

PHYSIQUE STATISTIQUE - CORRIGÉ DU TD 3

**Ensemble grand-canonique**

25 octobre 2005

**I - Système de particules identiques**

1. La grande fonction de partition  $\Xi$  représente une somme sur un ensemble d'états  $|l\rangle$  pour lesquels le nombre de particules  $N_l$  varie. On peut donc la décomposer en une sommation sur des états de même nombre de particules  $N_l = N$ , puis sommer sur les valeurs possibles de  $N$ , de zéro à l'infini,

$$\Xi = \sum_l e^{-\beta(E_l - \mu N_l)} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{N_l=N} e^{-\beta(E_l - \mu N_l)} = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \sum_{N_l=N} e^{-\beta E_l},$$

ce qui fait apparaître la fonction de partition canonique  $Z(T, V, N)$ ,

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \varphi^N Z(T, V, N) \quad \text{avec} \quad \varphi = e^{\beta\mu} \text{ la fugacité.}$$

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

$$\bar{N} = \sum_l P_l N_l = \frac{1}{\Xi} \sum_l N_l e^{-\beta(E_l - \mu N_l)} = \frac{1}{\beta\Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \mu} \quad \text{soit} \quad \boxed{\bar{N} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial (\ln \Xi)}{\partial \mu}}.$$

De la même façon, l'énergie moyenne est calculée à partir de la dérivée partielle du logarithme de la grande fonction de partition par rapport à  $\beta$ ,

$$\frac{\partial (\ln \Xi)}{\partial \beta} = -\frac{1}{\Xi} \sum_l (E_l - \mu N_l) e^{-\beta(E_l - \mu N_l)} = -\bar{E} + \mu \bar{N},$$

ce qu'on peut écrire de façon symétrique, en utilisant la relation précédente,

$$\bar{E} = \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial (\ln \Xi)}{\partial \mu} - \frac{\partial (\ln \Xi)}{\partial \beta} \quad \text{et donc} \quad \boxed{\bar{E} = \frac{1}{\beta} \left[ \mu \frac{\partial}{\partial \mu} - \beta \frac{\partial}{\partial \beta} \right] (\ln \Xi)}.$$

En introduisant la fonction grand-potentiel, analogue de l'énergie libre du cas canonique,

$$\boxed{J = -k_B T \ln \Xi} \quad \text{soit} \quad \ln \Xi = -\beta J,$$

on peut réécrire ces formules sous la forme

$$\boxed{\overline{N} = -\frac{\partial J}{\partial \mu}} \quad \text{et} \quad \boxed{\overline{E} = J + \left( \beta \frac{\partial}{\partial \beta} - \mu \frac{\partial}{\partial \mu} \right) J}.$$

**2.** Se donner un état microscopique  $|l\rangle$  du système de particules correspond à se donner un ensemble de nombres d'occupation  $N_\lambda$  de chacun des états individuels  $|\lambda\rangle$  possibles pour les particules constituantes. L'énergie et le nombre de particules de l'état sont alors

$$E_l = \sum_{\lambda} N_{\lambda} \epsilon_{\lambda} \quad \text{et} \quad N_l = \sum_{\lambda} N_{\lambda}.$$

La grande fonction de partition peut alors s'écrire en introduisant ces sommations,

$$\Xi = \sum_{\{N_{\lambda}\}} \exp \left[ -\beta \left( \sum_{\lambda} N_{\lambda} \epsilon_{\lambda} - \mu \sum_{\lambda} N_{\lambda} \right) \right] = \sum_{\{N_{\lambda}\}} \prod_{\lambda} \exp[-\beta N_{\lambda} (\epsilon_{\lambda} - \mu)],$$

expression dans laquelle on peut intervertir la sommation et le produit, de sorte que

$$\boxed{\Xi = \prod_{\lambda} \xi_{\lambda}} \quad \text{avec} \quad \boxed{\xi_{\lambda} = \sum_{N_{\lambda}} \exp[-\beta N_{\lambda} (\epsilon_{\lambda} - \mu)]}.$$

