

XII - GAZ PARFAIT DE BOSONS A- particules matérielles

Dans ce qui suit, nous allons étudier les systèmes de bosons dégénérés (satisfaisant à la statistique de Bose-Einstein) formés de particules matérielles de masse m , non relativistes. Nous supposons que ces particules ont un spin nul.

Nous avons obtenu précédemment les relations suivantes pour un gaz idéal de bosons de spin nul:

$$\frac{PV}{kT} = \text{Log}L = - \sum_i g_i \text{Log}(1 - z \exp(-\beta \varepsilon_i))$$

$$N = \sum_i n_i = \sum_i g_i \frac{1}{z^{-1} \exp(\beta \varepsilon_i) - 1}$$

où $z = \exp(\beta \mu)$ est la fugacité du gaz. Nous constatons que la fugacité z est comprise entre zéro et 1 (autrement certains nombres d'occupation seraient négatifs).

Nous considérons des volumes V macroscopiques. Les niveaux sont très serrés ; on peut remplacer la sommation par une intégration, en prenant un état par volume h^3 de l'espace des phases permis. Le nombre d'états d'impulsion comprise entre p et $p + dp$ est :

$$g(p)dp = \frac{V 4\pi p^2 dp}{h^3}$$

Sachant que les particules sont non relativistes, leur énergie cinétique est :

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$$

Le nombre d'états d'énergie comprise entre ε et $\varepsilon + d\varepsilon$ est :

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = g(p)dp = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon$$

Quand nous utilisons cette expression, nous attribuons un poids statistique zéro à l'énergie $\varepsilon = 0$ du niveau fondamental. Ceci n'est pas acceptable car nous devons avoir un poids statistique 1 pour tout état non dégénéré du système. Il est donc judicieux de traiter ce terme séparément dans l'intégration et d'écrire :

$$\frac{P}{kT} = -\frac{2\pi}{h^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty \varepsilon^{1/2} \text{Log}(1 - z \exp(-\beta \varepsilon)) d\varepsilon - \frac{1}{V} \text{Log}(1 - z)$$

et :

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

Pour $z \ll 1$, ce qui correspond à la limite classique, chacun des deux derniers termes de ces équations est de l'ordre de $\frac{z}{V}$ et est donc négligeable. Quand z augmente et prend une valeur proche de l'unité, le terme

$$\frac{1}{V} \frac{z}{1 - z} = \frac{N_0}{V}$$

devient une fraction significative de $\frac{N}{V}$; par contre, le terme :

$$\frac{1}{V} \text{Log}(1-z) = -\frac{1}{V} \text{Log}(N_0 + 1)$$

reste négligeable.

Faisons le changement de variable :

$$\beta\varepsilon = x$$

On aura alors :

$$\frac{P}{kT} = -\frac{2\pi}{h^3} (2mkT)^{3/2} \int_0^\infty x^{1/2} \text{Log}(1 - z \exp(-x)) dx = \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z)$$

$$\frac{N - N_0}{V} = \frac{2\pi}{h^3} (2mkT)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{z^{-1} \exp(x) - 1} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z)$$

où :

$\lambda = \frac{h}{(2\pi mkT)^{1/2}}$ est la longueur d'onde thermique moyenne . Introduisons les fonctions $g_n(z)$ définies par :

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

où $\Gamma(n)$ est la fonction Gamma d'Euler.

L'expression finale de $\frac{P}{kT}$ a été obtenue après une intégration par parties. Les équations :

$$\begin{cases} \frac{P}{kT} = \frac{1}{\lambda^3} g_{5/2}(z) \\ \frac{N - N_0}{V} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \end{cases}$$

sont nos résultats de base.

L'énergie interne du système est donnée par :

$$U = -\frac{\partial \text{Log} L}{\partial \beta} = \frac{3}{2} kT \frac{V}{\lambda^3} g_{5/2}(z)$$

Cette expression nous conduit à :

$$PV = \frac{2}{3} U$$

relation que nous avons déjà démontrée et qui est valable quelle que soit la statistique .

Pour de faibles valeurs de z $z \ll 1$, nous pouvons utiliser le développement limité suivant :

$$g_n(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^n} = z + \frac{z^2}{2^n} + \frac{z^3}{3^n} + \dots$$

Dans le même temps, nous pouvons négliger N_0 devant N . Une élimination de z dans les relations de P et de N conduit au développement du Viriel :

$$\frac{PV}{NkT} = \sum_{l=1}^{\infty} a_l (n\lambda^3)^{l-1}$$

Les coefficients a_l sont tels que :

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1 = 1 \\ a_2 = -\frac{1}{4\sqrt{2}} = -0.177 \\ a_3 = -\left(\frac{2}{9\sqrt{3}} - \frac{1}{8}\right) = -0.003 \end{array} \right.$$

La chaleur spécifique du gaz est alors donnée par l'expression:

$$\frac{C_v}{Nk} = \frac{3}{2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{5-3l}{2} a_l (n\lambda^3)^{l-1} = \frac{3}{2} \left[1 + 0.088n\lambda^3 + 0.007(n\lambda^3)^2 + \dots \right]$$

Notons qu'à température finie élevée, la capacité calorifique du gaz est plus grande que la valeur classique.

