  $W_i$  de façons de distribuer les  $N_i$  particules discernables du domaine, sachant qu'aucune restriction n'est imposée quant au nombre de particules par cellule. Comme chacune des particules a  $g_i$  possibilités, on a  $W_i = g_i^{N_i}$ , soit enfin :

$$W_{MB} = W_0 \prod_i W_i = N! \prod_i \frac{g_i^{N_i}}{N_i!} \quad (I-3)$$

Où l'indice  $MB$  est relatif à nom de la statistique de Maxwell-Boltzmann.



**Tableau I-1.** Probabilité thermodynamique de la répartition macroscopique  $N_1, \dots, N_i, \dots, N_r$ .

### I.2.1.2-Répartition à l'équilibre :

Pour déterminer la répartition à l'équilibre, nous remarquons que

$$N = \sum N_i \quad (I-4)$$

Et nous écrivons :

$$\text{Log}W_{MB} = \text{Log}(\sum_i N_i)! + \sum_i [N_i \text{Log} g_i - \text{Log}N_i!] \quad (I-5)$$

## Chapitre I les différentes statistiques

---

En utilisant l'approximation de Stirling et en dérivant par rapport à  $N_i$ , on obtient :

$$\frac{\partial \text{Log} W_{MB}}{\partial N_i} = \text{Log} N + \text{Log} g_i - \text{Log} N_i \quad (I-6)$$

Et les relations d'équilibre en utilisant les multiplicateurs de Lagrange (annexe) :

$$\frac{\partial \text{Log} W}{\partial N_i} = \frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T} \quad (I-7)$$

S'écrivent :

$$\text{Log} N \frac{g_i}{N_i^0} = \frac{\varepsilon_i - \mu}{k_B T} \quad (I-8)$$

On encore :

$$N_i^0 = N g_i e^{-\varepsilon_i/k_B T} e^{\mu/k_B T} \quad (I-9)$$

Cette expression représente la répartition à l'équilibre en fonction de  $\mu$  et  $T$ .

Pour éliminer  $\mu$ , on utilise alors la relation de contrainte (I-4) qui, compte tenu de l'expression (I-9), s'écrit

$$N = N e^{\mu/k_B T} \sum_i g_i e^{-\varepsilon_i/k_B T}. \quad (I-10)$$

Enfin l'autre relation de contrainte :

$$U = \sum N_i^0 \varepsilon_i \quad (I-11)$$

On pose  $Z$  la somme d'état

$$Z = \sum_i g_i e^{-\varepsilon_i/k_B T} \quad (I-12)$$

Qui joue un grand rôle dans la théorie statistique de Maxwell-Boltzmann, on lui donne le nom de fonction de partition relative à une particule ou, plus généralement fonction de partition. Elle ne dépend que de la température et des paramètres externes. Les relations (I-9) avec la normalisation et (I-11) donnent alors :

$$e^{\mu/k_B T} = 1/Z \quad \text{Ou} \quad \mu = -k_B T \text{Log} Z \quad (I-13)$$

Et la loi de répartition (I-9) en statistique de Maxwell-Boltzmann s'écrit à nouveau:

$$N_i^0 = \frac{N}{Z} g_i e^{-\varepsilon_i/k_B T} \quad (I-14)$$

Comme le facteur  $1/k_B T$  intervient fréquemment, on introduit la notation :

$$\beta = 1/k_B T \quad (I-15)$$

Qui permet de réécrire la loi de répartition sous la forme plus compacte:

$$N_i^0 = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (I-16)$$

Avec

$$Z = \sum_i g_i e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (I-17)$$

### I.2.1.3-Fonctions thermodynamiques :

L'expression statistique de l'entropie à l'équilibre peut être obtenue à partir de la relation de Boltzmann.

Pour la répartition à l'équilibre, nous avons :

$$S/k_B = \text{Log } W_{MB} = \text{Log } N! + \sum_i N_i^0 \text{Log } g_i - \sum_i \text{Log } N_i^0! \quad (I-18)$$

En utilisant l'approximation de Stirling, il vient :

$$S/k_B = N \text{Log } N - \sum_i N_i^0 \text{Log } \frac{N_i^0}{g_i} \quad (I-19)$$

La loi de répartition (I-14) nous fournit le rapport  $N_i^0/g_i$  et l'énergie s'écrit

$$U = \sum N_i \varepsilon_i \quad (I-20)$$

En utilisant les relations (I-5) et (I-8)

$$S = N k_B \text{Log } N - k_B \sum_i N_i^0 \text{Log } \frac{N}{Z} + \frac{1}{T} \sum_i N_i^0 \varepsilon_i = N k_B \text{Log } Z + \frac{U}{T} \quad (I-21)$$

Ce résultat nous permet d'obtenir l'expression très simple de l'énergie libre :

$$F = U - TS = -N k_B T \text{Log } Z \quad (I-22)$$

Comme les toutes fonctions thermodynamiques peuvent être obtenues partir de  $F$ , cette expression montre qu'en statistique de Maxwell- Boltzmann, tout problème se ramène à la détermination de la fonction de partition  $Z$  en fonction de la température  $T$  et des variables externes tels que  $V, B, \dots$

**I.3-Système de particules indiscernables : statistiques quantiques :**

**I.3.1-Règle de symétrisation.**

*Exemple d'un système de deux particules.*

Le principe d'indiscernabilité des particules identiques a des conséquences très importantes. Envisageons tout d'abord un système de deux particules identiques caractérisées par les indices 1 et 2 de fonction d'onde notée  $\varphi(1,2)$  introduisons l'opérateur de permutation  $\hat{P}_{12}$  défini pour une fonction d'onde  $\varphi(1,2)$  quelconque par :

$$\hat{P}_{12}\varphi(1,2) = \varphi(2,1) . \tag{I-23}$$

Par itération, on voit que

$$\hat{P}_{12}^2\varphi(1,2) = \hat{P}_{12}\varphi(2,1) = \varphi(1,2) \tag{I-24}$$

C'est-à-dire que les valeurs propres de  $\hat{P}_{12}$  sont  $+1$  et  $-1$  correspondant respectivement aux fonctions d'onde symétriques dans l'échange  $1 \leftrightarrow 2$  .comme les particules 1 et 2 sont indiscernables, les fonctions d'onde  $\varphi(1,2)$  et  $\varphi(2,1)$  décrivent la même réalité physique et ne diffèrent donc que par un facteur de phase :

$$\varphi(2,1) \equiv \hat{P}_{12}\varphi(1,2) = e^{i\alpha}\varphi(1,2) \tag{I-25}$$

Comme les valeurs propres de  $\hat{P}_{12}$  sont  $\pm 1$ , nous remarquons que les fonctions d'onde d'un système de 2 particules indiscernables sont nécessairement soit symétriques, soit antisymétriques relativement à l'échange des particules 1 et 2.

**I.3.1.1-règle de Pauli**

Envisageons le cas d'un système de deux particules sans interaction. Les solutions de l'équation de Schrödinger à une particule forment une suite  $\psi^{(1)}$ ,  $\psi^{(2)}$ , ...  $\psi^{(i)}$ , ... pour l'ensemble de ces particules, toute fonction  $\psi^{(i)}(1)\psi^{(j)}(2)$  sera à son tour solution de l'équation de Schrödinger à deux particules. Mais, en raison de la règle de symétrisation, cette forme ne correspond pas à une réalité physique et seules conviennent les combinaisons

Symétriques:  $(\psi^{(i)}(1)\psi^{(j)}(2) + \psi^{(j)}(1)\psi^{(i)}(2))/\sqrt{2}, \tag{I-26}$

Et antisymétriques:  $(\psi^{(i)}(1)\psi^{(j)}(2) - \psi^{(j)}(1)\psi^{(i)}(2))/\sqrt{2} \tag{I-27}$

Remarquons que, dans le cas de deux fonctions d'onde identiques ( $i = j$ ), on peut construire une fonction d'onde symétrique de la forme  $\psi^{(i)}(1)\psi^{(i)}(2)$  convenant pour des bosons ; par contre, il est impossible de construire une

fonction d'onde antisymétrique. En conséquence, deux fermions ne peuvent pas se trouver dans un même état quantique : ceci constitue la règle (ou principe d'exclusion) de Pauli (1925). Ce principe a permis d'interpréter le tableau périodique des éléments, ou classification de Mendeleïev, par le fait qu'il est interdit à deux électrons d'un atome de se trouver dans le même état quantique (même état orbital et même état de spin) ; il a été introduit en physique statistique par E. Fermi (1926).

Ces considérations entraînent des différences importantes pour les propriétés thermodynamiques des systèmes de bosons et de fermions, le dénombrement des états quantiques pour chaque catégorie étant différent.

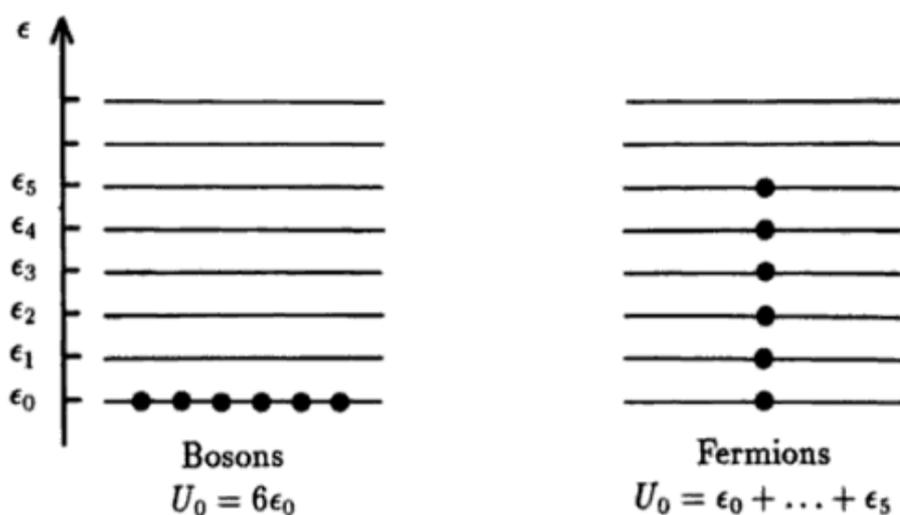


Figure I-1. Système de particules indiscernables : statistiques quantiques.

### I.3.1.2-Bosons et fermions :

La discussion précédente, fondée sur le principe d'indiscernabilité, se généralise au cas de  $N$  particules identiques en introduisant autant d'opérateurs  $\widehat{p}_{i,j}$  que de couples de particules ; la fonction d'onde du système doit être soit totalement symétrique, soit totalement antisymétrique relativement à l'échange d'un couple quelconque de variable  $i$  et  $j$ . Dans la nature, on constate que les particules se séparent en deux catégories :

- Les bosons, particules pour lesquelles la fonction d'onde est toujours symétrique.
- Les fermions, particules pour lesquelles la fonction d'onde est toujours antisymétrique.

La théorie quantique des champs montre que l'ensemble des bosons est identique à l'ensemble des particules de spin entier :  $0, 1, \dots$  en unités  $\hbar$ , et que l'ensemble des fermions est identique à celui des particules de spin demi-entier :  $1/2, 3/2, 5/2, \dots$

Parmi les fermions se classent les leptons (électrons, muons, neutrinos, ...) qui ont un spin  $1/2$ , les baryons (protons, neutrons, ...) de même que toutes les particules composées d'un nombre impair de fermions comme par exemple le noyau d'hélium  ${}^3\text{He}$  (2 protons + 1 neutron) ou l'atome  ${}^3\text{He}$  (un noyau  ${}^3\text{He}$  + 2 électrons). Parmi les bosons se classent les particules de jauge telles que le photon de spin 1. Les bosons intermédiaires  $W^+$ ,  $W^-$  et  $Z^0$ , ainsi que les mésons ( $\pi, k_B, \dots$ ) et toutes les particules composées d'un nombre pair de fermions comme le noyau  ${}^4\text{He}$  (2 protons + neutrons) ou l'atome d'hélium  ${}^4\text{He}$  (un noyau  ${}^4\text{He}$  + 2 électrons).

## I.4-Statistique Fermi-Dirac :

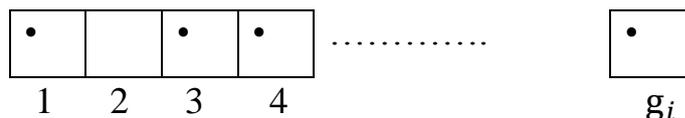
### **I.4.1-Loi de répartition de Fermi- Dirac :**

La statistique qui s'applique aux fermions porte le nom de Fermi-Dirac. Le calcul de la probabilité thermodynamique se fait à partir de la relation générale.

$$W = W_0 W_1 \dots W_I \dots W_r = W_0 \prod_{i=0}^r W_i$$

Les fermions d'un gaz étant des particules indiscernables, le nombre de façons  $W_0$  de distribuer  $N$  fermions sur les  $r$  niveaux suivant la répartition choisie  $N_1, \dots, N_i, \dots, N_r$  est égal à 1. Il suffit d'en prendre  $N_1$  quelconques (puisque indiscernables), puis  $N_2, \dots$  enfin  $N_r$ , cette valeur,  $W_0 = 1$  est très différente de celle trouvée en statistique de Maxwell-Boltzmann traitant le cas de particules discernables.

Le nombre  $W_i$  de répartitions possibles des  $N_i$  particules dans les  $g_i$  cellules du domaine  $i$  s'obtient, dans le cas des fermions, en imposant chaque cellule de contenir au plus une particule (c'est-à-dire 0 ou 1). Le schéma suivant montre l'exemple d'une répartition :



$N_i$  Particules

$g_i$  Cellules

## Chapitre I les différentes statistiques

---

On voit que l'on doit nécessairement avoir  $0 \leq N_i \leq g_i$ . Parmi les  $g_i$  cellules on peut en sélectionner  $N_i$  pour y placer les particules. Le nombre de façons  $W_i$  de choisir  $N_i$  objets  $g_i$  distincts est :

$$W_i = C_{g_i}^{N_i} = \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \quad (I-28)$$

La probabilité thermodynamique pour des fermions est donc :

$$W_{FD} = W_0 \prod_i W_i = \prod_i \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \quad (I-29)$$

Où l'indice  $FD$  est relatif à la statistique quantique de Fermi-Dirac.

Pour déterminer la répartition à l'équilibre à partir de la relation (I-7):

Nous écrivons :

$$\text{Log } W_{FD} = \sum_i [\text{Log } g_i! - \text{Log } N_i! - \text{Log}(g_i - N_i)!] \quad (I-30)$$

Soit, à l'aide de la formule de Stirling dérivée :

$$\frac{\partial \text{Log } W_{FD}}{\partial N_i} = -\text{Log } N_i + \text{Log}(g_i - N_i) = \text{Log} \frac{g_i - N_i}{N_i} \quad (I-31)$$

La condition (II.7) devient:

$$\text{Log} \frac{g_i - N_i^0}{N_i^0} = \beta(\varepsilon_i - \mu) \quad (I-32)$$

Et, en résolvant par rapport à  $N_i^0$ , on obtient la loi de répartition à l'équilibre en statistique de Fermi-Dirac :

$$N_i^0 = \frac{g_i}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1} \quad (I-33)$$

### I.4.2- la fonction de Fermi :

A partir de l'équation (I-33) on obtient :

$$N_i = \frac{g_i}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1} \quad (I-34)$$

Où

$$n_i = \frac{N_i}{g_i} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1} \quad (I-35)$$

Pour cela, considérons la fonction de Fermi dont la variable définie par :

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} \quad (I-36)$$

Où  $T$  et  $\mu$  sont deux paramètres

Nous examinons d'abord cette fonction à une valeur particulière  $T = 0$  (pour cette valeur,  $\mu$  est noté  $\mu_0$ ). Dans ce cas, l'argument de l'exponentielle est infini avec un signe qui dépend de celui de  $\varepsilon - \mu_0$ . Il s'ensuit que si  $\varepsilon$  est plus petit que  $\mu_0$  ( $\varepsilon > \mu_0$ ).

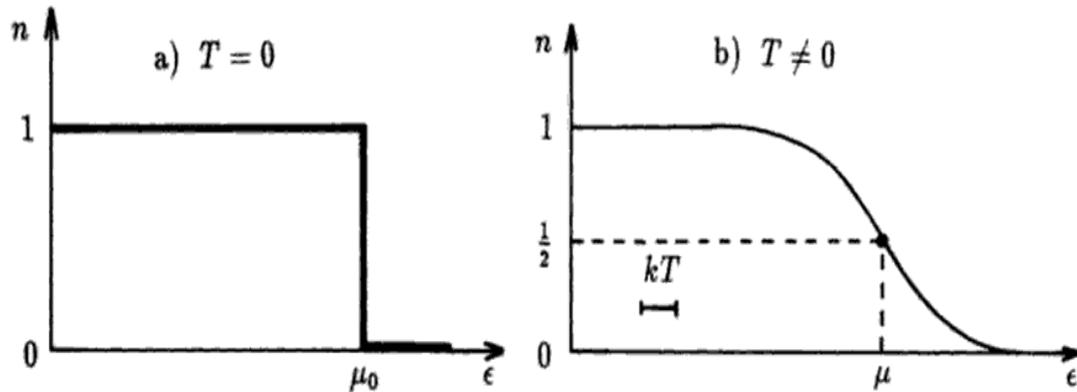


Figure II-2. Fonction de Fermi pour ( $T = 0$  et  $T \neq 0$ ).