Dans cette dernière expression, la sommation porte sur tous les nombres d'occupation possibles. On verra que cette remarque est essentielle dans la suite. Par rapport au calcul qu'on avait fait en canonique pour un ensemble de particules indépendantes et discernables, on a ici une factorisation portant sur les états individuels, et non sur les particules individuelles. Rappelons qu'on avait alors la relation

$$Z = \sum_{\{\lambda_i\}} \exp \left[ -\beta \left( \sum_{i=1}^N \epsilon_{\lambda_i} \right) \right] = \prod_{i=1}^N \sum_{\lambda_i} \exp(-\beta \epsilon_{\lambda_i}) = z^N.$$

La fonction  $\xi_{\lambda}$  est la grande fonction de partition associée à un état individuel. Signalons aussi que la factorisation écrite ici repose de façon essentielle sur le fait qu'on peut faire varier indépendamment les différents nombres d'occupation, ce qui n'était pas possible en canonique lorsqu'on imposait la contrainte que la somme des  $N_{\lambda}$  soit fixée et égale à  $N$ .

**3.** Le nombre d'occupation moyen de l'état individuel  $|\lambda\rangle$  est donné par

$$\overline{N_{\lambda}} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial (\ln \xi_{\lambda})}{\partial \mu} = \frac{1}{\beta \xi_{\lambda}} \frac{\partial \xi_{\lambda}}{\partial \mu}.$$

Or pour des fermions, il ne peut y avoir qu'au plus une particule par état, de sorte que la sommation dans la définition de  $\xi_{\lambda}$  est limitée aux deux premiers termes,

$$\xi_{\lambda} = 1 + e^{-\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)} \quad \text{d'où} \quad \frac{\partial \xi_{\lambda}}{\partial \mu} = \beta e^{-\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)} \quad \text{et donc} \quad \boxed{\overline{N_{\lambda}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\lambda} - \mu)} + 1}}.$$

Cette expression constitue ce qu'on appelle la distribution de Fermi-Dirac. On voit que le nombre d'occupation moyen est au plus égal à un. De plus,  $\overline{N_{\lambda}}$  décroît lorsque l'énergie  $\epsilon_{\lambda}$

augmente. La courbe représentant ce nombre en fonction de l'énergie est symétrique par rapport à  $\epsilon_\lambda = \mu$ . Elle tend vers 1 aux faibles énergies et vers 0 aux hautes énergies. D'autre part, la température fixe la rapidité de transition d'une asymptote à l'autre, qui est d'autant plus grande que  $T$  est faible et  $\beta$  grand. À la limite  $T = 0$ , la courbe tend vers une fonction de Heaviside (marche d'escalier).

4. Pour les bosons, il n'y a pas de restriction sur le nombre de particules pouvant occuper un état individuel donné. La sommation sur  $N_\lambda$  est donc infinie, mais elle se calcule facilement, puisqu'il s'agit d'une série géométrique,

$$\xi_\lambda = \sum_{N_\lambda=0}^{\infty} \exp[-\beta N_\lambda (\epsilon_\lambda - \mu)] = \frac{1}{1 - e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)}},$$

à la condition que la série converge, c'est-à-dire que sa raison soit en valeur absolue inférieure strictement à 1, de sorte qu'on doit avoir

$$e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} < 1 \quad \text{et donc} \quad \forall \lambda \quad \epsilon_\lambda > \mu \quad \text{soit} \quad \boxed{\epsilon_0 > \mu},$$

où  $\epsilon_0$  est l'énergie de l'état fondamental. Cette condition étant remplie, le nombre moyen d'occupation de l'état  $|\lambda\rangle$  est alors

$$\boxed{\overline{N}_\lambda = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} - 1}} \quad \text{qui constitue la distribution de Bose-Einstein.}$$

Avec la condition  $\mu < \epsilon_0$ , l'expression précédente est positive, comme il se doit. Lorsque  $T$  et  $\mu$  sont fixés, le nombre  $\overline{N}_\lambda$  diminue lorsque l'énergie  $\epsilon_\lambda$  augmente, tendant vers zéro à l'infini, et vers une limite finie pour l'énergie du fondamental. Pour deux potentiels chimiques  $\mu_1$  et  $\mu_2$  satisfaisant à la condition précédente, avec  $\mu_1 < \mu_2$ , cette limite finie est plus grande pour  $\mu_2$ . De même, la courbe représentant le nombre d'occupation moyen en fonction de l'énergie est d'autant plus proche de ses asymptotes que la température est plus basse.