Quand la température est basse, nous devons utiliser les relations exactes de P et de $N - N_0$. La valeur précise de z peut être obtenue à partir de cette expression, qui peut être réécrite sous la forme:

$$N_e = V \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} g_{3/2}(z)$$

où N_e est le nombre de particules dans les états excités.

La valeur maximale que peut prendre la fugacité z est 1 (autrement le nombre d'occupation :

$$n_0 = \frac{g_0}{z^{-1} - 1}$$

serait négatif) . Ceci implique que le potentiel chimique est négatif. Cela signifie que l'énergie du système diminue lorsqu'on lui rajoute une particule. Bien que les particules soient sans interaction, l'effet de symétrie de la fonction d'onde est équivalent à celui d'une interaction . Les fermions semblent se repousser : un fermion dans un état fait que cet état est interdit aux autres. Les bosons semblent s'attirer puisque l'énergie diminue quand on rajoute des particules.

D'autre part, la fonction $g_{3/2}(z)$ est une fonction croissante de z ; sa valeur maximale est :

$$g_{3/2}(1) = 1 + \frac{1}{2^{3/2}} + \frac{1}{3^{3/2}} + \frac{1}{4^{3/2}} + \dots = \xi(3/2) = 2,612$$

La fonction ξ est la fonction Zéta de Riemann.

Par conséquent, pour des valeurs données de T et de V , le nombre de particules qui peuvent se placer dans les états excités est aussi limité :

$$N_e \leq V \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \xi(3/2) = N_{e \max}$$

Tant que le nombre de particules N du gaz est inférieur à $N_{e \max}$, les particules sont distribuées sur les états excités et le nombre de particules dans le fondamental est microscopique donc négligeable devant N . Quand le nombre de particules N est supérieur à $N_{e \max}$, les états excités vont recevoir $N_{e \max}$; le reste des particules, soit $N - N_{e \max}$ sera placé dans le fondamental dont l'occupation est alors macroscopique. La valeur de la fugacité z est dans ce cas :

$$z = \frac{N_0}{N_0 + 1} \approx 1$$

Ce phénomène est la condensation de Bose-Einstein. Il a été découvert théoriquement en 1924 ; il a été réalisé expérimentalement en 1995.

L'apparition de cette condensation se fait à la condition que :

$$N \geq VT^{3/2} \frac{(2\pi mk)^{3/2}}{h^3} \xi(3/2)$$

Pour un volume fixé V et un nombre de particules N , elle se produit pour une température T_C telle que :

$$T \leq T_C = \frac{h^2}{2\pi mk} \left[\frac{N}{V \xi(3/2)} \right]^{2/3}$$

Application numérique : Calculer la température de condensation de Bose-Einstein pour l'hélium liquide dont la masse volumique est $\rho = 0.14 \text{ g/cm}^3$.

Pour $T \leq T_C$ le système peut être vu comme un mélange de deux phases :

- i) une phase gazeuse constituée de $N_e = N \left(\frac{T}{T_C} \right)^{3/2}$ particules distribuées sur les niveaux excités
- ii) une phase condensée consistant en $N_0 = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_C} \right)^{3/2} \right]$ particules accumulées dans le niveau fondamental.

La chaleur spécifique à volume constant du gaz peut être déterminée en utilisant la relation :

$$U = \frac{3}{2} PV. \text{ Pour } T \leq T_C :$$

$$\frac{C_v}{Nk} = \frac{15}{4} \xi\left(\frac{5}{2}\right) \frac{V}{N \lambda^3}$$

qui est proportionnel à $T^{3/2}$. A la valeur $T = T_C$, nous avons :

$$\frac{C_v}{Nk} = \frac{15}{4} \frac{\xi(5/2)}{\xi(3/2)} = 1.925$$

Pour $T \geq T_C$, nous avons :

$$\frac{C_v}{Nk} = \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{3}{2} T \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} \right]_{N,V}$$

En utilisant les relations suivantes :

$$g_{3/2}(z) = \frac{Nh^3}{V(2\pi mkT)^{3/2}}$$

et :

$$z \frac{\partial}{\partial z} g_n(z) = g_{n-1}(z)$$

nous avons :

$$\left. \frac{\partial z}{\partial T} \right|_{N,V} = - \frac{3z}{2T} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}$$

ce qui conduit à :