L'exponentielle est nulle et  $n(\varepsilon)$  est égal à 1. Si toutefois  $\varepsilon$  est supérieur à  $\mu_0$  ( $\varepsilon > \mu_0$ ), alors l'exponentielle est infinie et  $n(\varepsilon)$  est nulle. La figure II-2a. Montre la fonction de Fermi quand  $T = 0$ . Il s'ensuit que dans les états quantiques pour lesquels  $\varepsilon_i < \mu_0$ , il y a autant de particules qu'il y a d'états quantiques ( $N_i = g_i$ ) que d'états pour lesquels  $\varepsilon < \mu_0$  ne sont pas peuplés ( $N_i = 0$ ). Le principe d'exclusion de Pauli fournit une explication pour cette distribution. Au zéro absolu, le système est dans l'état d'énergie le plus bas que l'on puisse obtenir en remplissant chaque état quantique par une seule particule, en partant du niveau d'énergie le plus bas jusqu'à ce qu'il ne reste plus de particules. Tout état quantique dont l'énergie est inférieure à  $\mu_0$  est donc occupé par une particule, tandis que les niveaux supérieurs sont vides.

Pour d'autres températures, la forme de la fonction de Fermi  $n(\varepsilon)$  change comme indiqué sur la figure II.2b. Il est bien clair que le point de coordonnées  $(\mu, 1/2)$  est le centre de symétrie de la courbe, puisque :

$$1 - n(\varepsilon) = \frac{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}} \quad (I-37)$$

Ce point, où la pente de la tangente est de  $-1 / 4k_B T$ , est donc aussi un point d'inflexion. La courbe s'écarte significativement de sa valeur asymptotique (1 et 0) seulement dans une région dont la largeur est de l'ordre de  $6k_B T$ , comme on peut le voir dans cet exemple

$$n(\mu - 3k_B T) - n(\mu + 3k_B T) = 0.9 \quad (I-38)$$

Il s'ensuit que lorsque  $k_B T \ll \mu$  la forme de la courbe est très proche de celle de  $T = 0$

Enfin, quand  $\varepsilon$  est beaucoup plus grand que  $\mu$  ( $\varepsilon \gg \mu$ ), l'exponentielle devient très grande et la limite suivante s'applique alors :

$$n(\varepsilon) = e^{\beta(\mu-\varepsilon)} (\varepsilon \gg \mu) \quad (I-39)$$

### I.4.3-Limite thermodynamique.

Pour des grands systèmes, comme dans le cas “classique”, on peut négliger la différence entre des états d'énergie successifs, ainsi que les fluctuations des variables internes. On transformera donc les sommes discrètes en intégrales continues. Il faudra alors tenir compte de la densité d'états. Pour un espace à trois dimensions, d'après l'équation :

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \quad (I-40)$$

La densité d'état s'exprime pour des particules sans interactions :

$$\rho(\varepsilon) = AV \sqrt{\varepsilon} \quad (I-41)$$

Dans le cas de particules de spin non nul, la densité d'état doit être multipliée par le facteur de dégénérescence  $(2s + 1)$ , d'où :

$$A = (2s + 1) \frac{2\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \quad (I-42)$$

Plutôt que d'étudier la relation (II-36) qui représente un nombre discret, il est plus simple d'étudier la fonction continue correspondante :

$$f_F(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \quad (I-43)$$

Et  $N$  le nombre total de particules du système

$$N = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} f_F(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon = AV \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \quad (I-44)$$

On ne l'écrit plus sous forme de valeur moyenne, puisque les fluctuations sont négligeables). La borne  $\varepsilon_0$  est le seuil d'énergie du système, correspondant à l'état d'énergie le plus bas.

Dans le cas de fermions libres, sans énergie potentielle,  $\varepsilon_0 = 0$  et la relation

(I-44) devient :

$$N = AV \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \quad (I-45)$$



Si l'on admet que le terme  $N_i + g_i$  est très grand devant 1, ce qui sera toujours le cas par la suite, nous obtenons:

$$\frac{\partial \text{Log } W_{BE}}{\partial N_i} = \text{Log } \frac{N_i + g_i}{N_i} \quad (I-50)$$

La condition d'équilibre s'écrit alors :

$$\text{Log } \frac{N_i^0 + g_i}{N_i^0} = \beta(\varepsilon_i - \mu) \quad (I-51)$$

Soit, en résolvant,

$$N_i^0 = \frac{g_i}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} \quad (I-52)$$

Cette loi de répartition à l'équilibre, appelée loi de répartition de Bose-Einstein, a une forme semblable à celle de Fermi-Dirac, ce qui permet de traiter les deux statistiques simultanément. Nous pouvons écrire les deux lois de répartition à l'équilibre sous la forme :

$$N_i^0 = \frac{g_i}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} \pm 1} \begin{matrix} (FD) \\ (BE) \end{matrix} \quad (I-53)$$

Dans laquelle nous utiliserons, comme dans tout le reste de ce chapitre, le signe supérieur pour la statistique de Fermi-Dirac et le signe inférieur pour celle de Bose-Einstein. Notons que la population  $N_i^0$  du domaine  $i$  est proportionnelle à  $g_i$  qui détermine l'extension du domaine ; cela signifie que la façon dont est fait le découpage en domaines n'intervient pas. La grandeur significative est le rapport :

$$n_i^0 = \frac{N_i^0}{g_i} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} \pm 1} \quad (I-54)$$

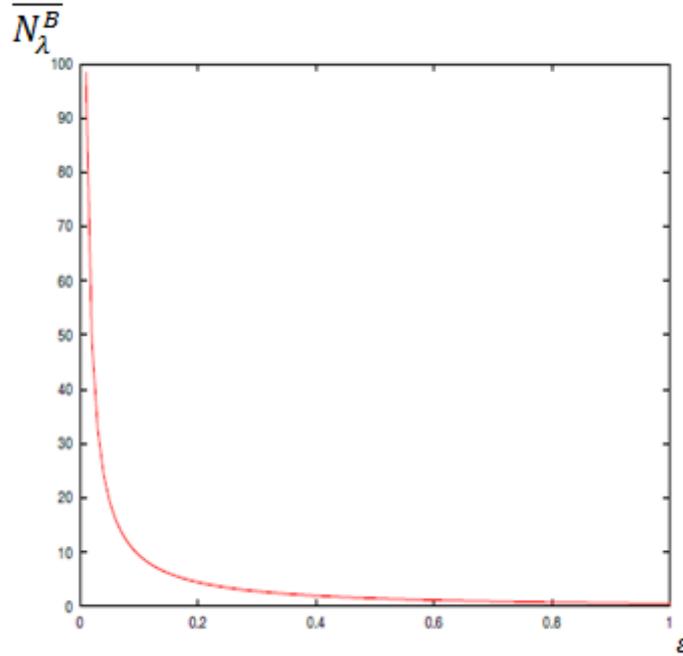
Qui représente le nombre moyen de particules par cellules (ou par état quantique). Nous remarquons que ce nombre est une fonction décroissante de l'énergie  $\varepsilon_i$ .

### I.5.2-Distribution de Bose-Einstein :

#### I.5.2.1-Facteur de Bose.

Il donne le nombre moyen de bosons dans l'état individuel défini par la donnée de son énergie  $\varepsilon$ , de son potentiel chimique  $\mu$ , à la température  $T$  :

$$\bar{N}_\lambda^B = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\lambda - \mu)} - 1} \quad (I-55)$$



**Figure I-3.** Evolution du facteur de Bose  $\bar{N}_\lambda^B$  en fonction de  $\beta(\epsilon_\lambda - \mu)$

Bien entendu, pour que  $\bar{N}_\lambda^B \geq 0 \forall \lambda$ , il est nécessaire que  $\mu < \epsilon_0$ , énergie du niveau fondamental. Le graphe  $\bar{N}_\lambda^B = f(\epsilon)$  montre que  $\bar{N}_\lambda^B$  est maximal pour  $\epsilon = \epsilon_0$ , ce qui signifie que l'état le plus peuplé est bien le niveau fondamental.

### I.5.2.2-Fonctions thermodynamiques.

Comme dans le cadre de la statistique de Fermi-Dirac, on peut écrire les fonctions thermodynamiques du système en fonction de  $\bar{N}_\alpha^B$  dans le cadre de la statistique de Bose-Einstein. On obtient le nombre moyen de particules du système :

$$\bar{N} = \sum_{\alpha} \bar{N}_{\alpha}^B \quad (I-56)$$

L'énergie moyenne correspondante :

$$\bar{E} = \sum_{\alpha} \bar{N}_{\alpha}^B \epsilon_{\alpha} \quad (I-57)$$

L'entropie du système :

$$S = -k_B T \sum_{\alpha} [\bar{N}_{\alpha}^B \text{Log} \bar{N}_{\alpha}^B - (1 + \bar{N}_{\alpha}^B) \text{Log}(1 + \bar{N}_{\alpha}^B)] \quad (I-58)$$

Le grand potentiel :

$$J = -k_B T \sum_{\alpha} \text{Log}(1 + \bar{N}_{\alpha}^B) \quad (I-59)$$

### I.5.2.3-Limite thermodynamique.

Comme dans le cas de fermions, on peut remplacer l'expression (I-48) par une fonction continue (limite thermodynamique) :

$$f_B(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (I-60)$$

Avec comme condition supplémentaire :

$$\mu \leq \varepsilon_0 \quad (I-61)$$

On peut alors écrire les fonctions thermodynamiques en fonction de  $f_B(\varepsilon)$ .

Le nombre moyen de particules du système est donnée par :

$$N = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} f_B(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon = AV \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon \quad (I-62)$$

Avec  $\mu \leq \varepsilon_0$ .

Dans le cas de bosons libres sans énergie potentielle,  $\varepsilon_0 = 0$  et la relation précédente devient :

$$N = AV \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (I-63)$$

Avec  $\mu \leq 0$ .

Si le nombre de particules par unité de volume  $n = \frac{N}{V}$  est fixé,  $\mu$  est donné en fonction de  $n$  et  $T$  par la relation ci-dessus. Dans le cas de la limite classique, on retrouve les expressions (I-60) et (I-62). L'énergie  $E$  du système est donnée, dans ces conditions, par :

$$E = \int_0^{\infty} f_B(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\infty} \frac{AV \varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon \quad (I-64)$$

Et le grand potentiel  $J$  (d'après l'équation (II-59)) par :

$$J = -k_B T \int_0^{\infty} \text{Log}[1 + f_B(\varepsilon)] \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (I-65)$$

Soit :

$$J = AV k_B T \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} \text{Log}[1 - e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}] d\varepsilon \quad (I-66)$$

Cette intégrale peut se transformer par une intégration par parties, et on obtient :

$$J = -\frac{2}{3} \int_0^{\infty} \frac{AV \varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} d\varepsilon \quad (I-67)$$

Le potentiel est donc relié à l'énergie du système, dans le cadre de la statistique de Bose-Einstein comme dans le cadre de la statistique de Fermi-Dirac, par :

$$J = -\frac{2}{3}E \quad (I-68)$$

L'entropie est alors donnée par :

$$S = -\left(\frac{\partial J}{\partial T}\right)_{\mu,V} = \frac{2AV}{3k_B T^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}(\varepsilon-\mu)e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{[e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1]^2} d\varepsilon \quad (I-69)$$

Et la pression  $p$  par :

$$p = -\left(\frac{\partial J}{\partial T}\right)_{\mu,V} = -\frac{J}{V} \quad (I-70)$$

Soit :

$$p = \frac{2E}{3V} \quad (I-71)$$

Ce qui représente l'équation d'état du gaz de bosons.

#### I.5.2.4-Température de Bose :

Les expressions que nous venons d'obtenir sont valables uniquement si la condition :

$$\mu \leq 0$$

est satisfaite. Il importe donc de comprendre la signification de cette condition et ses conséquences. Etudions tout d'abord le cas limite où  $\mu = 0$ , on peut alors résoudre l'équation (I-62) qui s'écrit :

$$N = AV \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\beta\varepsilon}-1} \quad (I-72)$$

Soit, avec le changement de variable approprié :

$$N = \frac{AV}{\beta^{3/2}} I\left(\frac{1}{2}\right) \quad (I-73)$$

Où  $I\left(\frac{1}{2}\right)$  est une intégrale particulière dont la valeur est donnée dans les tables mathématiques :

$$I\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^x-1} dx \approx 2,612 \times \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (I-74)$$

L'équation (I-73) donne ainsi, à un nombre de particules  $N$  fixé, une valeur de la température appelée température de Bose telle que :

$$T_B = \frac{1}{k_B} \left( \frac{N}{AV} \frac{1}{1,306\sqrt{\pi}} \right)^{2/3} \quad (I-75)$$

Soit :

$$T_B = \frac{h^2}{2\pi m k_B} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \left(\frac{1}{2,612(2s+1)}\right)^{2/3} \quad (I-76)$$

La température de Bose représente donc la température du système pour laquelle le potentiel chimique est nul. Or, nous avons vu que  $\mu$  doit être négatif ou nul. Que se passe-t-il lorsque  $\mu$  est négatif ? Un examen de l'expression (II-63) montre que, si on change uniquement  $\mu$  en gardant le nombre de particules constant, l'exposant  $\beta(\varepsilon - \mu)$  doit rester le même. Le potentiel chimique passant de la valeur zéro à une valeur négative,  $(\varepsilon - \mu)$  augmente,  $\beta$  doit donc diminuer et la température  $T$  augmentée.

En d'autres termes, la condition  $\mu < 0$  équivaut à la condition :

$$T > T_B \quad (I-77)$$

Inversement, si on étudie un système satisfaisant la condition (I-77), et si on diminue sa température à nombre de particules constant, le potentiel chimique, de valeur négative, augmente. Lorsque la température du système atteint la valeur  $T_B$ , le potentiel chimique s'annule. Que se passe-t-il si on continue à baisser la température ? Alors, les approximations du paragraphe de limite thermodynamique de Bose ne sont plus valables et il nous faut reprendre les expressions rigoureuses du paragraphe I.5.2.

### I.6-Statistique de Maxwell-Boltzmann corrigée :

#### I.6.1-Distribution et fonctions thermodynamiques :

La statistique de Maxwell-Boltzmann corrigées ( $MB_c$ ) s'appliquent aux systèmes composés de particules indiscernables indépendantes dans le cas limite des niveaux d'énergie faiblement peuplés ( $N_i \ll g_i$ ) ce type de statistiques à la limite des statistiques quantiques de Bose-Einstein et de Fermi-Dirac. Son formalisme est très similaire à celui des statistiques maxwell-Boltzmann ( $MB$ ) ces deux types de statistiques sont caractérisés par les probabilités thermodynamiques

$$W_{MBC} = \prod_i \frac{g_i^{N_i}}{N_i!} \quad \text{Et} \quad W_{MB} = N! \prod_i \frac{g_i^{N_i}}{N_i!} \quad (I-78)$$

Qui ne diffèrent que par le facteur  $N!$  ce facteur, qui définit le nombre de permutations mutuelles de  $N$  particules discernables, apparaît dans les statistiques de Maxwell-Boltzmann, mais pas dans les statistiques corrigées de Maxwell-Boltzmann, à cause du postulat de l'indiscernabilité.

### I.6.2-Relation de distribution :

La relation de distribution est donnée par :

$$N_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (I-79)$$

Où la fonction de partition pour une particule :

$$Z = \sum_i g_i e^{-\beta \varepsilon_i} = \sum_j e^{-\beta \varepsilon_j} \quad (I-80)$$

Est une somme sur les niveaux d'énergie  $i$  ou sur les états quantiques  $j$  de la particule. Cette distribution est identique à celle des statistiques Maxwell-Boltzmann ses propriétés sont donc les mêmes:

- pour une température donnée, le rapport des densités de population  $n_i = \frac{N_i}{g_i}$  de deux niveaux d'énergie ne dépend que de leur différence d'énergie
- changer l'origine des énergies ne change pas la distribution
- si les diverses formes d'énergie sont additives, elles contribuent à la fonction de partition en tant que facteurs multiplicateurs
- le théorème d'équipartition d'énergie est valable dans la même condition.