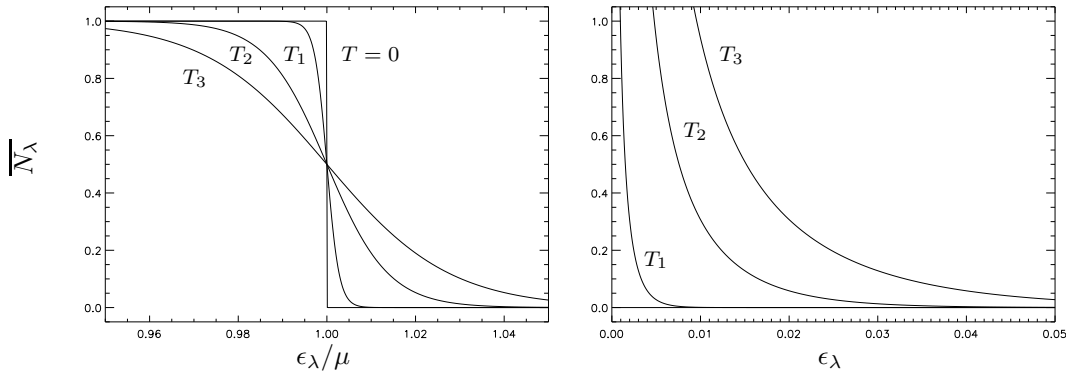


Figure 1.1: Distributions de Fermi-Dirac (à gauche) et de Bose-Einstein (à droite) pour trois températures  $T_1 < T_2 < T_3$ , ainsi qu'à température nulle.

5. On a déjà dit que l'approximation de Maxwell-Boltzmann était valide quand le nombre moyen d'occupation des états individuels est petit devant 1. À partir des expressions des

deux questions précédentes, on voit que cette approximation correspond à  $e^{\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} \gg 1$ . Les distributions de Fermi-Dirac et de Bose-Einstein donnent alors la même expression,

$$\boxed{\overline{N}_\lambda^{\text{FD}} \simeq \overline{N}_\lambda^{\text{BE}} \simeq e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} = \overline{N}_\lambda^{\text{MB}}}$$

Dans cette approximation, on a donc  $e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} \ll 1$  et le logarithme de la grande fonction de partition de l'état individuel  $|\lambda\rangle$  devient

$$\ln \xi_\lambda = \ln \left[ 1 + e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} \right] = e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)},$$

que les particules soient des fermions ou des bosons. On a par conséquent

$$\ln \Xi = \sum_\lambda \ln \xi_\lambda = \sum_\lambda e^{-\beta(\epsilon_\lambda - \mu)} = e^{\beta\mu} z \quad \text{où } z \text{ est la fonction de partition d'une particule.}$$

On en déduit, en prenant l'exponentielle, puis en développant celle-ci en série,

$$\Xi = \exp(e^{\beta\mu} z) = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \frac{z^N}{N!} \quad \text{à comparer avec l'expression du } \mathbf{1}.$$

On voit donc que la fonction de partition  $Z$  du système pour la distribution de Maxwell-Boltzmann correspond bien à l'approximation de Maxwell-Boltzmann puisque

$$\boxed{Z(T, V, N) = \frac{z(T, V)^N}{N!}}$$

## II - Gaz parfaits quantiques

### PRÉLIMINAIRE

**1.** Les différentes approches des systèmes en physique statistique séparent les variables en paramètres extérieurs fixés et en variables internes libres de fluctuer. Dans des systèmes suffisamment grands pour que ces fluctuations puissent être négligées, tout se passe comme si les variables internes étaient *de facto* des paramètres extérieurs. Autrement dit, rien ne peut les distinguer à l'équilibre. Les approches microcanonique, canonique et grand-canonique doivent alors donner le même résultat.