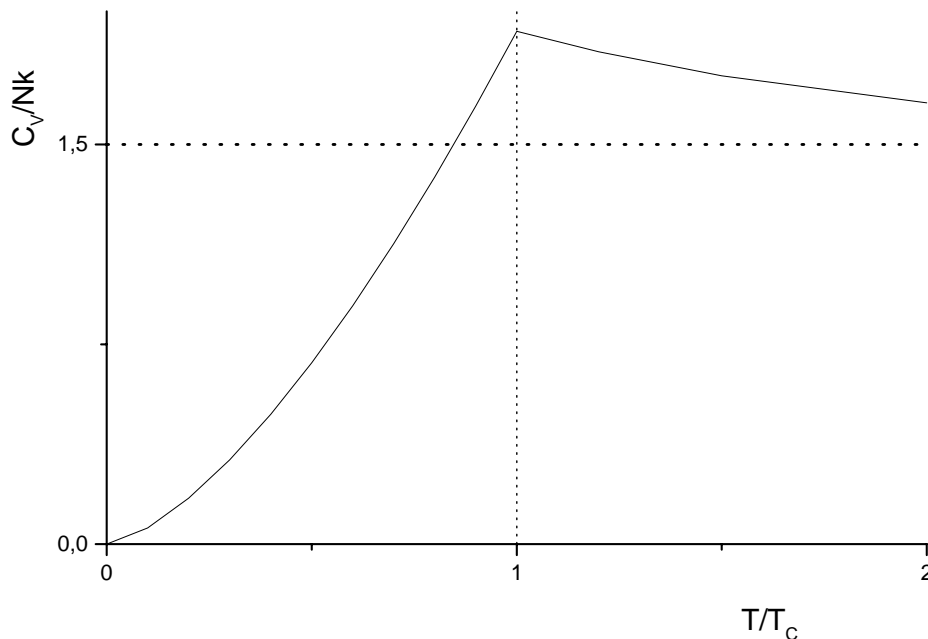
$$\frac{C_v}{Nk} = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(z)}{g_{3/2}(z)} - \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)}$$

Dans la limite $z \rightarrow 1$, la fonction $g_{1/2}(z)$ diverge ; on a donc :

$$\frac{C_v}{Nk} \rightarrow \frac{15}{4} \frac{\xi(5/2)}{\xi(3/2)} = 1.925$$

La chaleur spécifique à volume constant est donc continue en $T = T_c$. Sa dérivée est toutefois discontinue, la discontinuité valant :

$$\left. \frac{\partial C_v}{\partial T} \right|_{T_c^+} - \left. \frac{\partial C_v}{\partial T} \right|_{T_c^-} = -\frac{27Nk}{16\pi T_c} \xi^2(3/2) = -3.665 \frac{Nk}{T_c}$$



Capacité calorifique d'un gaz parfait de bosons

Pendant une cinquantaine d'années, on a pensé que la réalisation de la condensation de Bose Einstein n'était pas possible. Mais en même temps, des progrès dans le refroidissement d'atomes et dans l'obtention des basses températures sont régulièrement enregistrés. En 1995, les physiciens ont pu réaliser pour la première fois une condensation qui est assez proche de celle étudiée par Einstein sur des atomes de R_b . L'importance de cette réalisation expérimentale a été reconnue rapidement par la communauté scientifique internationale car le prix Nobel de physique a été attribué à ses réalisateurs en 2001.

INTEGRALES DE BOSE EINSTEIN

Dans l'étude des systèmes parfaits de bosons, nous rencontrons des intégrales du type :

$$g_n(z) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} dx}{z^{-1} \exp(x) - 1} \quad \text{avec} \quad 0 \leq z \leq 1$$

et où $\Gamma(n)$ est la fonction gamma d'Euler.

Pour z petit devant 1, l'intégrant peut être développé en puissance de z :

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

On voit que pour $z \ll 1$, pour toute valeur de n , $g_n(z)$ se comporte comme z . La fonction $g_n(z)$ est une fonction monotone croissante de z . Quand z prend sa valeur maximale ($z = 1$), la fonction $g_n(z)$ devient égale à la fonction Zéta de Riemann $\xi(n)$, qui est sa valeur maximale :

$$g_n(1) = \xi(n)$$

(on remarque que pour $n \leq 1$, la fonction $\xi(n)$ diverge).

Les valeurs numériques de quelques fonctions Zéta sont les suivantes :

$$\xi(2) = \frac{\pi^2}{6} = 1.645 \quad \xi(4) = \frac{\pi^4}{90} = 1.082 \quad \xi(6) = \frac{\pi^6}{945} = 1.017$$

$$\xi(8) = \frac{\pi^8}{9450} = 1.004$$

$$\xi(3) = 1.202 \quad \xi(5) = 1.037 \quad \xi(7) = 1.007$$

$$\xi(3/2) = 2.612 \quad \xi(5/2) = 1.341 \quad \xi(7/2) = 1.127$$

En différentiant, on obtient la relation suivante entre $g_n(z)$ et $g_{n-1}(z)$:

$$g_{n-1}(z) = z \frac{\partial}{\partial z} g_n(z)$$