### I.6.3-Fonctions thermodynamiques :

L'énergie libre s'exprime en fonction de  $Z$  par :

$$F = -Nk_B T \left( \text{Log} \frac{Z}{N} + 1 \right) \quad (I-81)$$

La différentielle de l'énergie libre est donnée par :

$$dF = -SdT - PdV + \mu dN \quad (I-82)$$

On en déduit les différentes grandeurs thermodynamiques :

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} = Nk_B \left[ \frac{\text{Log} Z}{N} + 1 + T \left( \frac{\partial \text{Log} Z}{\partial T} \right)_V \right] \quad (I-83)$$

$$P = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = Nk_B T \left( \frac{\partial \text{Log} Z}{\partial V} \right)_T \quad (I-84)$$

$$\mu = \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = -k_B T \text{Log} \frac{Z}{N} \quad (I-85)$$

$$U = F + TS = Nk_B T^2 \left( \frac{\partial \text{Log} Z}{\partial T} \right)_V = -N \left( \frac{\partial \text{Log} Z}{\partial \beta} \right)_V \quad (I-86)$$

$$C_v = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_{V,N} = Nk_B \frac{\partial}{\partial T} \left[ T^2 \frac{\partial \text{Log} Z}{\partial T} \right]_V = Nk_B \beta^2 \left( \frac{\partial^2 \text{Log} Z}{\partial \beta^2} \right)_V \quad (I-87)$$

## Chapitre I les différentes statistiques

---

Notez que si la fonction de partition ne peut pas être exprimée comme une expression analytique simple, la chaleur spécifique peut être trouvée en utilisant le formulaire :

$$C_v = Nk_B\beta^2 \left[ \frac{Z''}{Z} - \frac{Z'^2}{Z^2} \right] \quad (I-88)$$

Avec

$$Z' = \frac{\partial Z}{\partial \beta} = - \sum_i g_i \varepsilon_i e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (I-89)$$

Et

$$Z'' = \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} = \sum_i g_i \varepsilon_i^2 e^{-\beta \varepsilon_i} \quad (I-90)$$

Le calcul est alors effectué numériquement, la série étant tronquée selon la précision désirée. Quand un champ électrique  $\mathcal{E}$  ou une densité de flux magnétique  $B$  est présente,  $dF$  contient les termes :

$dW = -pd\mathcal{E}$  Ou  $dW = -MdB$  les moments dipolaires électriques et magnétiques  $P$  et  $M$  sont données par :

$$p = - \left( \frac{\partial F}{\partial \mathcal{E}} \right)_{T,N,V} = Nk_B T \left( \frac{\partial \text{Log} Z}{\partial \mathcal{E}} \right)_{T,V} \quad (I-91)$$

$$M = - \left( \frac{\partial F}{\partial B} \right)_{T,N,V} = Nk_B T \left( \frac{\partial \text{Log} Z}{\partial B} \right)_{T,V} \quad (I-92)$$

### I.7-Conclusion:

Nous avons étudié, dans ce chapitre les ensembles statistiques et les différents types de particules sans entrer dans des explications qui feraient intervenir la parité ou non des fonctions d'onde, il existe deux types de particules : celles ayant un spin nul ou entier (photon, phonon,...) qui obéissent à la statistique de Bose-Einstein : ces particules sont appelées bosons, elles peuvent occuper plusieurs sous-états identiques, celles ayant un spin demi-entier (électron, proton, neutron, neutrino, méson,...) qui obéissent à la statistique de Fermi-Dirac : ces particules sont appelées fermions, il ne peut y avoir plus d'un fermion par sous-état (principe d'exclusion de Pauli).

# Chapitre II

## Gaz parfait de Bose

### Et condensation de Bose-Einstein

### II.1-Introduction :

La condensation de Bose-Einstein est l'apparition d'un état particulier d'un gaz quantique à très basse température. Prédite en 1924 par Einstein suite à un travail du physicien indien Bose, elle repose sur le principe selon lequel des bosons (particules de spin entier) peuvent occuper le même état quantique, contrairement aux fermions qui obéissent au principe d'exclusion de Pauli. Plus précisément, ce qu'Einstein a découvert, c'est que pour un gaz de bosons donné, il existe une température critique en dessous de laquelle un nombre macroscopique de particules quantiques peuplent l'état de moindre énergie, formant un "condensat de Bose-Einstein». Dans un tel état, toutes les particules perdent leur individualité et le condensat doit être décrit dans son ensemble comme un objet quantique macroscopique. En particulier, l'aspect ondulatoire de la matière (cf. la dualité onde-corpuscule quantique) devient visible à grande échelle, comme c'est également le cas dans un superfluide, le superfluide étant toutefois différent d'un condensat de Bose-Einstein du fait des fortes interactions entre ses constituants.

La première observation de la condensation de Bose-Einstein d'un gaz atomique a eu lieu en 1995, suite aux travaux d'Eric Cornell et Carl Wieman qui refroidirent un gaz de rubidium à des températures inférieures à 170 nano kelvins. Cette expérience leur valut de partager le Prix Nobel de physique 2001 avec Wolfgang Ketterle.

### II.2-Gaz parfait de Bose :

Comme première application concrète des statistiques quantiques nous allons calculer dans ce chapitre les propriétés d'un gaz parfait (non relativiste) de bosons indiscernables. Il faut s'attendre à retrouver pour le gaz parfait de Bose, le gaz parfait de Boltzmann (gaz parfait classique), à des températures thermodynamiques élevées auront donc lieu lorsque la condition :

$$n\lambda^3 \ll 1 \quad (II.1)$$

Où

$$\lambda = \frac{h}{(2\pi mk_B T)^{1/2}}$$

N'est plus vérifiée. Lorsqu'on l'applique à des systèmes réels, le paramètre  $n\lambda^3$  ne peut cependant être trop grand, car pour des températures très faibles (énergie cinétique par particule faible) ainsi que pour des densités élevées (distance moyenne faible entre particules) les interactions dans les systèmes réels ne sont plus négligeables. Le gaz parfait de Bose constitue donc un modèle sur lequel les effets quantiques s'étudient très bien, mais qui ne peut décrire

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

qu'approximativement des systèmes réels. Notre but à présent est de calculer la fonction de partition grand-canonique, ou plus simplement son logarithme sachant que

$$\text{Log } Z = \frac{pV}{k_B T} = \frac{1}{a} \sum_{k_B=1}^{\infty} \text{Log}[1 + az \exp(-\beta \varepsilon_k)] \quad (II-2)$$

$$\text{Avec : } a = \begin{cases} +1, FD, \\ 0, MB, \\ -1, BE, \end{cases}$$

On obtient :

$$\begin{aligned} q(T, V, z) &= \text{Log } Z(T, V, z) \\ q(T, V, z) &= - \sum_i \text{Log}(1 - z \exp[-\beta \varepsilon_i]) \end{aligned} \quad (II.3)$$

Pour lequel on se servira de la notation abrégée  $q(T, V, z)$ . Les énergies à une particule  $\varepsilon_k$  sont celles de particules quantiques libres dans une boîte de volume  $V$ , puisque le potentiel chimique  $\mu$  ou la fugacité  $z$ , respectivement, ne sont pas fixés pour un tel système, mais que c'est le nombre de particules qui l'est, il faut déterminer  $z$  à partir de l'équation

$$\begin{aligned} N(T, V, \mu) &= kT \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Log } Z|_{T, V} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) + a} \\ N &= \sum_k \langle n_k \rangle^{BE} = \sum_k \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) + 1} \end{aligned} \quad (II.4)$$

On peut immédiatement en tirer une conclusion importante. Pour tous les états à une particule  $|k\rangle$  il faut que  $0 \leq \langle n_k \rangle \leq N$ ; c'est-à-dire,  $z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_k) = \exp[\beta(\beta \varepsilon_k - \mu)] > 1$ ; donc  $\varepsilon_k = \mu$  pour tout  $k$ . Le potentiel chimique d'un gaz de Bose doit être plus petit que l'énergie du niveau à une particule le plus bas  $\varepsilon = 0$ ; c'est-à-dire  $\mu \leq 0$  et  $0 \leq z \leq 1$ . Ceci est équivalent au fait de dire que les bosons semblent ressentir un potentiel attractif et que l'addition de bosons supplémentaires au système coûte de l'énergie. La restriction de la fugacité à l'intervalle  $0 \leq z \leq 1$  est très importante pour un grand volume, la somme sur tous les états à une particule peut s'écrire sous forme d'une intégrale,

$$\sum_k \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 k = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \quad (II.5)$$

Dans la dernière transformation nous avons utilisé  $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$ . Cette formulation se trouve aussi en considérant l'espace de phase classique la grandeur.

$$\sum = \int \frac{d^3 \vec{r} d^3 \vec{p}}{h^3} = \frac{4\pi V}{h^3} \int p^2 dp = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \quad (II.6)$$

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

---

Qui représente le nombre d'états dans l'espace des phases à une particule.

Et :

$$g(\varepsilon) = \frac{d\Sigma}{d\varepsilon} = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \quad (II.7)$$

Peut s'interpréter comme la densité d'états à une particule. La substitution  $\sum_k \rightarrow \int g(\varepsilon) d\varepsilon$  fournit exactement ce résultat. Avec cela, les relations (II.3) et (II.4) peuvent se réécrire sous formes intégrales. Il faut néanmoins faire attention à un détail, tant que le volume du système est grand, mais fini, les états à une particule sont très proches les uns des autres mais ne sont pas continus. Dans ce cas, l'approximation par une intégrale n'est pas très correcte pour des énergies faibles  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Dans une boîte avec des conditions aux limites périodiques il existe en effet un état pour lequel  $\varepsilon = 0$ , avec la fonction d'onde à une particule  $\phi_0(r) = V^{-1/2}$ . Cependant, dans l'approximation d'une intégrale cet état n'apparaît pas, puisque  $g(0) = 0$ . A première vue cela ne semble pas très important, puisque tous les autres états  $\varepsilon = 0$  jouent un rôle particulier pour le gaz de Bose. Il nous faut donc tenir explicitement compte du terme

$k = 0$  ( $\varepsilon = 0$ ) dans les sommes (II.3) et (II.4) :

$$q(T, V, z) = -\frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} d\varepsilon \text{Log}[1 - z \exp(-\beta\varepsilon)] - \text{Log}(1 - z)$$

$$q(T, V, z) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \frac{2}{3} \beta \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{z^{-1} \exp(\beta\varepsilon) - 1} - \text{Log}(1 - z) \quad (II.8)$$

Entre les deux expressions précédentes nous avons effectué une intégration par parties. Le dernier terme de la relation (III.8) représente simplement l'équation (III.3) évalué pour  $\varepsilon = 0$ . L'équation (III.4) détermine le nombre de particules, qui s'écrit :

$$N(T, V, z) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{z^{-1} \exp\{\beta\varepsilon\} - 1} + \frac{z}{1-z} \quad (II.9)$$

Ici également le dernier terme  $N_0 = z/(1 - z)$ , représente la contribution du niveau  $\varepsilon = 0$  au nombre total (moyen) de particule (II.4) et fournit donc le nombre de particules dans cet état.

Les intégrales qui apparaissent dans les équations (II.8) et (II.9) sont des intégrales standards de physique mathématique. On peut les transformer avec la substitution  $x = \beta\varepsilon$  en intégrales de la forme générale :

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^\infty \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1} \exp\{x\} - 1} \quad 0 \leq z \leq 1. \quad n \in \mathbb{R} \quad (II.10)$$

Où  $\Gamma(n)$  désigne la fonction gamma. Les équations (II.8) et (II.9) deviennent alors :

$$q(T, V, z) = \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \text{Log}(1 - z) \quad (II.11)$$

$$N(T, V, z) = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + N_0(z) \quad (II.12)$$

Notre but est de déterminer maintenant la fugacité  $z$  du gaz de l'équation (II.12) (à nombre de particules donné), puis de reporter ce résultat dans l'équation (II.11). Malheureusement, on ne peut le faire explicitement, car les fonctions  $g_n(z)$  sont définies par l'intégrale (II.10) et ne possèdent pas de représentation en termes de fonctions "simples". Commençons donc d'abord par une vue d'ensemble des propriétés de  $g_n(z)$  pour cela, développons la fonction :

$z \exp[-x]$  qui s'exprime aussi par :  $\frac{1}{z^{-1} \exp[x] - 1}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{z^{-1} \exp[x] - 1} &= z \exp[-x] \frac{1}{1 - z \exp[-x]} \\ \frac{1}{z^{-1} \exp[x] - 1} &= z \exp[-x] \sum_{k=0}^{\infty} (z \exp[-x])^k \\ \frac{1}{z^{-1} \exp[x] - 1} &= \sum_{k=1}^{\infty} z^k \exp[-kx] \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} z^k \exp[-kx] \end{aligned} \quad (II.13)$$

Ce qui donne :

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{k=0}^{\infty} z^k \int_0^{\infty} x^{n-1} \exp[-kx] dx \quad (II.14)$$

Avec  $y = kx$

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^n} \int_0^{\infty} y^{n-1} \exp[-y] dy \quad (II.15)$$

La dernière intégrale est simplement  $\Gamma(n)$  et donc :

$$g_n(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^n} \quad 0 \leq z \leq 1 \quad (II.16)$$

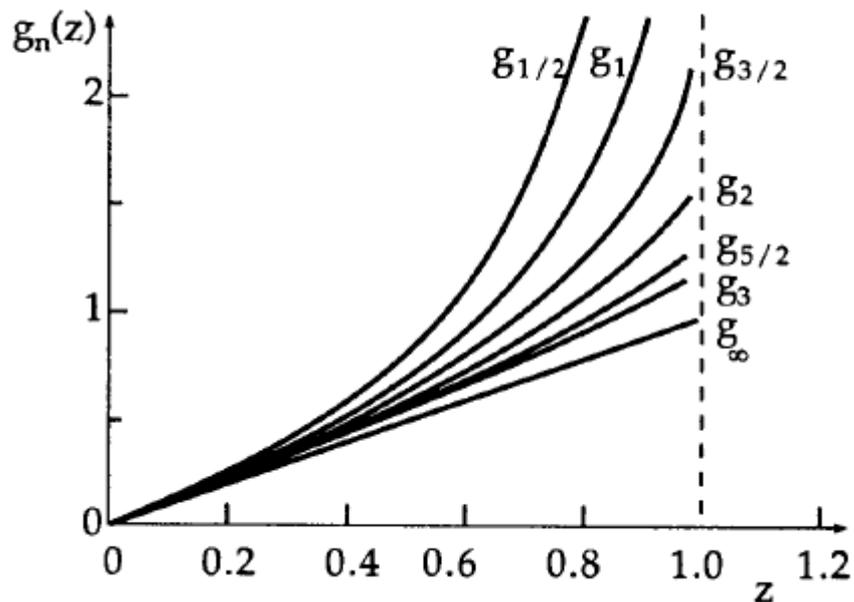
L'équation (II.16) fournit une relation intéressante avec la fonction Zêta de Riemann  $\zeta(n)$ . Pour  $z = 1$  ( $\mu = 0$ ). Nous avons :

$$g_n(1) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^n} = \zeta(n) \quad n > 1 \quad (II.17)$$

Cette série ne converge que pour  $n > 1$ , ce qui ne signifie pas cependant que les fonctions  $g_n(z)$  ne sont définies que pour  $n > 1$ , mais que  $g_n(z) \rightarrow \infty$  pour

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

$n \leq 1$  et  $z \rightarrow 1$  ; au contraire  $g_n(z)$  est finie pour  $n > 1$  et  $0 \leq z \leq 1$ . Certaines valeurs spéciales de  $g_n(z)$  souvent utilisées :



**Figure II.1.** Les fonctions  $g_n(z)$

Quelques valeurs de la fonction  $\zeta$  pour différentes valeurs de  $n$  :

$n$	$\zeta(n)$
1	$\infty$
3/2	2.612
2	$\pi^2/6 \approx 1.645$
5/2	1.341
3	$\approx 1.202$
7/2	$\approx 1$
4	$\pi^4/90 \approx 1.082$
6	$\pi^4/945 \approx 1.017$
8	$\pi^8/9450 \approx 1.004$

**Figure II.2.** Tableau de  $\zeta(n)$  en fonction de  $n$

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

Nous avons maintenant une bonne vue d'ensemble de l'allure des  $g_n(z)$ . Elles partent toutes de l'origine ( $z = 0$ ) avec une pente égale à 1 et tendent vers l'infini pour  $z \rightarrow 1$ , si  $n \leq 1$  (figure II.1). Pour  $n > 1$  elles ont une valeur finie en  $z = 1$ , qui décroît régulièrement lorsque  $n$  croît comme le montre la relation (II.16). Pour  $n \rightarrow \infty$ ,  $g_n(z) \approx z$ . Puisque les séries (II.17) ne convergent que très lentement pour  $z = 1$  et  $n$  faible, on calcule en pratique les intégrales (II.8) et (II.9) plus facilement avec un ordinateur.