On peut donc, dans cette "limite thermodynamique", résoudre le problème de dénombrement posé par les gaz parfaits quantiques en canonique. En traitant le système d'abord en grand-canonique, soit à potentiel chimique fixé, on calcule le nombre moyen de particules  $\overline{N}$ . En écrivant que ce nombre est égal au nombre de particules fixé en canonique, on en déduit le potentiel chimique canonique, au moins de façon implicite. Le traitement des gaz parfaits quantiques à  $T$ ,  $N$  et  $V$  fixés peut alors être fait en injectant cette valeur dans les équations donnant - en grand-canonique - les différentes propriétés du système.

**2.** Si le système de particules est suffisamment grand, on a déjà vu que le spectre des états individuels peut être considéré comme continu, et on introduit donc une densité d'états  $\rho(\epsilon)$ . Le nombre moyen de particules est alors donné par

$$\overline{N} = \sum_\lambda \overline{N}_\lambda \quad \text{qui devient} \quad \overline{N} = \int_0^\infty \rho(\epsilon) \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1} d\epsilon \quad \text{ou} \quad \overline{N} = \int_0^\infty \rho(\epsilon) \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1} d\epsilon,$$

suivant que les particules sont des fermions ou des bosons, respectivement. On note que l'énergie du fondamental est nulle en prenant les conditions aux limites périodiques. Dans la limite thermodynamique, les expressions précédentes donnent non seulement le nombre moyen de particules d'un système en équilibre avec un réservoir de particules fixant le potentiel chimique, mais également la relation qui existe, en canonique, entre le nombre de particules du système, cette fois fixé, et le potentiel chimique. C'est alors une équation implicite donnant  $\mu$  en fonction de  $N$ ,

$$\boxed{N = \int_0^\infty \rho(\epsilon) \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} d\epsilon} \quad (\text{fermions}) \quad \boxed{N = \int_0^\infty \rho(\epsilon) \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} d\epsilon} \quad (\text{bosons}).$$

**3.** On a déjà calculé la densité d'états d'un gaz parfait, mais on tient compte cette fois-ci du fait qu'il existe  $2s + 1$  états de spin possibles par état "cinétique", soit

$$\rho(\epsilon) = AV\epsilon^{1/2} \quad \text{avec} \quad A = (2s + 1) \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}}.$$

#### GAZ PARFAIT DE FERMIONS

**1.** À température nulle, la fonction donnant le nombre d'occupation moyen en fonction de l'énergie de l'état est une marche d'escalier passant de la valeur 1 pour  $\epsilon < \mu_0$  à la valeur 0 pour  $\epsilon > \mu_0$ . La valeur limite  $\mu_0$  est celle implicitement donnée par la relation écrite plus haut, qui devient ici

$$N = \int_0^{\mu_0} \rho(\epsilon) d\epsilon = AV \int_0^{\mu_0} \epsilon^{1/2} d\epsilon = \frac{2AV}{3} \mu_0^{3/2} \quad \text{d'où} \quad \mu_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{6\pi^2}{2s+1} \frac{N}{V} \right)^{2/3},$$

ce qu'on réécrit en introduisant le vecteur d'onde et la température de Fermi  $K_F$  et  $T_F$ ,

$$\boxed{\mu_0 = \frac{\hbar^2 K_F^2}{2m} = k_B T_F} \quad \text{avec} \quad \boxed{K_F = \left( \frac{6\pi^2}{2s+1} \frac{N}{V} \right)^{1/3}} \quad \text{et} \quad \boxed{T_F = \frac{\hbar^2}{2mk_B} \left( \frac{6\pi^2}{2s+1} \frac{N}{V} \right)^{2/3}}.$$

Les états individuels de vecteur d'onde plus petit que  $K_F$  sont occupés, les autres non. On peut donc décrire le système à température nulle à l'aide d'une "sphère de Fermi", de rayon  $K_F$ , donnant l'occupation des états individuels.

