

Lecture 10: Un soupçon de physique statistique quantique

Professeur: Florent Krzakala

Scribes: Thomas Cordova, Sebastiano Moneta, Joaquim Leal,
Amina Brahimi, Fouad Elgebely, András Horkay,
Maud Ponticelli, Pablo Moreno, Théodore Francelle,
Dara Goodale, Marlon Girardin, Hilmani Asmaa

10.1 Introduction

Cas classique Pour un gaz de particules, la fonction de partition est donnée par :

$$Z_N = \frac{1}{N!} \int \prod_i \frac{d\vec{x}_i d\vec{p}_i}{h^d} e^{-\beta \mathcal{H}(\{\vec{x}_i\}, \{\vec{p}_i\})}$$

Cas quantique Dans ce cas penser le système avec des particules, ayant chacune une position et une vitesse, devient erroné. A la place, on peut utiliser la **quantification de l'énergie**. Ainsi dans l'espace des énergies $\{\varepsilon_i\}$, la fonction de partition peut s'écrire comme :

$$Z_N = \sum_{\substack{\{n_i\} \\ \sum_i n_i = N}} e^{-\beta \sum_i \varepsilon_i n_i}$$

avec n_i le nombre de particules dans le niveau d'énergie ε_i .

R Dans ce cas, le facteur d'indiscernabilité $1/N!$ est absent, car sommer sur les occupations possibles rend déjà compte de cela.

La contrainte $\sum_i n_i = N$ rend cependant le calcul de Z_N compliqué. Pour remédier à ce problème, on décide de changer de formalisme : au lieu du formalisme canonique avec N fixé, on passe au **formalisme grand-canonique**. Dans ce dernier le nombre de particules n'est pas fixé, cependant on peut fixer μ à posteriori afin de retrouver en moyenne le nombre de particules du système. La fonction de partition est alors :

$$\begin{aligned} \Xi(\beta, \mu) &= \sum_{\{n_i\}} e^{-\beta \sum_i \varepsilon_i n_i + \beta \mu \sum_i n_i} \\ &= \sum_{\{n_i\}} \prod_i e^{\beta(\mu - \varepsilon_i) n_i} \\ &= \prod_i \left(\sum_{n_i} e^{\beta(\mu - \varepsilon_i) n_i} \right) \end{aligned} \quad (10.1)$$

Le formalisme grand-canonique nous permet donc de considérer les niveaux d'énergie indépendamment. On factorise et on passe au produit des fonctions de partitions pour chaque niveau d'énergie. Cette équation nous permet d'arriver à un résultat qu'on réutilisera par la suite :

$$\log \Xi = \sum_i \log \left(\sum_{n_i} e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)n_i} \right) \quad (10.2)$$

La question à présent concerne les niveaux d'énergies $\{\varepsilon_i\}$. En effet à partir du moment où les $\{\varepsilon_i\}$ sont connus, ainsi que leur dégénérescence et la nature des particules (bosons ou fermions), le calcul de la fonction de partition est réalisable.

10.2 Une particule dans une boîte

L'hamiltonien est $H = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}$, avec $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ et $E = \frac{\hbar^2 \|\mathbf{k}\|_2^2}{2m}$.

Deux types de conditions aux limites peuvent être imposées. Si les conditions aux limites sont périodiques, on obtient que:

$$\begin{cases} k_i = \frac{2\pi l_i}{L}, l_i \in \mathbb{Z} \\ \epsilon = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (l_x^2 + l_y^2 + l_z^2) \end{cases}$$

où $i = x, y, z$, ϵ est l'énergie et L est la longueur caractéristique de la boîte. Pour des conditions aux limites fixes, on obtient:

$$\begin{cases} k_i = \frac{\pi l_i}{L}, l_i \in \mathbb{N} \\ \epsilon = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (l_x^2 + l_y^2 + l_z^2) \end{cases}$$

Cela nous permet d'écrire que,

$$\boxed{\frac{\partial \epsilon}{\partial V} = -\frac{2\epsilon}{3V}} \quad (10.3)$$

en notant que $V = L^3$ est le volume. En effet, $\epsilon = \alpha V^{-\frac{2}{3}}$ avec α une constante. Lorsque l'on dérive cette expression on obtient que $\frac{\partial \epsilon}{\partial V} = -\frac{2}{3}\alpha V^{-\frac{2}{3}-1} = -\frac{2}{3V}\alpha V^{-\frac{2}{3}} = -\frac{2\epsilon}{3V}$ qui est bien le résultat attendu.