Etudions à présent plus en détail les propriétés physiques du gaz de Bose. Partons de la relation (II.12) pour déterminer la fugacité à  $N$  et  $V$  donnés :

$$N = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) + \frac{z}{1-z} = N_\varepsilon + N_0 \quad (II.18)$$

Le premier terme  $N_\varepsilon$  représente le nombre de particules dans les états excités, alors que  $N_0$  détermine le nombre de particules dans l'état  $\varepsilon = 0$ . Voyons tout d'abord l'ordre de grandeur de ces termes. Bien sûr, pour  $N \gg 1$  et des températures pas trop faibles, en général  $V\lambda^{-3} \gg 1$ . D'autre part,  $g_{3/2}$  est limité à l'intervalle  $0 \leq g_{3/2}(z) \leq \zeta(3/2) = 2.612$ . Pour  $V$  et  $T$  données le premier terme de la relation (II.18) vaut au plus

$$N_\varepsilon^{max} = \frac{V}{\lambda^3} \zeta(3/2) = V \left( \frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \zeta(3/2) \propto VT^{3/2} \quad (II.19)$$

Il ne peut donc pas y avoir plus de  $N_\varepsilon^{max}$  particules dans des états excités. Par ailleurs, on peut négliger le terme  $N_0 = z/(1-z)$  tant que  $z$  n'est pas trop voisin de un. Si  $N_0$  doit contribuer notablement au nombre de particules, il faut que :

$$N \approx N_0 = \frac{z}{1-z} \quad \text{Ou} \quad z \approx \frac{N}{N+1} \approx 1 \quad (II.20)$$

Etudions à présent la limite thermodynamique de la relation (II.18)

( $N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, N/V = \text{constante}$ ). Pour cela écrivons la relation (II.18) sous la forme :

$$1 = \frac{N_\varepsilon}{N} + \frac{N_0}{N} \quad N_\varepsilon = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \quad N_0 = \frac{z}{z-1} \quad (III.21)$$

Il nous faut maintenant distinguer deux cas dans la limite thermodynamique. Pour  $z \neq 1$ ,  $N_0$  est fini et  $N_0/N \rightarrow 0$ . Le nombre de particules dans l'état fondamental est alors infiniment petit : toutes les particules occupent des états excités. Si  $z = 1$ ,  $N_\varepsilon = N_\varepsilon^{max}$ .  $N_0$  est alors en principe infiniment grand et  $N_0/N$  est une expression indéterminée. Dans ce cas,  $N_0$  est donnée par l'excédent  $N - N_\varepsilon^{max}$ . Toutes les particules ne sont plus dans les états excités et il devient favorable pour le système de mettre l'excédent de particules dans le niveau  $\varepsilon = 0$ . En résumé, on obtient :

$$1 = \frac{N_\varepsilon}{N} + \frac{N_0}{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \begin{cases} \frac{N_\varepsilon}{N}, \frac{N_0}{N} = 0 & \text{pour } z < 1 \\ \frac{N_\varepsilon^{max}}{N} + \frac{N_0}{N} & \text{pour } z = 1 \end{cases} \quad (II.22)$$

Etudions maintenant plus en détail le phénomène, que l'on appelle *la condensation de Bose*. Fixons les variables indépendantes  $N, V$  et  $T$  du système. Si l'on a :

$$N < N_\varepsilon^{max} = \frac{V}{\lambda^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad \text{Ou} \quad \frac{N\lambda^3}{V} < \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad (II.23)$$

Toutes les particules peuvent être placées dans des états excités. La fugacité est différente de l'unité ( $z < 1$ ) et doit être déterminée à partir de la relation :

$$N = \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \quad (II.24)$$

Dans ce cas, le second terme,  $N_0$  peut être négligé dans (II.12) ou (II.18). Mais maintenant si,

$$N > N_\varepsilon^{max} = \frac{V}{\lambda^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad (II.25)$$

Les états excités ( $\varepsilon > 0$ ) ne sont pas suffisants pour contenir les particules. Alors  $z = 1$  et l'excédent :

$$N_0 = N - N_\varepsilon^{max} = N - \frac{V}{\lambda^3} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad (II.26)$$

se condense dans l'état fondamental  $\varepsilon = 0$ . Le passage entre les équations (II.23) et (II.25) se produit juste quand

$$\frac{N\lambda^3}{V} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad (II.27)$$

Pour des températures élevées et des densités faibles on est dans le cas de la relation (II.23), l'énergie thermique est suffisamment élevée pour exciter (presque) toutes les particules dans des niveaux excités  $\varepsilon > 0$ . Au contraire, si la température devient très basse ou la densité suffisamment élevée, la corrélation statistique positive des bosons se fait fortement ressentir. Les bosons ont tendance à se rassembler dans l'état  $\varepsilon = 0$ . Il devient favorable (plus probable) pour le système de ne plus distribuer l'énergie d'excitation thermique sur toutes les particules, mais seulement sur la fraction  $N_\varepsilon^{max}/N$  et de mettre le reste  $N_0$ , dans l'état fondamental  $\varepsilon = 0$ . Nous avons déjà vu en étudiant la distribution des nombres d'occupation que la probabilité de trouver de nombreux bosons dans le même état était plus grande que dans le cas classique. Pour des températures élevées, ceci n'est cependant pas très évident, puisque l'énergie d'excitation est suffisante pour répartir les particules sur beaucoup d'états différents.

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

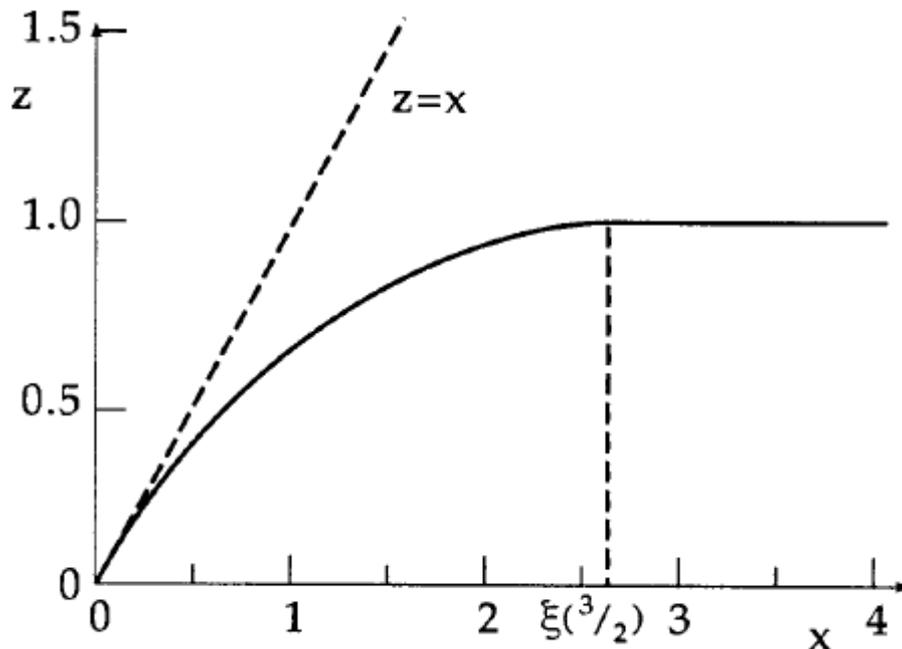
Introduisons le paramètre suivant  $x$  défini par:

$$x = \frac{n\lambda^3}{V}$$

On obtient pour la fugacité, à partir de la relation (III.24),

$$z = \begin{cases} 1 & \text{si } x \geq \zeta(3/2) \\ \text{solution de } x = g_{3/2}(z) & \text{si } x < \zeta(3/2) \end{cases} \quad (II.28)$$

Si l'on évalue numériquement l'équation (II.28) on obtient la figure qui suit : la courbe  $z(x)$  possède un point anguleux pour  $x = \zeta(3/2)$  (figure II.2). Cela ne se produit néanmoins que pour la limite thermodynamique. Pour un nombre fini de particules ( $N \gg 1$ ), le palier s'arrondit, puisqu'il faut alors déterminer numériquement  $z$  à partir de l'équation complète (II.18), et alors  $N_0/N$  ne peut plus être négligé par rapport à  $N_\varepsilon/N$ . On a alors partout  $z < 1$ .



**La figure II.3.**  $z(x)$  D'après la relation (III.28).

La condensation de Bose n'apparaît pas brusquement pour  $x = \zeta(3/2)$ , mais on a toujours  $N_0 > 0$  et  $N_\varepsilon < N_\varepsilon^{max}$ . Pour des valeurs de  $x (= g_{3/2}(z))$  ( $x \ll 1$ ) très petites,  $g_{3/2}(z)$  converge et est pour l'essentiel donnée par les premiers termes du développement (II.16),

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

---

$$x = z + \frac{z^2}{2^{3/2}} + \dots \quad \text{si } x \leq 1 \quad \text{ou } z \approx x = \frac{N\lambda^3}{V} \quad (II.29)$$

Une comparaison avec l'équation

$(-\frac{\partial \varphi}{\partial \mu}|_{T,V} = N(T, V, \mu) = \exp\left\{\frac{\mu}{kT}\right\} V \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2})$  montre qu'il s'agit justement du cas limite du gaz parfait (courbe en pointillé sur la figure II.3). Pour les nombres de particule  $N_\varepsilon$  et  $N_0$ , on obtient en utilisant les équations (II.28) et (II.22) :

$$N_\varepsilon = \begin{cases} N & \text{si } x < \zeta(3/2) \quad \text{i.e., } N < N_\varepsilon^{max} \\ N_\varepsilon^{max} & \text{si } x \geq \zeta(3/2) \quad \text{i.e., } N \geq N_\varepsilon^{max} \end{cases} \quad (II.30)$$

$$N_0 = \begin{cases} 0 & \text{si } x < \zeta(3/2) \\ N - N_\varepsilon^{max} & \text{si } x \geq \zeta(3/2) \end{cases} \quad (III.31)$$

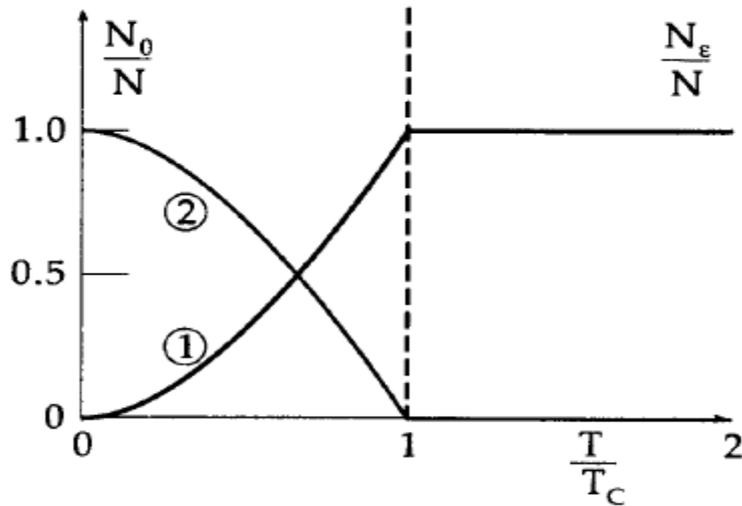
Considérons à présent un gaz parfait de Bose à densité de particules donnée  $N/V$  en fonction de la température. L'équation (II.27) définit alors une température critique  $T_c$  en dessous de laquelle la condensation de Bose se produit :

$$k_B T_c = \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \frac{h^2}{2\pi m [\zeta(3/2)]^{2/3}} \quad (II.32)$$

Si l'on exprime  $N_\varepsilon^{max}$  dans l'Équation (II.19) en fonction de la température critique, les équations (II.30) et (III.2.31) deviennent :

$$\frac{N_\varepsilon}{N} = \begin{cases} 1 & T \geq T_c \\ \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} & T < T_c \end{cases} \quad (II.33)$$

$$\frac{N_0}{N} = \begin{cases} 0 & T \geq T_c \\ 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} & T < T_c \end{cases} \quad (II.34)$$



**Figure II.4.**  $N_\epsilon(T)/N$  Et  $\frac{N_0(T)}{N}$  en fonction de  $\frac{T}{T_c}$

Ces fonctions sont représentées sur la figure III.4. On s'aperçoit très bien comment à partir de  $T = T_c$  l'état  $\epsilon = 0$  doit contenir plus de particules si le système est davantage refroidi. Cette figure n'est cependant valable que dans la limite thermodynamique c'est-à-dire, pour  $N \rightarrow \infty$ . Pour un nombre fini de particules, il n'y a pas de points anguleux pour  $T = T_c$ .

Puisque la fugacité  $z(T, V, z)$  est à présent connue, nous pouvons également étudier, le potentiel grand-canonique ou  $q(T, V, z)$ . On a :

$$\text{Log } z = \frac{pV}{k_B T} \quad (II.35)$$

avec :  $\text{Log } z = q(T, V, z)$

$$pV = k_B T q(T, V, z) \quad (II.36)$$

D'après l'équation (II.11) on a donc pour la pression :

$$p = \frac{k_B T}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \frac{k_B T}{V} \text{Log}(1 - z) \quad (II.37)$$

Il est bon également de commencer par considérer la limite thermodynamique ( $N \rightarrow \infty$ ). On remarque aisément que l'on peut toujours négliger le dernier terme dans l'équation (III.37). Si  $z < 1$ ,  $\text{Log}(1 - z)$  est fini et ce terme tend vers zéro pour  $V \rightarrow \infty$ . De plus,  $1 - z$  peut au plus décroître comme  $1/(N + 1)$  d'après l'équation (III.21), si bien que le produit de  $V^{-1}$  par le terme logarithmique  $\text{Log}(N + 1)$  qui tend vers l'infini s'annule lorsque  $N \rightarrow \infty$  et  $V \rightarrow \infty$  ( $N/V = \text{cste}$ ). ce qui signifie simplement que les particules dans l'état fondamental  $\epsilon = 0$ , n'ayant pas d'énergie cinétique, ne contribuent pas à la pression, ce qui était évident,

$$p = \frac{k_B T}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \quad (II.38)$$

En dessous de la température critique ( $T < T_c$ ). On peut poser  $z = 1$ . Dans cette région, la pression :

$$p = \frac{kT}{\lambda^3} \zeta(5/2) \quad (II.39)$$

Deviend indépendante du volume et du nombre de particules et est seulement fonction de la température. Ceci est évidemment aussi une conséquence du fait que les particules dans l'état fondamental ne contribuent pas à la pression. Si l'on ajoute, par exemple, des particules au système à une température  $T < T_c$ , celles-ci se placeraient nécessairement dans l'état  $\varepsilon = 0$  et ne contribueraient donc pas à la pression. Des considérations semblables sont valables pour des diminutions de volume. La seule conséquence en serait que plus de particules se condensent dans l'état  $\varepsilon = 0$ , moins il n'en résulterait pas d'augmentation de pression. De la même façon que l'équation (II.27) définit une température critique  $T_c$  à densité donnée, cette équation fournit une densité critique à température donnée (ou si le nombre de particules est donné aussi, un volume critique), au dessus de laquelle la condensation de Bose se produit :

$$\left(\frac{N}{V}\right)_c = \frac{\zeta(3/2)}{\lambda^3} \text{ Ou } V_c = \frac{N\lambda^3}{\zeta(3/2)} \quad (II.40)$$

On peut déduire des équations (II.39) et (II.40) que les isothermes du gaz de Bose sont des droites horizontales dans le diagramme  $pV$  pour des volumes

$V < V_c$ , comme pour un gaz de Van der Waal dans la région de coexistence du gaz et du liquide. On interprète donc la condensation de Bose comme une espèce de transition de phase dans un tel système. Une phase est constituée par les particules à l'état excité, tandis que l'autre phase est constituée des particules dans l'état  $\varepsilon = 0$ . La condensation de Bose n'est cependant pas une condensation dans l'espace des coordonnées comme la transition de phase gaz-liquide mais une condensation dans l'espace des quantités de mouvement dans lequel les particules se rassemblent dans un état de quantité de mouvement donnée. Si l'on élimine la température des équations (II.39) et (II.40), on obtient la courbe limite en coordonnées  $pV$  pour laquelle la condensation de Bose apparait :

$$pV_c^{5/3} = \text{const.} = \frac{h^2}{2\pi m} \frac{\zeta(5/2)}{(\zeta(3/2))^{5/3}} N^{5/3} \quad (II.41)$$

Dans les régions  $T > T_c$  ou  $V > V_c$ , respectivement, on obtient à l'aide de l'équation (II.29), pour  $x \ll 1$ , le cas limite classique du gaz parfait. On peut alors approcher la fonction  $g_{5/2}(z)$  dans l'équation (II.38) par les premiers termes du développement en série (II.16) :

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

$$p = \frac{k_B T}{\lambda^3} \left( z + \frac{z^2}{2^{5/2}} + \dots \right) \quad (II.42)$$

Si on se limite ici, comme dans l'équation (III.29), au premier terme, on en déduit la loi du gaz parfait ( $x \approx z \ll 1$ ) :

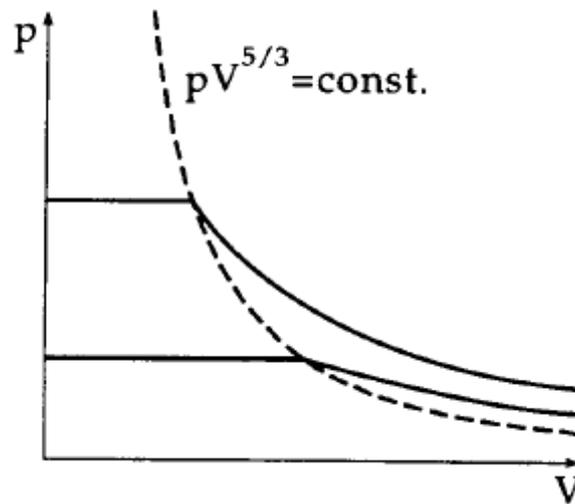
$$p = \frac{k_B T}{\lambda^3} z = \frac{kT}{\lambda^3} x = \frac{Nk_B T}{V} \quad (II.43)$$

Si l'on tient également compte de termes d'ordres supérieurs, on peut successivement éliminer la fugacité  $z$  des équations (II.29) et (II.42). Cela conduit à un développement systématique de la pression en fonction du paramètre  $x$  :

$$\frac{pV}{Nk_B T} = \sum_{l=1}^{\infty} a_l x^{l-1} \quad x = \frac{N\lambda^3}{V} \quad (II.44)$$

Où les premiers coefficients du développement du viriel du gaz de Bose s'écrivent :

$$\begin{cases} a_1 = 1. \\ a_2 = -\frac{1}{4\sqrt{2}}. \\ a_3 = -\left(\frac{2}{9\sqrt{3}} - \frac{1}{8}\right). \end{cases} \quad (II.45)$$



**La figure II.5.** Isothermes du gaz parfait de Bose

Dans la figure II.5. On représente les isothermes du gaz de Bose calculées à partir des équations (II.42) ou (II.39). La courbe en pointillé, Équation (II.41), représente l'apparition de la transition de phase.