**2.** L'énergie du système à température nulle est donnée par la relation

$$E = \int_0^{\mu_0} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon = AV \int_0^{\mu_0} \epsilon^{3/2} d\epsilon = \frac{2AV}{5} \mu_0^{5/2} \quad \text{soit} \quad \boxed{E = \frac{3}{5} N k_B T_F}.$$

**3.** Quant à la pression grand-canonique, elle est définie de manière générale par

$$P = -\frac{\partial J}{\partial V} \quad \text{dont on peut montrer qu'elle est également donnée par} \quad P = -\frac{J}{V},$$

dans le cas d'un fluide simple - c'est-à-dire d'un système ne dépendant que de trois variables, par exemple  $T$ ,  $V$ , et  $\mu$  - comme l'est le gaz parfait de fermions considéré ici. En effet, le

grand potentiel est une grandeur extensive lorsque les interactions entre constituants sont négligeables, de sorte que pour  $\alpha$  réel, on a

$$J(T, \alpha V, \mu) = \alpha J(T, V, \mu) \quad \text{d'où} \quad V \frac{\partial J}{\partial V}(T, \alpha V, \mu) = -PV = J(T, V, \mu).$$

Remarquons qu'on peut montrer de la même manière que la pression est indépendante du volume, puisqu'en dérivant par rapport à  $V$ ,

$$J(T, \alpha V, \mu) = \alpha J(T, V, \mu) \quad \text{implique} \quad \alpha \frac{\partial J}{\partial V}(T, \alpha V, \mu) = \alpha \frac{\partial J}{\partial V}(T, V, \mu).$$

Or le grand-potentiel  $J$  dans le cas d'un gaz parfait de fermions est

$$J = -k_B T \ln \Xi = -k_B T \sum_{\lambda} \ln \xi_{\lambda} = -k_B T A V \int_0^{\infty} \epsilon^{1/2} \ln [1 + e^{-\beta(\epsilon-\mu)}] d\epsilon.$$

On calcule cette expression par le biais d'une intégration par parties,

$$\int_0^{\infty} \epsilon^{1/2} \ln [1 + e^{-\beta(\epsilon-\mu)}] d\epsilon = \left[ \frac{2}{3} \epsilon^{3/2} \ln \{1 + e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\} \right]_0^{\infty} + \frac{2\beta}{3} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon^{3/2}}{1 + e^{\beta(\epsilon-\mu)}} d\epsilon.$$

Le terme tout intégré est évidemment nul pour  $\epsilon = 0$ , mais il l'est également pour  $\epsilon \rightarrow \infty$ , car il est équivalent à

$$\frac{2}{3} \epsilon^{3/2} \ln [1 + e^{-\beta(\epsilon-\mu)}] \sim \frac{2}{3} \epsilon^{3/2} e^{-\beta(\epsilon-\mu)} \rightarrow 0.$$

L'intégrale restante est reliée à l'énergie  $E$ , et on a finalement

$$J = -\frac{2}{3} E \quad \text{et donc} \quad P = \frac{2E}{3V} \quad \text{relation valable à température quelconque.}$$

À température nulle, cela donne tout naturellement

$$\boxed{P = \frac{2}{5} \frac{N k_B T_F}{V}}.$$

Le fait que l'énergie et la pression à température nulle soient non nulles est un effet du principe de Pauli. Les  $N$  fermions se répartissent en obéissant à ce principe dans les niveaux d'énergie les plus bas. Même à température nulle, les particules n'ont pas une impulsion nulle, de sorte que leurs chocs contre les parois ne cessent pas.

#### GAZ PARFAIT DE BOSONS

**1.** Le cas d'un gaz parfait de bosons dans la limite thermodynamique se traite tout d'abord en écrivant, comme on l'a déjà fait, que le nombre de particules doit être égal au nombre moyen calculé en grand-canonique pour un certain potentiel chimique  $\mu$ ,

$$\boxed{N = \int_0^{\infty} \rho(\epsilon) \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} d\epsilon},$$

en posant toujours que le niveau fondamental est d'énergie nulle. La différence avec le gaz de fermions est qu'ici on a une limitation sur les valeurs possibles du potentiel chimique, à savoir  $\mu < 0$ . Il faut donc qu'il y ait une solution négative de l'équation précédente. Or nous allons voir que ce n'est pas toujours possible. Remplaçant  $\rho(\epsilon)$  par son expression,

$$N = AV \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} d\epsilon \quad \text{avec } \mu < 0,$$

qu'on réécrit en explicitant  $A$  et en introduisant  $\varphi = e^{\beta\mu}$  et  $x = \beta\epsilon$ ,

$$\frac{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}{(2s+1)V} \left(\frac{\beta}{m}\right)^{3/2} = \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{x/\varphi} - 1} dx = I_B(\varphi) \quad \text{avec } 0 \leq \varphi < 1.$$