Maintenant on peut calculer la pression. Celle-ci est donnée par,

$$p = - \sum_i \langle n_i \rangle \frac{\partial \epsilon_i}{\partial V} = \frac{2}{3V} \sum_i \langle n_i \rangle \epsilon_i$$

$$\Leftrightarrow \boxed{pV = \frac{2}{3} \langle E \rangle}$$

Pour une particule dans une boîte cubique, le nombre total d'états d'énergie inférieure à E est obtenu à partir du volume d'une sphère dans l'espace des vecteurs d'onde k . On a ainsi :

$$\begin{aligned}\Phi_{\text{énergie} \leq E}(E) &= \frac{4\pi}{3} l^3(E) * \overbrace{\frac{1}{8}}^{\text{pour CLF}} \\ &= \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2mE}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2} V * \frac{1}{8}\end{aligned}$$

où V est le volume de la boîte, m est la masse de la particule, et \hbar est la constante réduite de Planck. Le facteur $\frac{1}{8}$ intervient dans la première ligne que lorsque les conditions aux limites sont fixes car il ne faut prendre en compte que la partie positive de la sphère. Pour la deuxième ligne, celui-ci doit toujours être pris en compte peu importe les conditions aux limites car $\frac{1}{8} l_{CLF}^3(E) = l_{CLP}^3(E)$.

La densité d'états $\nu(E)$ représente le nombre d'états par unité d'énergie. Elle est obtenue en dérivant $\Phi(E)$ par rapport à l'énergie E :

$$\nu(E) = \frac{\partial \Phi(E)}{\partial E} \quad (10.4)$$

Ainsi, on obtient que,

$$\boxed{\nu_{E,E+dE}(E) = \frac{2\pi V (2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2}} \quad (10.5)$$

Cette relation montre que la densité d'états $\nu(E)$ croît proportionnellement à la racine carrée de l'énergie E . En physique statistique, il est souvent plus pratique d'exprimer ces quantités en fonction de la quantité de mouvement p que de l'énergie E . On sait que la relation entre les 2 est donnée par,

$$p^2 = 2mE \quad (10.6)$$

Ainsi cela permet de réécrire le nombre d'états d'énergie comme,

$$\Phi(p) = \frac{4}{3} V \frac{1}{8} \frac{p^3}{\pi^2 \hbar^3} \quad (10.7)$$

En utilisant que $\nu(p)dp = \nu(E)dE$, la densité d'états sera donnée par,

$$\boxed{\nu_{p,p+dp}(p) = \frac{4\pi p^2 V}{h^3}} \quad (10.8)$$

Notons que les deux dernières relations sont écrites avec h plutôt que \hbar .

- R** En dérivant la densité d'énergie, nous avons fait l'approximation que l'énergie devenait continue, alors qu'en réalité nous sommes dans le cas d'une particule dans une boîte où l'énergie est quantifiée. Nous sommes donc passés d'une somme discrète à une intégrale continue. Il faut garder cette approximation à l'esprit et se rappeler que les niveaux d'énergie sont quantifiés.