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

Pour terminer, étudions l'énergie interne  $U$  et la capacité thermique du gaz de Bose :

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \text{Log } Z|_{z,V} = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \quad (II.46)$$

La comparaison avec l'équation (II.38) fournit :

$$p = \frac{2}{3} \frac{U}{V} \quad (II.47)$$

Indépendamment du fait que le système se trouve dans une région monophasée ou diphasée. Cette relation nous est déjà familière depuis le gaz parfait. Avec la pression nous connaissons donc aussi la densité d'énergie du système. Pour calculer la capacité thermique à volume constant  $C_V$ , nous procédons comme suit :

$$U = \frac{3}{2} pV = \frac{3}{2} k_B T \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \quad (II.48)$$

Pour  $T < T_c$  nous avons  $z = 1$ , indépendamment de la température, alors :

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{Nk_B} \frac{\partial U}{\partial T} |_{N,V} \\ &= \frac{3}{2} \frac{V}{N} \zeta(5/2) \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{T}{\lambda^3} \right) \\ &= \frac{15}{4} \zeta(5/2) \frac{V}{N\lambda^3} \propto T^{3/2} \end{aligned} \quad (II.49)$$

Pour  $T > T_c$ ,  $z$  n'est plus indépendant de  $T$ . Cependant, depuis maintenant

$N_0 \approx 0$ , nous pouvons éliminer le terme  $V\lambda^{-3}$  dans (II.48) en utilisant la relation(III.24) :

$$U = \frac{3}{2} Nk_B T \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \quad (II.50)$$

On retrouve immédiatement la limite classique pour  $z \ll 1$ . Pour la capacité thermique, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{Nk_B} \frac{\partial U}{\partial T} |_{N,V} \\ &= \frac{3}{2} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} + \frac{3}{2} T \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right) |_{N,V} \end{aligned} \quad (II.51)$$

Dans l'équation (II.51), il faut dériver les  $g_n(z)$  par rapport à leurs arguments (dérivation composée). En utilisant le développement en série (II.16), on trouve immédiatement la relation de récurrence suivante :

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

$$g'_n(z) = \frac{1}{z} g_{n-1}(z) \quad (II.52)$$

On en déduit:

$$\frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right) = \frac{\partial z}{\partial T} \frac{1}{z} \left( 1 - \frac{g_{5/2}(z) g_{1/2}(z)}{(g_{3/2}(z))^2} \right) \quad (II.53)$$

L'expression  $\partial z / \partial T$  peut être déterminée à partir de l'équation (II.24) comme suit :

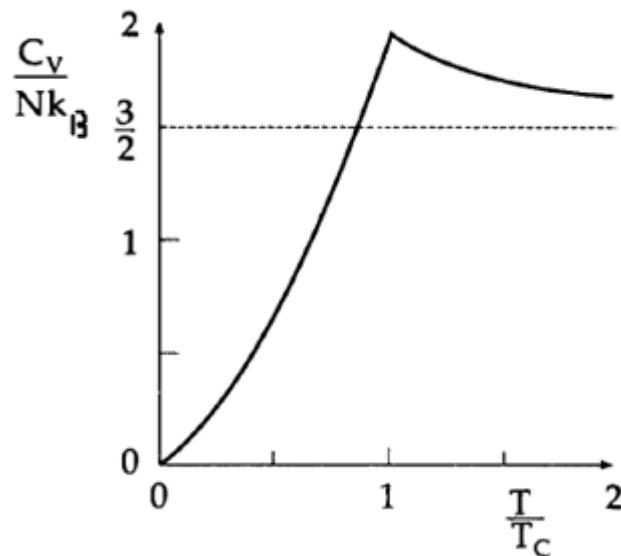
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} g_{3/2}(z) &= \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{N \lambda^3}{V} \right) \\ \frac{\partial z}{\partial T} \frac{1}{z} g_{1/2}(z) &= -\frac{3}{2T} \left( \frac{N \lambda^3}{V} \right) = -\frac{3}{2T} g_{3/2}(z) \\ \frac{\partial z}{\partial T} &= -\frac{3z}{2T} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \end{aligned} \quad (II.54)$$

Si l'on reporte ce résultat avec l'équation (II.53), dans l'équation (II.51). On obtient :

$$\frac{C_V}{Nk_B} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} T > T_C \quad (II.55)$$

Il est facile de retrouver la limite classique ( $z \rightarrow 0$ ) ; on a  $C_V = \left( \frac{15}{4} - \frac{9}{4} \right) Nk_B$  (le gaz parfait). Pour  $z \rightarrow 1$  ( $T \rightarrow T_C$ ),  $g_{1/2}$  tend vers l'infini et le second terme dans l'équation (II.55) s'annule, l'équation (II.55) est alors identique à l'équation (II.49), avec  $g_{3/2}(z) = x = N \lambda^3 / V$ . la capacité thermique vaut alors :

$$C_V(T_C) = \frac{15}{4} \frac{\zeta(5/2)}{\zeta(3/2)} Nk_B = 1.925 Nk_B > C_V^{parfait} \quad (II.56)$$



**Figure II.6.** Capacité thermique du gaz de Bose

Pour la température critique  $T_c$ , avec les équations (II.55) et (II.49) on obtient donc l'allure suivante pour la capacité thermique, qui est représentée sur la figure II.6 : dans la région de la condensation de Bose,  $T/T_c < 1$  la capacité thermique augmente comme  $T^{3/2}$  jusqu'à une valeur maximale, équation (I.56). pour  $T = T_c$  il y a un pic et pour  $T \rightarrow \infty$ ,  $C_V$  tend vers la limite du gaz parfait.

L'apparition d'un pic dans la capacité thermique est typique pour une transition de phase du second ordre (pas de chaleur latente). Un point anguleux apparaît dans la dérivée première de l'énergie interne  $U$  et une discontinuité apparaît dans la dérivée seconde  $\partial^2 U / \partial T^2 = \partial C_V / \partial T$ .

### II.3-Condensation de Bose-Einstein :

#### II.3.1-population du niveau fondamental.

Le problème qui se pose pour des températures inférieures ou égales à la température de Bose s'illustre facilement grâce à l'expression du nombre d'occupation des états  $\bar{N}_\alpha^B$ . Supposons en effet que le système se trouve à la température de Bose, avec  $\mu = 0$ . Pour le niveau fondamental, pour lequel

$\varepsilon_\alpha = 0$ , le nombre d'occupation donnée par cette expression est infini ! Ce n'est bien sûr pas possible, puisque le nombre total de particules du système est fini.

On conçoit donc qu'il faut traiter le problème différemment, en tenant compte de la grande discontinuité qui se présente alors entre le niveau fondamental et les autres niveaux du système. Nous allons donc traiter autrement la population du niveau fondamental et celle des autres niveaux d'énergie. Reprenons

l'expression  $\bar{N}_\alpha^B$  (relation (I-55) du chapitre I) en supposant que, pour le niveau fondamental  $\varepsilon_\alpha = 0$ :

$$\bar{N}_0^B = N_0 \quad (II.57)$$

Où  $N_0$  est un nombre de particules d'ordre macroscopique, soit :

$$e^{-\beta\mu} = 1 + \frac{1}{N_0} \quad (II.58)$$

D'où on déduit:

$$\beta\mu = -\frac{1}{N_0}, \text{ soit } \mu = -\frac{k_B T}{N_0} \quad (II.59)$$

La valeur absolue de  $\mu$  est alors extrêmement petite puisqu'elle est  $N_0$  fois plus faible que l'énergie cinétique des particules ! Pour tous les problèmes autres que la population du niveau fondamental, on pourra considérer  $\mu \approx 0$

### III.3.2-Répartition des particules :

Si  $N_0$  particules se trouvent sur le niveau d'énergie  $\varepsilon_0 = 0$ , il reste  $(N - N_0)$  particules distribuées sur les autres niveaux. Aucune autre discontinuité ne se produisant, la répartition de ces  $(N - N_0)$  particules peut être étudiée de la même manière qu'au paragraphe de la limite thermodynamique de Bose-Einstein. On a, par exemple d'après l'équation (I.62)

$$N - N_0 = AV \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}{e^{\beta\mu} - 1} \quad (II.60)$$

Qui ressemble à l'équation (II.72), mais pour une température  $T$  quelconque alors que l'équation (I.72) était obtenue pour  $T = T_B$ . D'après l'équation (I.73), on en déduit :

$$\frac{N}{T_B^{3/2}} = \frac{N - N_0}{T^{3/2}} \quad (II.61)$$

On en déduit :

$$N_0 = N \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_B} \right)^{3/2} \right] \quad (II.62)$$

On peut donc résumer la situation du gaz de Bose de la manière suivante, si le nombre de particules du système est constant et si on baisse la température en partant d'une valeur supérieure à  $T_B$  :

- 1) Pour  $T > T_B$  les particules sont distribuées en fonction de l'énergie des états microscopiques selon l'équation (I.63), et le potentiel chimique du système est négatif.
- 2) Quand  $T$  devient égale à  $T_B$  le potentiel chimique devient quasiment nul [sans l'être cependant tout à fait], et le niveau fondamental commence à se comporter d'une manière particulière.
- 3) Quand  $T < T_B$  le nombre de particules sur le niveau fondamental  $N_0$  devient d'un ordre de grandeur macroscopique, alors que sur les autres

niveaux les particules sont toujours réparties selon une loi semblable à l'expression (I.63).  $N_0$  Croît d'une valeur quasiment nulle pour  $T = T_B$  à une valeur égale à  $N$  nombre total de particules total du système dans la limite où  $T = 0$ .

Le passage par la température de Bose change qualitativement l'état du système. On dit qu'il s'agit d'une transition de phase.

### II.3.3-fonctions thermodynamiques d'un gaz de Bose dégénéré.

Les fonctions thermodynamiques d'un gaz de Bose pour  $T < T_B$  se calculent de la même manière que le nombre de particules: on sépare la contribution des  $N_0$  particules de la condensation de Bose, et on calcule la contribution des particules restantes en utilisant selon l'habitude des intégrales continues, et en tenant compte de ce que le potentiel chimique est quasiment nul, en ce qui concerne l'énergie nulle, il reste :

$$E = AV \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta\varepsilon}-1} d\varepsilon \quad (II.63)$$

Qui peut s'écrire :

$$E = \frac{AV}{\beta^{5/2}} I\left(\frac{3}{2}\right) \quad (II.64)$$

Où  $I(n)$  est une fonction tabulée :

$$I\left(\frac{3}{2}\right) = \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2}}{e^x-1} dx \approx 1,341 \times \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \quad (II.65)$$

Soit en utilisant l'expression (II-75) de la température de Bose:

$$E = 0.77Nk_B T \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2} \quad (II.66)$$

Cette expression est en fait de l'ordre de grandeur de  $(N - N_0)k_B T$  ce qui représente bien la situation selon lequel  $N_0$  particules, ne participent plus à l'énergie du système. Le grand potentiel s'obtient à partir de l'expression (I.59) et en suivant la démarche utilisée de la relation (I.65) à la relation (I.67) :

$$J = -k_B T \text{Log}(1 + N_0) - \frac{2}{3} \int_0^{\infty} \frac{AV\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta\varepsilon}-1} d\varepsilon \quad (II.67)$$

Où :

$$J = -k_B T \text{Log}(1 + N_0) - \frac{2}{3} E \quad (II.68)$$

Le premier terme étant de l'ordre de  $k_B T$  et le second de l'ordre de  $Nk_B T$ , on peut négliger totalement le premier terme et il reste :

$$J = -\frac{2}{3} E \quad (II.69)$$

L'entropie s'en déduit par :

$$S = -\left(\frac{\partial J}{\partial T}\right)_{\mu,V} = \frac{2}{3} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{\mu,V} \quad (III.70)$$

Dans le cas présent,  $\mu = 0$  et  $N$  est constant. Il est donc plus judicieux d'écrire l'entropie par rapport à l'énergie libre :

$$F = J + \mu N = J \quad (II.71)$$

## Chapitre II Gaz parfait de Bose et Condensation de Bose-Einstein

---

Sous la forme :

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{2}{3} \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (II.72)$$

$E$  Varie comme  $T^{5/2}$ , on en déduit :

$$\left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{N,V} = \frac{5}{2} \frac{E}{T} \quad (II.73)$$

Et l'entropie :

$$S = \frac{5}{3} \frac{E}{T} \quad (II.74)$$

La pression est de même donnée par :

$$p = \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_{N,T} = \frac{2}{3} \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_{N,T} \quad (II.75)$$

Mais, d'après l'équation (II.64) :

$$\left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_{N,T} = \frac{E}{V} \quad (II.76)$$

D'où :

$$p = \frac{2}{3} \frac{E}{V} \quad (II.77)$$

Ce qui représente l'équation d'état du gaz de Bose dégénéré, identique à celle du gaz de Fermi. La pression du gaz de Bose est cependant très différente de celle du gaz de Fermi. En effet, dans le cas du gaz de Fermi équation ( $p_0 = \frac{2}{5} n \mu_0$ ), la pression ne dépend pas de la température, mais seulement de la densité des particules. Au contraire, dans le cas du gaz de Bose (II-77), la pression est indépendante de la densité, et même de  $N$  et  $V$  pris séparément.

Elle ne dépend alors que de la température, ce qui conduit à un comportement tout à fait particulier **Fig.II.7**.

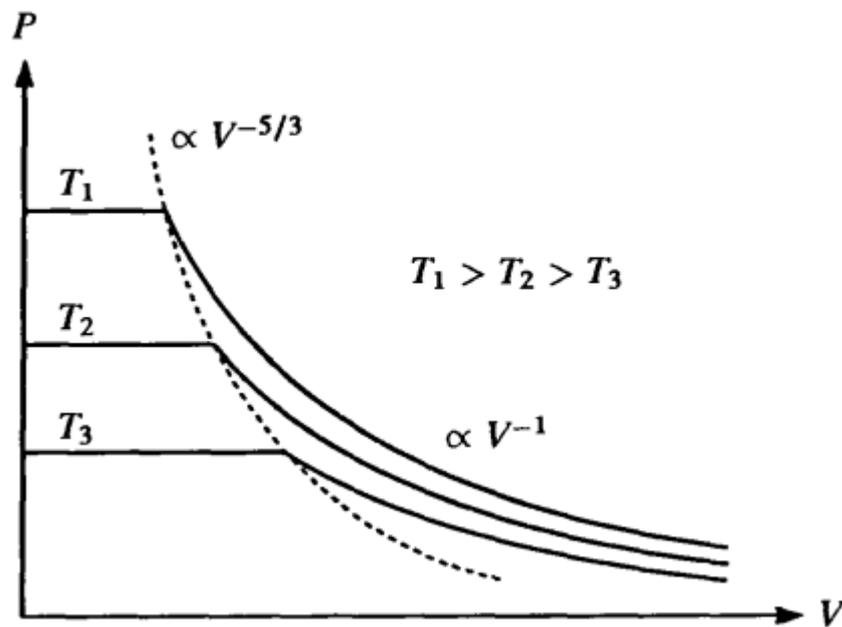


Figure II.7.Équation d'état voisinage de la transition de Bose

#### II-4.Conclusion :

La condensation de Bose-Einstein est un phénomène purement quantique, où une quantité macroscopique de particules se retrouve dans le même état quantique. Ce phénomène est l'un des points de départ pour comprendre la superfluidité et la supraconductivité, avec tous les phénomènes spectaculaires qui leur sont associés.