L'intégrale du second membre n'est pas calculable explicitement, mais pour notre argument, il suffira de savoir qu'elle est croissante avec  $\varphi$ , qu'elle vaut zéro pour  $\varphi = 0$  et surtout qu'elle atteint une limite finie non nulle pour  $\varphi = 1$ ,

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^x - 1} dx = I_B(1) \simeq 2,315.$$

Par conséquent, pour que le problème ait une solution, il faut que l'intégrale du second membre prenne la valeur spécifiée par le premier membre sur l'intervalle  $[0, 1[$ , ce qui implique

$$\frac{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}{(2s+1)V} \left(\frac{\beta}{m}\right)^{3/2} < I_B(1) \quad \text{soit} \quad \boxed{T > T_B = \frac{\hbar^2}{mk_B} \left[ \frac{\sqrt{2}\pi^2}{(2s+1)I_B(1)} \frac{N}{V} \right]^{2/3}}.$$

Dans cette dernière forme,  $T_B$  est la "température de Bose". Au dessus de cette valeur limite, l'équation écrite au début de l'exercice admet une et une seule solution. Le système peut alors être traité exactement de la même façon que l'on a traité le gaz de fermions. En dessous de la température de Bose, en revanche, il va falloir traiter le système complètement différemment. On peut le comprendre en se rappelant qu'à basse température, les particules ont tendance à peupler les niveaux de plus basse énergie. Pour les fermions et pour les bosons, la possibilité d'occuper un niveau donné à plus d'une particule est radicalement différente, ce qui explique que l'on ait à adopter des approches différentes dans les deux cas. **2.** En dessous de la température de Bose, la relation liant  $N$  et  $\mu$ , telle qu'elle a été écrite plus haut cesse d'être valable, l'intégrale du second membre étant toujours inférieure strictement à  $N$  pour toutes les valeurs permises de  $\mu$ . Remontant en arrière, on constate que cette expression est issue de la relation donnant le nombre moyen de particules en grand-canonique,

$$\bar{N} = \sum_\lambda \bar{N}_\lambda \quad \text{qui donne toujours } N \text{ à la limite thermodynamique.}$$

Partant de là, on a invoqué le fait que les niveaux sont très rapprochés les uns des autres pour introduire la densité d'états et passer à la limite continue, ce qui fournit une intégrale. Or ce passage cesse d'être légitime si l'un des niveaux est beaucoup plus peuplé que tous les autres, car alors l'interpolation effectuée par l'intégrale est beaucoup trop grossière. On va montrer que c'est justement le cas pour un gaz parfait de bosons à basse température.

Prenons un réel  $\alpha$ , inférieur à un, mais tel que  $\alpha N$  représente une quantité macroscopique de particules. On cherche le potentiel chimique  $\mu$  d'un système tel que le nombre moyen de particules dans l'état fondamental soit  $\alpha N$ . Cette condition s'écrit

$$\overline{N}_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1} = \alpha N \quad \text{soit} \quad e^{-\beta\mu} = 1 + \frac{1}{\alpha N} \quad \text{et donc} \quad \boxed{\mu = -\frac{k_B T}{\alpha N}}.$$

Il faut noter que le potentiel chimique trouvé est extraordinairement petit en valeur absolue, et donc très proche de zéro. Dans tous les autres cas de figure, on aurait écrit  $\mu = 0$ , mais ici, il faut provisoirement conserver cette valeur pour la compréhension du raisonnement.