L'étude de la condensation de Bose-Einstein dans les gaz est ainsi devenue l'un des domaines de recherche les plus actifs en physique. Pour donner une idée du niveau de cette activité, mentionnons simplement qu'elle se traduit par la publication de plusieurs articles par an. Les raisons d'un tel intérêt pour les gaz de bosons condensés sont simples à comprendre. L'effet des interactions entre atomes qui joue, comme nous l'avons vu plus haut, un rôle si important dans des effets quantiques macroscopiques comme la superfluidité, est beaucoup plus simple à décrire et à interpréter pour des systèmes gazeux que pour des phases liquides ou solides.

# Chapitre III

# Condensation de Bose EN Phase

# Solide

### III-1.introduction.

Toutes les particules élémentaires découvertes à ce jour peuvent se répartir dans deux catégories, suivant la valeur de leur spin. D'une part, nous avons des bosons du spin entier, qui obéissent à la statistique de Bose, dont l'une des spécificités est de permettre l'occupation d'un même état quantique par plusieurs bosons. Par opposition, les fermions ont des spins demi-entiers, et obéissent au principe d'exclusion de Pauli, qui empêche deux fermions d'occuper le même état quantique. La condensation de Bose-Einstein, formulée par Einstein en 1925 à la suite des travaux de Bose, prédit une occupation massive de l'état fondamental d'un système de bosons sous certaines conditions de température et de densité de particules.

En 1924, Einstein, s'inspirant des travaux du jeune physicien bengali Satyendra Nath Bose, démontra un résultat remarquable à propos d'un gaz parfait de particules identiques de densité spatiale  $n$  et de température  $T$ . Pourvu que les particules soient des bosons (particules de spin entier), une condensation des particules doit se produire dans l'état fondamental de la boîte contenant le fluide si la densité dans l'espace des phases  $n\lambda^3$  du fluide dépasse la valeur critique :

$$n\lambda^3 = \zeta(3/2) \approx 2,612 \quad \text{avec} \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}} \quad (III.1)$$

Le paramètre  $\lambda$  représente la longueur d'onde thermique des particules de masse  $m$ ,  $k_B$  et  $h$  étant les constantes de Boltzmann et de Planck. Cette longueur d'onde donne une estimation de la taille moyenne du paquet d'ondes associé à chaque particule. Le critère d'Einstein (IV.1) indique donc que la condensation se produit lorsque les paquets d'ondes commencent se recouvrir entre eux (C. Cohen-Tannoudji).

“ C'est une belle théorie, mais correspond-elle à la réalité ? ” C'est par ces mots qu'Einstein décrivit ses travaux dans une lettre à son ami Ehrenfest, avant de se détourner de ce champ de recherche. La prédiction d'Einstein est restée controversée et mystérieuse jusqu'en 1938, date de la découverte de la superfluidité de l'hélium liquide par Kapitza, Allen et Misener. London remarqua alors que la température de la transition superfluide,  $T_s = 2.2 K$ , est remarquablement proche de la température de la condensation de Bose-Einstein d'un gaz parfait de même densité que l'hélium liquide,  $T_c = 3.2K$ , et il émit l'idée que les deux phénomènes étaient reliés.

L'idée de London est le point de départ de toutes les théories modernes sur l'hélium liquide. Cependant, la connexion entre condensation de Bose-Einstein et superfluidité n'est pas évidente. La superfluidité est reliée aux interactions entre particules alors qu'Einstein considérait un gaz parfait. Plus quantitativement, les expériences de diffusion de neutrons aboutissent (moyennant une interprétation fine des données) à une fraction condensée ne dépassant pas 10% à basse pression. Pour comparaison, on prédit que toutes les particules sont condensées pour un gaz parfait de température nulle. Le

développement des techniques de piégeage et de refroidissement d'atomes par des faisceaux lumineux ou des champs magnétiques statiques a permis de faire sauter les verrous qui avaient auparavant bloqué cette recherche.

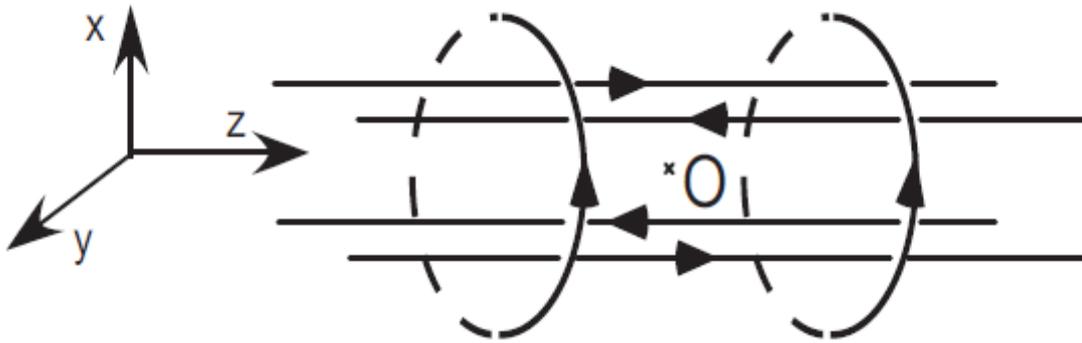
### III.2- La préparation et la caractérisation d'un condensat.

#### III.2.1-le piégeage des atomes

L'idée essentielle de toutes ces nouvelles expériences consiste à se rapprocher de l'hypothèse de base d'Einstein, c'est-à-dire travaillé avec un gaz très dilué et pas liquide, comme c'est le cas pour l'hélium. Le prix à payer se lit immédiatement sur la relation (III.1) : quand on diminue la densité spatiale du système en jeu, la température de transition baisse également. Ces nouveaux condensats atomiques se forment pour une densité voisine de  $10^{19} \text{ atomes}/m^3$  (au lieu de  $10^{27} \text{ atomes}/m^3$  pour l'hélium liquide) et la température de condensation est dans le domaine du microkelvin, ou en deçà.

Cette contrainte en température vient imposer un point commun à toutes ces expériences : le confinement du gaz atomique ne peut pas se faire par des parois matérielles, car la totalité des atomes se collerait immédiatement aux parois pour ne plus en bouger. Le gaz est en général piégé grâce à un champ magnétique inhomogène, qui le maintient en lévitation au centre d'une enceinte où règne un vide très poussé ( $10^{-9} Pa$ ). Chaque atome porte un moment magnétique  $\mu$ , qui se couple au champ magnétique local pour donner naissance à l'énergie d'interaction  $E = -\mu \cdot B$ . Cette énergie joue le rôle d'une énergie potentielle pour le mouvement du centre de masse de l'atome, et la force magnétique qui en résulte permet de confiner l'atome.

Considérons par exemple un atome au voisinage d'un point  $O$  où l'amplitude  $B(r)$  du champ magnétique est minimale (**figure. III.1**). Si le moment magnétique de l'atome a une direction opposée à celle du champ magnétique local, l'énergie magnétique s'écrit  $E(r) = -\mu \cdot B(r) = |\mu||B(r)|$ . Cette énergie potentielle est elle-même minimale en  $O$ , et l'atome va effectuer des oscillations stables autour de ce point. Dans les conditions usuelles de fonctionnement des pièges magnétiques, ces oscillations se font à une fréquence de l'ordre de la centaine de hertz, et l'approximation qui consiste à supposer que  $\mu$  et  $B$  restent en permanence antiparallèles est très bien vérifiée. Comment accumuler des atomes dans un tel piège magnétique ? Pratiquement toutes ces expériences démarrent avec une phase de refroidissement lumineux. En tirant une partie des échanges d'impulsion entre atomes et photons, il est possible d'abaisser la température d'un gaz depuis la température ambiante jusqu'à des températures inférieures au millikelvin. Ceci est fait dans un piège magnéto-optique ou une mélasse optique. Ces atomes refroidis par laser ne forment pas encore un condensat car



**Figure III.1.** Un exemple de piège magnétique couramment utilisé (piège d'Ioffe Pritchard).

leur densité spatiale est trop basse. En effet, les collisions inélastiques assistées par la lumière limitent la densité à  $n \sim 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ , et la densité dans l'espace des phases ne vaut que  $n\lambda^3 \sim 10^{-6}$ , alors qu'elle devrait dépasser 1 pour entrer dans le régime de dégénérescence quantique.

### III.3-Le refroidissement par évaporation.

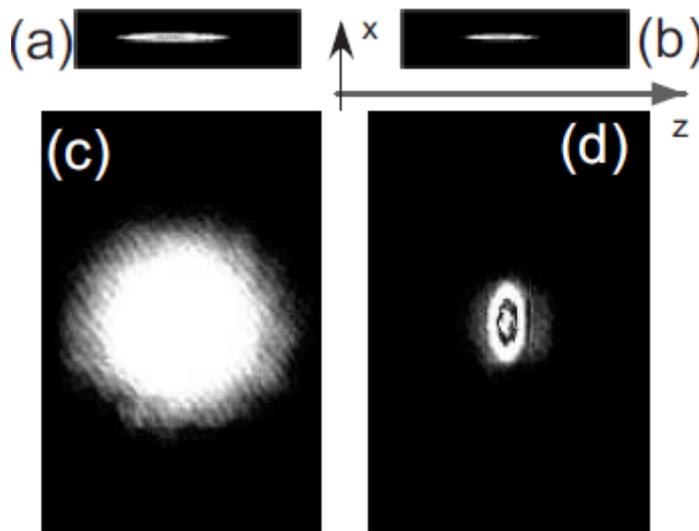
Le transfert des atomes depuis la mélasse optique vers un piège magnétique se fait généralement en maintenant à peu près constante la densité dans l'espace des phases. Le refroidissement supplémentaire pour atteindre la condensation est obtenu grâce à l'évaporation. Il s'agit d'une technique très ancienne. Arracher une molécule du liquide coûte de l'énergie, qui est prélevée sur le liquide restant. On procède de la même façon pour les atomes piégés, en tronquant la profondeur du potentiel confinant les atomes à une hauteur légèrement supérieure à l'énergie cinétique moyenne des atomes piégés. Ainsi les atomes les plus rapides s'échappent du piège, et les atomes restants se rethermalisent à une température inférieure à la température initiale. On peut montrer que la densité au centre du piège est augmentée lors de cette évaporation. Par conséquent, en le poursuivant assez longtemps, on doit réussir à atteindre le seuil de condensation.

Puisque le paramètre  $n\lambda^3$  ne vaut que  $10^{-6}$  à l'issue du piège, on doit gagner plusieurs ordres de grandeur sur la température et sur la densité spatiale du gaz. Cette évaporation se pratique en maintenant constant le taux de collision élastique entre atomes. Ainsi le processus de rethermalisation des particules restant dans le piège se produit de manière efficace. Le taux de collision est proportionnel à la densité spatiale et à la vitesse thermique des atomes, soit  $n/\lambda$ . Il faut alors augmenter  $n$  et  $\lambda$  d'un facteur 30 pour gagner les six ordres de grandeur nécessaires sur le rapport  $n\lambda^3$ . Dans un piège harmonique, ceci est

obtenu en divisant par 1000 le nombre d'atomes lors de l'évaporation. On part d'environ un milliard d'atomes dans le piège magnétique, pour finir avec un million seulement. C'est à ce prix qu'un condensat de Bose-Einstein peut se former au centre du piège.

### III.4- L'observation des condensats

L'observation de ces condensats gazeux se fait en les éclairant par une brève impulsion lumineuse, dont on mesure ensuite l'absorption ou le déphasage par l'assemblée atomique. On a ainsi accès à la distribution spatiale des atomes dans le potentiel magnétique. On peut également couper le piège magnétique et laisser l'assemblée atomique s'étaler pendant une durée de quelques dizaines



**Figure.III. 2** atomes de rubidium refroidis par évaporation dans un piège magnétique de fréquences  $\nu_x = \nu_y = 150 \text{ Hz}$ ,  $\nu_z = 11 \text{ Hz}$ . (a, b) : images in situ des atomes dans le piège magnétique, correspondant à  $T = 2T_c$  et  $T = 0.8T_c$ . (c, d) Images obtenues après 30 ms d'expansion balistique(c et d).

de millisecondes, avant d'envoyer l'éclair lumineux. De l'étendue du nuage atomique après cette expansion balistique, on déduit la distribution en vitesse après coupure du piège.

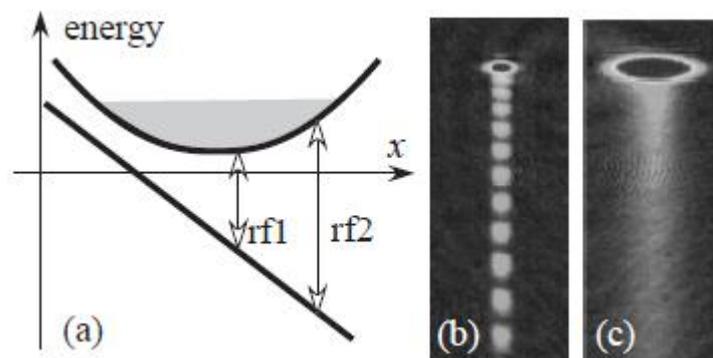
La figure 2 illustre ce principe. Les figures 2a et 2b sont des photos in situ, qui montrent la répartition des atomes au sein du piège magnétique. La distribution des atomes a une forme de cigare, qui résulte de la forte anisotropie du piège. La présence éventuelle d'un condensat est révélée de manière non ambiguë par les clichés donnant les distributions en vitesse (2c,2d). Pour la photo 2c, prise pour une température supérieure à la température critique, on obtient une distribution en vitesse quasi-isotrope, comme attendu à partir de l'équipartition de l'énergie

pour un gaz bien décrit par la physique statistique classique. Au contraire le cliché 2d, pris pour une température inférieure à la température critique, montre une distribution en vitesse fortement anisotrope, la direction la plus fortement confinée dans le piège magnétique étant celle ayant la plus grande dispersion en vitesse. Cette anisotropie résulte de la conversion de l'énergie d'interaction entre atomes du condensat en énergie cinétique transverse, lors de la coupure du potentiel de confinement.

Ce type d'images permet d'obtenir des informations quantitatives les condensats, comme le nombre d'atomes et la température résiduelle associée à la fraction d'atomes non condensés. Il a été ainsi vérifié avec une très bonne précision (quelques %) que la température de la transition était effectivement obtenue. On a également pu produire des condensats pratiquement purs, dans lesquels la fraction non condensée ne dépasse pas 15% du nombre total d'atomes (en dessous de cette valeur, elle devient très difficile à mesurer).

### III.5-La cohérence des condensats

Pour prouver que l'état du gaz après refroidissement correspond effectivement à un condensat, il faut vérifier la cohérence quantique de cette assemblée d'atomes. Lorsqu'on veut étudier la cohérence transverse d'un faisceau lumineux, la procédure standard consiste à l'envoyer sur un écran percé de deux trous et à mesurer le contraste des interférences entre les ondes diffractées par ces trous. Ce schéma a été transposé aux condensats de Bose-Einstein par un groupe de recherches de Munich.



**Figure. III.3 (a)** extraction de deux jets atomiques (“lasers à atomes”) d’un nuage d’atomes de rubidium. Deux ondes radiofréquences,  $rf1$  et  $rf2$ , font basculer le moment magnétique d’atomes piégés. Les atomes tombent ensuite dans le champ de pesanteur terrestre (dirigé selon  $x$ ).

**(b)** le nuage d’atomes est un condensat quasi-pur et un fort contraste d’interférence est observé, ce qui révèle la cohérence de phase de l’ensemble de l’échantillon.

**(c)** pour un nuage au dessus de la température critique, aucune cohérence de phase n’est mesurée si la distance entre les points d’extraction dépasse  $200\text{ nm}$

L'équivalent du trou est une onde radiofréquence qui extrait les atomes en un point donné du piège magnétique. Quand une seule onde est appliquée, on obtient un jet d'atomes issu du condensat, qui tombe dans le champ de pesanteur terrestre. En appliquant deux ondes radiofréquences, on réalise la situation désirée, avec deux jets issus de deux points différents du condensat.

Les résultats de cette expérience confirment parfaitement l'idée que les atomes sont accumulés dans le même état quantique, et qu'on dispose donc d'un ensemble cohérent de particules. Quand la température  $T$  est très au dessous de la température critique, on observe une interférence avec un grand contraste dans la région où les deux radiofréquences, correspondant à une distance entre les deux points sources de l'ordre de la taille du condensat. Au contraire, quand  $T > T_c$ , aucune interférence détectable n'est visible dans la zone où les deux faisceau se recouvrent (fig. 3c), à moins que la distance entre les deux points sources soit inférieure à  $200 \text{ nm}$ , c'est-à-dire la longueur de cohérence du gaz dans ces conditions expérimentales.

### III.6-Les atomes condensables et les dispositifs expérimentaux

Il est important de noter que les nuages atomiques préparés avec les techniques décrites plus haut sont des gaz métastables. L'équilibre thermodynamique d'atomes de sodium ou de rubidium à une température de l'ordre du microkelvin correspond à une phase solide, avec une pression de vapeur complètement négligeable. Dans les expériences que nous décrivons ici, nous pouvons produire une phase gazeuse grâce au refroidissement laser et au refroidissement par évaporation, sans jamais mettre les atomes avec un thermostat matériel. Le fait que le gaz est métastable (et pas stable au sens strict du terme) se manifeste par l'existence de pertes : dans une collision entre trois corps, deux atomes peuvent former une molécule et le troisième atome emporte l'énergie ainsi produite. En raison de ces pertes, la durée de vie des condensats gazeux est limitée à quelques dizaines de secondes. Jusqu'à maintenant la majorité des études ont porté sur les atomes alcalins. Ces atomes sont relativement facilement manipulables par laser, car leur raie de résonance est située dans le domaine de la lumière du proche infrarouge pour lesquels les sources laser fiables et peu onéreuses existent.

### III.7-Description théorique du condensat.

#### III.7.1-Contrôle des interactions entre atomes.

Dans les condensats gazeux, on peut rendre compte des interactions entre atomes en utilisant simplement une théorie de champ moyen. L'état du condensat est alors obtenu en cherchant l'état fondamental de l'équation de Gross-Pitaevskii :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V(r)\psi + Ng|\psi|^2\psi = \mu\psi \quad (III-2)$$

Où  $V$  est le potentiel confinant les  $N$  atomes et  $g$  le coefficient décrivant l'importance du champ moyen. Ce terme de champ moyen peut être répulsif ou attractif, selon l'espèce atomique considérée, et ce point joue un rôle essentiel pour le comportement du condensat. Il est habituellement caractérisé par la longueur de diffusion  $a$  ( $g = 4\pi\hbar^2 a/m$ ). Un champ moyen répulsif (resp. attractif) correspond à une longueur de diffusion positive (resp. négative). Pour le sodium ou le rubidium 87 par exemple, la longueur de diffusion est positive à bas champ magnétique. On peut alors mettre un nombre arbitrairement élevé d'atomes dans le condensat, sa taille d'équilibre augmentant avec sa population. Au contraire, une longueur de diffusion négative, comme c'est le cas pour le lithium 7 à bas champ magnétique, limite le nombre d'atomes condensables. Quand le nombre d'atomes dans le condensat dépasse une valeur critique  $N_c$ , le condensat s'effondre sur lui-même. Pour un piège harmonique isotrope de pulsation  $\omega$ , on trouve :

$$N_c \sim \frac{a_0}{|a|} \quad \text{avec} \quad a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (III-3)$$

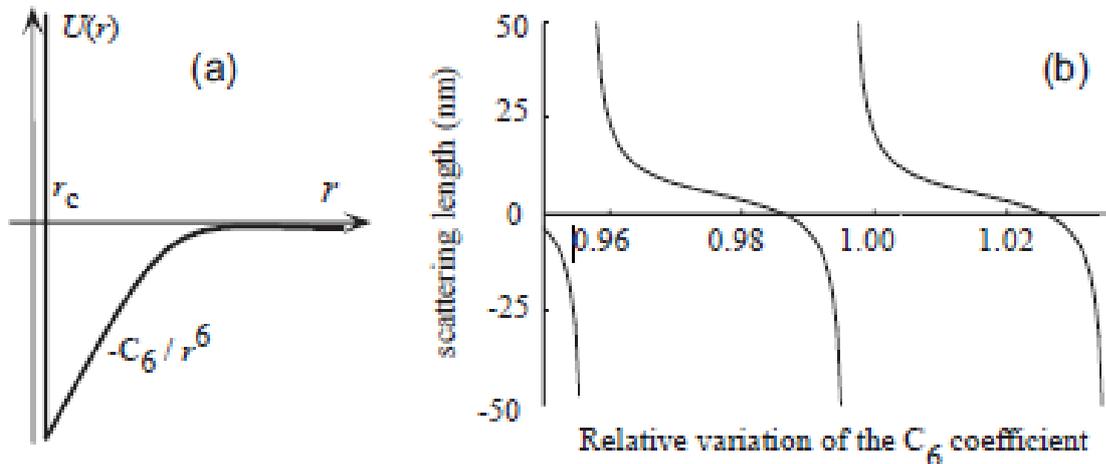
Ce nombre est de l'ordre de 1000 pour un piège standard dans le cas du lithium 7 ( $a_0 \sim 10^{-6}m$ ,  $|a| \sim 10^{-9}m$ ).

Le signe de la longueur de diffusion dépend fortement des paramètres du problème. Ainsi, il varie très vite avec le coefficient  $C_6$  décrivant l'interaction de Van der Waals à longue portée entre atomes (voir la figure **III-4**). Quand on augmente continuellement  $C_6$ , on introduit de nouveaux états liés dans le problème à deux corps. A chaque fois qu'un nouvel état lié est sur le point d'apparaître, la longueur de diffusion tend vers  $-\infty$  (théorème de Levinson). Quand  $C_6$  est ajusté juste au dessus de la valeur critique pour l'apparition d'un nouvel état lié,  $a$  est grande et positive. Elle évolue alors doucement avec  $C_6$  jusqu'à ce qu'un nouvel état lié soit sur le point d'apparaître.

Cette sensibilité de la longueur de diffusion aux paramètres atomiques permet de préparer un condensat avec un certain terme de champ moyen, répulsif par exemple si on souhaite assurer sa stabilité. On peut ensuite changer brusquement le signe du champ moyen, en changeant par exemple le champ magnétique à l'emplacement du condensat, et le champ moyen du condensat devient attractif. Le devenir d'un tel condensat dépend fortement de la géométrie de l'expérience. Si le condensat peut se comprimer sur lui-même dans les trois directions de

l'espace, on assiste à une implosion du condensat, et formation de produits secondaires (molécules, agrégats), phénomène baptisé "Bose Nova".

Dans une géométrie quasi unidimensionnelle, l'équation de Gross-Pitaevskii avec un champ moyen attractif possède des solutions stables sous forme de soliton.



**Fig. III.4** – (a) Le potentiel de Van der Waals en  $C_6/r^6$  entre deux atomes neutres ; le potentiel est tronqué en  $r_c$  pour prendre en compte la répulsion entre les nuages électroniques. (b) Variations de la longueur de diffusion  $a$  (en nanomètres) pour un petit changement du coefficient  $C_6$  (les données correspondent au cas du césium).

### III-7-2-Equation de Gross-Pitaevskii

L'équation de Gross-Pitaevskii est généralement obtenue dans le cadre du deuxième formalisme de quantification. La dérivation de l'équation de Gross-Pitaevskii est en relation avec des concepts de la physique statistique, mettant en évidence un certain nombre d'applications dont la dynamique d'un condensat de Bose-Einstein.

Comme nous l'avons discuté ci-dessus, un condensat de Bose-Einstein est obtenu à partir d'une collection de bosons dans l'état fondamental à très basse température. En effet, avant d'atteindre cette limite, une accumulation spectaculaire de particules dans l'état fondamental peut être observée. Par conséquent, pour une température suffisamment basse, la majorité des particules sont dans le même état quantique et ont la même vitesse. De cette façon, la collection de bosons se comporte comme un fluide macroscopique avec de nouvelles propriétés, telles que la superfluidité.

L'état des particules à un certain niveau est décrit par une fonction normalisée, qui est un vecteur propre de le hamiltonien associé à la situation physique

## Chapitre III Condensation de Bose En Phase Solide

considérée, et dont la valeur propre correspond à l'énergie de ce niveau. Ainsi, nous devons trouver les vecteurs propres avec une valeur propre minimale pour le hamiltonien qui décrit notre système. Ce hamiltonien comprend toutes les interactions entre chaque paire des particules. En d'autres termes, s'il y a  $N$  particules dans le système, le hamiltonien aura des  $N^2$  termes.

Afin de simplifier le problème, nous utilisons l'approximation du champ moyen, ce qui signifie que l'action ressentie par une particule donnée est due au reste substitué par l'action moyenne du fluide sur la particule. Cette approximation est bonne si l'on peut négliger les corrélations dans le gaz, c'est-à-dire si le gaz est dilué, ce qui est le cas pour les condensats obtenus expérimentalement. De cette façon, il est utile de modifier un modèle complexe pour l'interaction entre les bosons par un modèle très simplifié qui est valable pour les gaz dilués. Nous devons maintenant trouver une valeur approchée pour la première valeur propre de ce nouvel hamiltonien en minimisant une fonction ; les fonctions pour lesquelles tous les bosons sont dans le même état.

Les interactions entre les bosons ne sont pas nécessaires pour que la condensation ait lieu, cependant, ils jouent un rôle très important dans les propriétés du condensat. En ce sens, l'utilisation de l'équation habituelle de Schrödinger n'est pas suffisante; à la place, nous avons besoin de l'utilisation de l'équation de Gross-Pitaevskii

Nous pouvons donc poser des questions sur l'énergie de l'état fondamental et l'utiliser pour nous fournir des informations sur le système que nous pouvons en effet faire pour tout autre gaz.

L'hamiltonien général qui décrit le système est donné par :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{p_i^2}{2m} + V_{ext}(r_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(|r_i - r_j|) \quad (III-4)$$

Où le premier terme sur le côté droit est l'énergie cinétique de la  $i$ ème particule, le terme suivant représente les effets externes introduits par le piégeage (potentiel  $V_{ext}$ ), et le terme final représente les interactions entre les  $N$  particules. L'état fondamental correspond à l'énergie minimale et nous pouvons donc le trouver en le minimisant. À cet égard, il est donc pratique d'utiliser le concept de potentiels thermodynamiques utiles pour déterminer l'état d'équilibre d'un système qui n'est pas isolé. En utilisant l'énergie libre, nous avons ce que nous avons besoin pour minimiser  $F = E - \mu N$ , où  $E$  est l'énergie et  $\mu$  est le potentiel chimique.

Étant donné un hamiltonien  $\hat{H}$  et une fonction d'onde  $\psi$ , nous pouvons obtenir l'énergie comme suit:

$$E(\psi) = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (III-5)$$

## Chapitre III Condensation de Bose En Phase Solide

---

Et en tant que tel, nous pouvons utiliser cette expression pour minimiser l'énergie libre  $F$ . Dans le condensat nous avons  $N$  particules et nous pouvons donc associer une fonction d'onde  $\psi_i$  à chacune d'entre elles. Cependant, afin de saisir les aspects essentiels du problème, nous recourons à une hypothèse concernant l'approximation du champ moyen. Cela signifie que pour une particule, toutes les autres ont le même statut car elles sont toutes dans le même état indépendant  $|\psi\rangle$  et ainsi nous pouvons laisser tomber l'étiquetage des fonctions d'onde. De cette façon, nous devons minimiser l'énergie libre sur un l'espace des fonctions du type

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle \otimes \dots \otimes |\psi\rangle \quad (III-6)$$

Où  $\otimes$  représente le tenseur produit et donc où  $|\psi\rangle$  est la fonction d'onde du produit tensoriel  $N$ -particule; nous envisageons la normalisation suivante  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ . Cette approximation est valable si le condensat n'est pas très dense; sinon, les interactions avec les voisins les plus proches seraient beaucoup plus fortes qu'avec les particules les plus éloignées. Notre problème est donc réduit à minimiser :

$$F(\psi) = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle - \mu\langle\psi|\psi\rangle \quad (III-7)$$

Quels sont les termes qui interviennent dans ce calcul ?

Pour le terme d'énergie cinétique, nous avons:

$$\begin{aligned} \langle\psi|\sum_{i=1}^N \frac{P^2}{2m}|\psi\rangle &= \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla\psi^*(r_i)\nabla\psi(r_i)dr_i \\ \langle\psi|\sum_{i=1}^N \frac{P^2}{2m}|\psi\rangle &= N \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla\psi(r)|^2 dr \\ \langle\psi|\sum_{i=1}^N \frac{P^2}{2m}|\psi\rangle &= -N \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(r)\nabla^2\psi(r)dr \end{aligned} \quad (III-8)$$

Où comme indiqué ci-dessus  $|\psi\rangle$  est la fonction d'onde du produit tensoriel  $N$ -particule et  $\psi(r)$  est la fonction d'onde à une seule particule

Nous avons utilisé l'identité de Green pour obtenir la dernière ligne de l'équation (III-8).

Le terme relatif au potentiel peut être facilement écrit comme :

$$\langle\psi|\sum_{i=1}^N V_{ext}(r_i)|\psi\rangle = N \int \psi^*(r)V_{ext}\psi(r)dr \quad (III-9)$$

## Chapitre III Condensation de Bose En Phase Solide

---

Le terme suivant est associé à l'interaction:

$$\begin{aligned} & \langle \psi | \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(|r_i - r_j|) | \psi \rangle \quad (III-10) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \int dr_i \int \psi^*(r_i) \psi^*(r_j) V(|r_i - r_j|) \psi(r_i) \psi(r_j) dr_j \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \int dr \int \psi^*(r) \psi(r') V(|r - r'|) \psi(r) \psi(r') dr' \quad (III-11) \end{aligned}$$

Enfin, pour le dernier terme de l'énergie libre :

$$\mu \langle \psi | \psi \rangle = \mu \left( \int \psi^*(r) \psi(r) dr \right)^N \quad (III-12)$$

Étant donné les expressions ci-dessus, nous devons maintenant les minimiser. Ceci peut être fait suivant une procédure basée sur le calcul des variations, qui en d'autres termes, permet de considérer une petite variation dans la fonction d'onde  $\psi(r)$ , mais au lieu de faire varier sa partie réelle et partie imaginaire, nous prenons  $\psi$  et  $\psi^*$  en tant que variables indépendantes. De cette façon, il est facile d'obtenir les dérivées fonctionnelles  $\frac{\delta \dots}{\delta \psi^*}$  pour les expressions (III-8) et (III-9). Dans le cas du terme d'interaction, expression (III-11), nous avons des contributions  $\psi^*$ ,

$$\begin{aligned} & \frac{\delta}{\delta \psi^*} \langle \psi | \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(|r_i - r_j|) | \psi \rangle \\ &= N(N-1) \int \delta \psi^*(r) \left( \int |\psi(r')|^2 V(|r - r'|) dr' \right) \psi(r) dr \quad (III-13) \end{aligned}$$

de la même façon pour le potentiel chimique

$$\begin{aligned} \frac{\delta \langle \psi | \psi \rangle}{\delta \psi^*} &= N \left( \int \psi^*(r) \psi(r) dr \right)^{N-1} \int \psi^*(r) \psi(r) dr \\ \frac{\delta \langle \psi | \psi \rangle}{\delta \psi^*} &= N \int \psi^*(r) \psi(r) dr \quad (III-14) \end{aligned}$$

En écrivant les différents termes de l'énergie libre, sa variation est donnée par :

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{\delta \psi^*} = 0 &= N \int \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V_{ext}(r) \psi(r) + \right. \\ & \left. (N-1) \left( \int |\psi(r')|^2 V(|r - r'|) dr' \right) \psi(r) - \mu \psi(r) \right] \delta \psi^*(r) dr \quad (III-15) \end{aligned}$$

## Chapitre III Condensation de Bose En Phase Solide

---

Habituellement le potentiel d'interaction est représenté par l'expression suivante :

$$V(|r - r'|) = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a \delta(r - r') \quad (III-16)$$

Où  $a$  est la longueur de diffusion.

Avec l'approximation  $(N - 1) \approx N$

Enfin nous obtenons l'équation de Gross-Pitaevskii indépendante du temps

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V_{ext}(r) \psi(r) + N \frac{4\pi\hbar^2}{m} a |\psi(r)|^2 \psi(r) = \mu \psi(r) \quad (III-17)$$

La longueur de diffusion  $a$  mesure l'intensité des interactions entre les bosons. Son signe indique si les interactions sont attractives ( $a < 0$ ) ou répulsives ( $a > 0$ ). De cette manière, la minimisation de l'équation (III-5) correspond à la minimisation de l'énergie libre  $F = E - \mu N$ , qui est un résultat bien connu de physique statistique.

Conclusion

Générale

La condensation de Bose Einstein a relancé l'intérêt des physiciens pour l'étude des atomes ultra froids, qui satisfont aux statistiques quantiques.

L'objectif principal de notre travail consistait:

En une introduction générale qui définit la condensation de Bose, et la nature des particules appelées bosons de spin entier, qui obéissent à la statistique de Bose-Einstein, dont l'une des spécificités est de permettre l'occupation d'un même état quantique par plusieurs bosons. Par opposition, les fermions ont des spins demi-entiers, et obéissent au principe d'exclusion de Pauli.