Considérons maintenant le premier état excité. Son énergie est  $\epsilon_1 = \eta_1 k_B T$ . Quel est l'ordre de grandeur de  $\eta_1$ ? On peut le calculer avec les conditions aux limites périodiques,

$$\epsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{L} \right)^2 = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \frac{1}{V^{2/3}} \quad \text{d'où} \quad \eta_1 = \frac{\epsilon_1}{k_B T} \geq \frac{\epsilon_1}{k_B T_B}$$

et donc, en remplaçant par l'expression trouvée plus haut,

$$\eta_1 \geq \frac{2\pi^2 \hbar^2}{m} \frac{1}{V^{2/3}} \frac{m}{\hbar^2} \left[ \frac{(2s+1)I_B(1)V}{\sqrt{2\pi^2}N} \right]^{2/3} = \frac{C}{N^{2/3}} \quad \text{avec} \quad C = [2\pi(2s+1)I_B(1)]^{2/3}.$$

La constante  $C$  est donc de l'ordre de l'unité, et par conséquent  $\beta\epsilon_1 \ll 1$ . Comme on a aussi  $\beta\mu \ll 1$ , le nombre moyen d'occupation du premier état excité est alors

$$\overline{N}_1 = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_1 - \mu)} - 1} \simeq \frac{1}{\beta(\epsilon_1 - \mu)} = \frac{1}{\eta_1 + \frac{1}{\alpha N}} \leq \left( \frac{C}{N^{2/3}} + \frac{1}{\alpha N} \right)^{-1}.$$

Par conséquent, le rapport entre les populations de l'état fondamental et du premier état excité est

$$\frac{\overline{N}_1}{\overline{N}_0} \leq \frac{1}{\alpha C N^{1/3}} \ll 1.$$

Le premier niveau excité, et par conséquent tous les niveaux excités, sont donc largement sous-peuplés par rapport au fondamental, qui est occupé par un nombre macroscopique de particules. Ce phénomène est appelé "condensation de Bose".

**3.** Il apparaît donc qu'il faut traiter séparément le niveau fondamental, et écrire que le nombre total de particules est égal au nombre  $N_0$  de particules dans l'état fondamental, plus le nombre de particules dans les états excités, dont on peut calculer la contribution de la même façon que dans le cas  $T \geq T_B$ . Plus précisément, à basse température, l'intégrale de la question **1.** est toujours inférieure à la valeur souhaitée, de sorte qu'il faut que le niveau fondamental soit peuplé macroscopiquement pour que la relation générale, sans intégration, soit valable. On doit donc écrire, pour  $T \leq T_B$ ,

$$N = N_0 + AV \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} - 1} d\epsilon \quad \text{avec} \quad \mu = -\frac{k_B T}{N_0}.$$

Dans l'intégrale, on peut cette fois assimiler sans difficulté  $\mu$  à zéro, car cela ne change pas la valeur du résultat,

$$\boxed{N = N_0 + AV \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon}.$$



Le potentiel chimique reste nul dans tout le domaine de températures  $T \leq T_B$ , et c'est le nombre de particules condensées dans l'état fondamental qui s'ajuste pour que la relation ci-dessus soit valable: quand la température baisse, l'intégrale diminue et  $N_0$  augmente.

Il faut insister sur le fait que ce phénomène ne se produit que parce que le nombre de particules  $N$  est fixé. Si l'on avait fixé le potentiel chimique en laissant le nombre de particules libre de varier, la relation écrite au **1.** pour la moyenne  $\bar{N}$  aurait continué d'être valable. Aux faibles températures, le système se viderait simplement de ses particules. En particulier, pour un gaz de photons, qui sont des particules dont le nombre peut varier, on n'a pas de condensation de Bose.

4. À partir de la relation ci-dessus, on a directement,

$$N_0 = N - AV \int_0^\infty \frac{\epsilon^{1/2}}{e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon = N - (2s + 1) \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \frac{V}{\beta^{3/2}} I_B(1),$$

ce qu'on peut réécrire en introduisant la température de Bose,

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

On voit que le nombre de particules condensées augmente continûment de 0 à  $N$  lorsque la température diminue de  $T_B$  à 0.