Au premier chapitre nous avons revu en détail les différentes statistiques (*MB*, *FD*, *BE* et *MBc*), dont le calcul des probabilités thermodynamiques est différent selon la statistique considérée conduisant à la statistique de Maxwell-Boltzmann et aux statistiques quantiques. Il existe deux types de statistiques quantiques selon la nature des particules : les particules de spin demi-entier (fermions) obéissant à la statistique de Fermi Dirac et celles de spin entier (bosons) à la statistique de Bose-Einstein ainsi que la limite des statistiques.

Quant au chapitre deux, l'étude portait sur le gaz parfait et condensation de Bose-Einstein, où nous avons déterminé les propriétés d'un gaz parfait (non relativiste) de bosons indiscernables alors que pour la condensation de Bose-Einstein, l'étude concernait : la population du niveau fondamental, la répartition des particules et fonctions thermodynamiques d'un gaz de Bose dégénéré. Nous nous sommes intéressés dans la partie condensation de Bose dans les solides au développement des techniques de piégeage et de refroidissement d'atomes. Ensuite, l'observation et la cohérence des condensats, l'intérêt portait également sur les atomes condensables et les dispositifs expérimentaux où il est important de noter que les nuages atomiques préparés avec les techniques décrites plus haut sont des gaz métastables et enfin, une description théorique du condensat (contrôle des interactions entre atomes et l'équation qui décrit la condensation) celle de Gross-Pitaevskii).

**A1 : Détermination de la répartition à l'équilibre :**

**Établissement des relations d'équilibre.**

La condition d'équilibre d'un système thermodynamique fermé et isolé se traduit mathématiquement par la condition du maximum de l'entropie  $S$  par rapport aux variables  $N_1, \dots, N_i, \dots, N_r$ , caractérisant son état macroscopique. Nous cherchons donc à déterminer la répartition  $N_1^0, \dots, N_i^0, \dots, N_r^0$ , rendant maximum la fonction  $S(N_i) = k \text{Log } W(N_i)$ . Toutefois, les variables  $N_i$  ne sont pas indépendantes, car elles doivent satisfaire aux conditions de contrainte d'un système fermé et isolé :

$$\begin{aligned} \sum_i N_i &= N \\ \sum_i N_i \varepsilon_i &= U \end{aligned}$$

Nous avons donc à résoudre un problème d'extremum d'une fonction à variables liées : on le traite par la méthode des multiplicateurs de Lagrange. Suivant cette méthode, on introduit deux multiplicateurs  $\lambda$  et  $\lambda'$  indépendants des  $N_i$  et on cherche le maximum de la fonction

$$S(N_i) + \lambda U(N_i) + \lambda' N(N_i)$$

**A2 : Interprétation physique des multiplicateurs de Lagrange.**

Cherchons la signification physique des multiplicateurs  $\bar{T}$  et  $\bar{\mu}$ . Pour cela, comparons les expressions statistique et classique de la différentielle de l'entropie du système à l'équilibre lors d'une transformation infinitésimale réversible au cours de laquelle les paramètres extérieurs (volume, champ magnétique, etc.) restent constants (la substance ne reçoit pas de travail). D'après la relation de Boltzmann et les relations d'équilibre, on a

$$dU = \sum_i \varepsilon_i dN_i$$

Et

$$dN = \sum_i dN_i$$

Au cours d'une telle transformation, les niveaux d'énergies restent constants, soit

$$k d \text{Log } W = k \sum_i \frac{\partial \text{Log } W}{\partial N_i} dN_i = \sum_i \frac{\varepsilon_i - \bar{\mu}}{\bar{T}} dN_i$$

L'expression de  $dS$  devient alors :

$$dS = \frac{dU}{\bar{T}} - \frac{\bar{\mu}}{\bar{T}} dN$$

Par ailleurs, la thermodynamique classique donne pour la même transformation ( $dW=0$ ) :

$$dU = TdS + \mu dN$$

Ou

$$dS = \frac{dU}{T} - \frac{\mu}{T} dN$$

Par identification, il ressort que  $\bar{T} = T$  et  $\bar{\mu} = \mu$ , c'est-à-dire que les multiplicateurs  $\bar{T}$  et  $\bar{\mu}$  s'identifient à la température  $T$  et au potentiel chimique  $\mu$  relatif à une particule du système et les relations d'équilibre :

$$\frac{\partial \text{Log}W}{\partial N_i} = \frac{\varepsilon_i - \mu}{kT}$$

La valeur extremum de  $\bar{\Omega}(N_i)$  coïncide avec la valeur de la fonction énergétique :

$$\Omega(T, V, \mu) = U - TS - N\mu$$

Nous avons trouvé la signification physique des multiplicateurs de Lagrange. Le problème de leur détermination en fonction des contraintes sera discuté ultérieurement dans les divers cas.

### A3 : Probabilité thermodynamique : méthode d'évaluation.

Nous allons évaluer maintenant la probabilité thermodynamique  $W$  d'un état macroscopique du système physique considéré : c'est-à-dire le nombre d'états microscopiques différents réalisant cet état macroscopique.

Selon les systèmes physiques, les états quantiques relatifs à une particule sont peu nombreux et bien séparés en énergie (substance paramagnétique dans un champ magnétique) ou au contraire en nombre infini, avec des différences d'énergie beaucoup trop petites pour pouvoir être mesurées (gaz monoatomique). Nous rencontrerons aussi des cas intermédiaires.

Un état macroscopique est alors défini par l'ensemble des nombres  $N_1, \dots, N_i, \dots, N_r$  de particules dans chacun des domaines d'indice  $1, \dots, i, \dots, r$ . Pour chercher la probabilité thermodynamique  $W(N_1, \dots, N_i, \dots, N_r)$  d'une telle répartition posée a priori, on procède en deux étapes.

Tout d'abord on évalue le nombre  $W_0$  de façons de réaliser la répartition choisie  $N_1, \dots, N_i, \dots, N_r$  des  $N$  particules dans les  $r$  domaines. Puis on évalue le nombre  $W_i$  de façons de distribuer les  $N_i$  particules du domaine  $i$  dans les  $g_i$  cellules de ce domaine. Effectuant ce dénombrement pour chacun des domaines, on obtient finalement :

$$W = W_0 W_1 \dots W_i \dots W_r = W_0 \prod_{i=0}^r W_i$$

L'évaluation explicite de  $W$  dépend de la nature physique des particules considérées. Nous devons distinguer deux cas selon que les particules sont discernables ou indiscernables.

#### A4 : Approximation de Stirling :

L'approximation de Stirling permet d'exprimer  $n!$  en une fonction approchée. On procède en partant de l'égalité suivante :

$$n! = n \times (n - 1) \times (n - 2) \times \dots \times 2 \times 1 = f(n)$$

Avec

$$f(n) = \int_0^{\infty} x^n \exp(-x) dx$$

Pour l'établir, notons d'abord, d'après ce qui précède que :

$$f(1) = \int_0^{\infty} x \exp(-x) dx = 1$$

En outre, en intégrant par parties, l'intégrale  $f(n)$  s'écrit :

$$f(n) = [-x^n \exp(-x)]_0^{\infty} + n \int_0^{\infty} x^{n-1} \exp(-x) dx = n \times f(n - 1)$$

Par conséquent :

$$f(n) = n \times f(n - 1)$$

$$f(n) = n(n - 1)f(n - 2) = n \times (n - 1) \times (n - 2) \times \dots \times 2 \times 1 = n!$$

La fonction  $f(n)$  s'écrit aussi, puisque  $x = \exp(\text{Log } x)$

$$f(n) = \int_0^{\infty} x^n \exp(-x) dx = \int_0^{\infty} \exp(n \text{Log } x) \exp(-x) dx$$

$$f(n) = \int_0^{\infty} \exp(n \text{Log } x - x) dx$$

## Annexe.

Étudions l'argument de l'exponentielle  $y(x) = n \operatorname{Log} x - x$ , il présente un maximum pour  $x = n$ , puisque :

$$\frac{dy}{dx} = \frac{n}{x} - 1 = 0 \text{ pour } x = n$$

Et

$$\frac{d^2y}{dx^2} = -\left(\frac{n}{x^2}\right) = -\frac{1}{n} < 0$$

Ainsi, dans l'intégrale donnant  $(n)$ ,  $y(x)$  peut être remplacé par son développement à l'ordre 2 inclus, avec une excellente approximation si  $n$  est grand :

$$y(x) = y(n) + \frac{(x-n)^2}{2} \left(\frac{d^2y}{dx^2}\right)_n \dots \approx n \operatorname{Log} n - n - \frac{(x-n)^2}{2n}$$

Il en résulte l'expression approchée suivante de  $n!$ :

$$n! = \int_0^\infty \exp \left[ n \operatorname{Log} n - n - \frac{(x-n)^2}{2n} \right] dx$$

$$n! = \exp(n \operatorname{Log} n - n) \times \int_0^\infty \exp \left[ -\frac{(x-n)^2}{2n} \right] dx$$

En posant  $u = x - n$ , l'intégrale précédente s'écrit :

$$\int_0^\infty \exp \left[ -\frac{(x-n)^2}{2n} \right] dx = \int_{-n}^\infty \exp \left[ -\frac{u^2}{2n} \right] du = \int_{-\infty}^\infty \exp \left[ -\frac{u^2}{2n} \right] du$$

Puisque  $n$  est suffisamment grand. Comme cette dernière quantité vaut  $(2\pi n)^{1/2}$ , on obtient l'approximation de Stirling :

$$n! \approx \exp(n \operatorname{Log} n - n) \times (2\pi n)^{\frac{1}{2}}$$

Soit

$$\ln n! \approx n \operatorname{Log} n - n + \frac{1}{2} \operatorname{Log}(2\pi n)$$

Une approximation pour des valeurs de  $n$  très grandes consiste à négliger le dernier terme. On a alors :

$$\operatorname{Log} n! = n \operatorname{Log} n - n$$

**A5 : Fonction Gamma :**

Elle est définie comme suit :

$$\forall z \in \mathbb{C} / \operatorname{Re}(z) > 0 \quad \Gamma: z \mapsto \int_0^{+\infty} t^{z-1} e^{-t} dt$$

On trouve sa principale propriété en intégrant par parties ; on pose

$$u' = t^z - 1 \quad v = e^{-t}$$

$$u = \frac{1}{z} t^z v' = -e^{-t}$$

On a :

$$\Gamma(z) = \left[ -\frac{1}{z} t^z e^{-t} \right]_0^{+\infty} + \int_0^{+\infty} \frac{1}{z} t^z e^{-t} dt$$

$$\Gamma(z) = \frac{1}{z} \int_0^{+\infty} \frac{1}{z} t^z e^{-t} dt$$

$$\Gamma(z) = \frac{1}{z} \Gamma(z+1)$$

Par conséquent, nous avons la propriété

$$z\Gamma(z) = \Gamma(z+1)$$

Nous voyons que la fonction Gamma d'Euler prolonge la fonction factorielle l'ensemble des nombres complexes, excepté pour les entiers négatifs ou nuls :

$$\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)$$

Nous devons maintenant trouver l'expression de  $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)$ .

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^{+\infty} t^{-\frac{1}{2}} e^{-t} dt$$

On effectue le changement de variable

$$t = x^2 \text{ où } dt = 2x dx$$

Pour avoir :

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \int_0^{+\infty} x^{-1} e^{-x^2} 2x dx$$

$$= 2 \int_0^{+\infty} e^{-x^2} dx$$

On procède, en coordonnées polaires, comme pour l'intégrale de Gauss :

$$\begin{aligned} \left[ \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \right]^2 &= 2 \int_0^\pi \int_0^{+\infty} e^{-r^2} dr \cdot r d\theta \\ &= \pi \end{aligned}$$

Donc :

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

### A6 : Fonction Zeta.

En mathématique, la fonction Zeta de Riemann est une fonction analytique complexe qui est apparue essentiellement dans la théorie des nombres premiers. La position de ses zéros complexes est liée à la répartition des nombres premiers. Elle est aussi importante comme fonction modèle dans la théorie des séries de Dirichlet et se trouve au carrefour d'un grand nombre d'autres théories. Les questions qu'elle soulève sont loin d'être résolues et elle sert aussi de motivation et de fil conducteur à de nouvelles études, à l'instar du rôle joué par le grand théorème de Fermat.

#### Définition par la série de Riemann

La fonction  $\zeta$  de Riemann est une fonction analytique complexe méromorphe définie, pour tout nombre complexe  $s$  tel que  $Re(s) > 1$ , par la série de Riemann :

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} = 1 + \frac{1}{2^s} + \frac{1}{3^s} + \frac{1}{4^s} + \dots$$

D'après la théorie des séries de Dirichlet, on déduit que la fonction ainsi définie est analytique sur son domaine de convergence. La série ne converge pas en  $s = 1$  car on a

$$\sum_{k=1}^m \frac{1}{k} \geq \int_1^{m+1} \frac{du}{u} = \text{Log}(m+1)$$

Qui tend vers l'infini avec  $m$ . La valeur  $s = 1$  est donc une singularité de la fonction.

1. **Baruteau.** Introduction à la thermodynamique et à la physique statistique. Ecole normale supérieure de Cachan, 2002.
2. **Cohen. C, Tannoudji, Dalibard. J, Laloe. F,** la condensation de Bose-Einstein dans les gaz, Laboratoire Kastler Brossel. 2005
3. **Cohen-Tannoudji. C,** la condensation de Bose-Einstein (Introduction), 2003.
4. **Couture. L, Zitoune. R,** physique statistique. ellipses, France. Septembre 1992.
5. **Dalibard. J, Salomon. C,** expérience avec des atomes froids, séminaire Poincaré 1, Paris 2003.
6. **Greiner. W, Neise. L, Stocker. H.** thermodynamique et mécanique statistique. éd. Springer. Verlag, (1999).
7. **Kasprazk. J, Richard. M, Le Si Dang. D,** La condensation de Bose-Einstein en phase solide.pdf, 2000. [<http://www.cnrs.fr/>].
8. **Ngo. C, Ngo. H.** physique statistique 3<sup>ème</sup> Édition, Paris, 2008.
9. **Raimbault. J,** Introduction à la physique statistique des systèmes à l'équilibre, Licence de physique et application (Université Paris-Sud-XI), 2008.
10. **Rogel-Salazar. J,** the Gross-Pitaevskii equation and Bose-Einstein condensates, education, Bose-Einstein condensation Submitted to : EUR. J. phy.
11. **Vauclair. S,** Elément de physique statistique, Inter Editions, mai 1993.

## Résumé

---

Un condensat de Bose-Einstein est un état inhabituel de la matière qui se produit en raison des effets quantiques sur une collection d'entités appelées bosons. Son existence a été prédite par Satyendra Nath Bose et Albert Einstein que ce soit un boson ou un fermion. Le spin de la particule détermine s'il s'agit d'un boson ou d'un fermion. Il est important de différencier les bosons des fermions, car ils ont des comportements quantiques très différents. Les fermions ne peuvent pas coexister dans le même état quantique, contrairement aux bosons qui n'obéissent pas au principe d'exclusion de Pauli. Un condensat de Bose-Einstein est un état exotique de la matière et n'est possible qu'à basse température où la longueur d'onde thermique devient importante. À des températures élevées, les bosons individuels ont non seulement de petites fonctions d'onde, mais ils se déplacent rapidement et s'envolent. Dans un condensat de Bose-Einstein, les bosons individuels deviennent indiscernables.

**Les mots clé :** condensation de Bose-Einstein, différentes statistiques, gaz parfait de Bose, condensation dans les solides, gaz dégénéré,

### Abstract

Named for the theorists Satyendra Nath Bose and Albert Einstein who predicted its existence, a Bose-Einstein condensate is an unusual state of matter that arises because of quantum mechanical effects on a collection of entities called bosons. Everything is either a boson or a fermion. The spin of an object determines whether it is a boson or a fermion. The reason why is important to differentiate between bosons and fermions is that they have vastly different quantum mechanical behavior. Identical fermions cannot occupy the same place. This is called the Pauli exclusion principle. Bosons behave in almost the opposite way. They like to overlap. In quantum mechanics, the position of an object is uncertain. An object has a definite probability of being at any given point in space. This probability is encoded in what-is-called a wave function. It is like a "cloud" that tells you the probability that an object has a certain location. The object is more likely to be found in denser parts of the "cloud" and is less likely to be found in the less dense parts. If a region of space has no "cloud," then there is zero chance that the object is there. A Bose-Einstein condensate forms. This exotic state of matter is only possible at low temperatures. At high temperatures, the individual bosons not only have small wave functions but they move rapidly and fly apart. In summary, in a Bose-Einstein condensate, the individual bosons become indistinguishable.

**Keywords :** Bose-Einstein condensation, derishable statistics, ideal gas condensation, condensation in solids, degenerate gas.