10.3 Ensemble de Fermions

Les fermions ont une particularité : deux fermions ne peuvent pas occuper le même état. En cas de dégénérescence, on peut mettre le même nombre de particules dans le "même" état que la dégénérescence de l'état. Nous supposons ici que la dégénérescence est contenue dans la somme. Par conséquent, le principe d'exclusion de Pauli impose que le logarithme naturel de la fonction de partition soit :

$$\ln \Xi = \sum_i \ln(1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)}). \quad (10.9)$$

Nous pouvons également calculer le nombre moyen de particules dans le système $\langle N \rangle$. Par définition, nous avons :

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \Xi}{\partial \mu}.$$

R Cette formule découle du raisonnement suivant : la dérivée de $\ln \Xi$ par rapport à μ donne :

$$\partial_\mu \log \Xi = \frac{\sum_i \beta \sum_i m_i}{\Xi} e^{-\beta \sum_i \varepsilon_i m_i + \beta \mu \sum_i m_i} = \beta \langle n_i \rangle$$

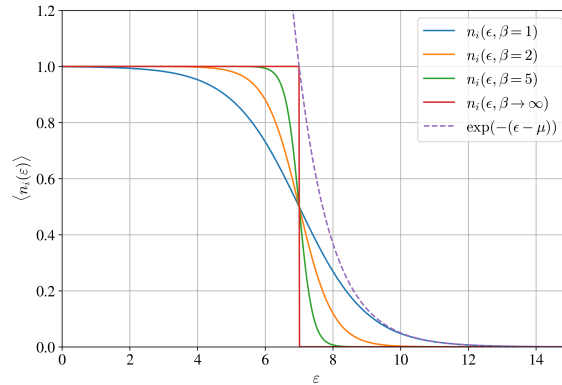
Nous pouvons calculer explicitement le nombre de particules :

$$\langle N \rangle = \sum_i \frac{e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)}}{e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)} + 1} = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1} = \sum_i \langle n_i \rangle,$$

où $\langle n_i \rangle$ est le nombre moyen de particules dans l'état i . Ce que nous avons dérivé ici est connu comme la fonction de Fermi-Dirac pour le nombre moyen de particules dans le système :

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1}.$$

Cela donne la probabilité de trouver une particule dans l'état i . Nous traçons cette fonction pour $\mu = 7$ et différentes valeurs de β sur la Fig.10.1. Si nous prenons la limite de $\beta \rightarrow \infty$, nous obtenons une fonction indicatrice qui est égale à 1 pour $\varepsilon_i \leq \mu$ et 0 sinon, comme le montre la Fig.10.1. En outre, si nous prenons le cas où $\varepsilon_i - \mu \gg 1$, la fonction diminue de manière exponentielle : $e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)}$. C'est ce que nous appelons la limite de Maxwell-Boltzmann, qui est la limite classique dans laquelle nous "oublions" tous les effets quantiques.

Figure 10.1: Fonction de Fermi-Dirac pour différentes valeurs de β .

En revenant au cas de $T = 0$, nous voyons que μ impose que nous ne puissions avoir que des énergies inférieures ou égales à μ . Lorsque $T = 0$, le nombre moyen de particules du $\langle N \rangle$ devient la fonction "Heaviside" donnée par :

$$\langle N_i \rangle = \sum \Theta(\epsilon_i \leq \mu).$$

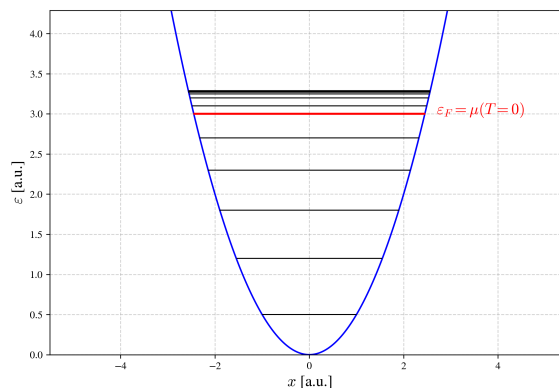
C'est le cas dans l'hypothèse discrète. Si l'on prend le cas continu, on a :

$$\langle N \rangle = \int_0^{\infty} \Theta(\epsilon_i \leq \mu) \nu(\epsilon) g d\epsilon = \int_0^{\mu} g \nu(\epsilon) d\epsilon.$$

Cette intégrale décrit le nombre d'états par unité d'intervalle d'énergie. Dans cette formule, chaque niveau d'énergie peut être dégénéré et cette fonction g est la densité d'états. Comme nous parlons ici d'électrons, nous avons $g = 2$. Cela s'explique par le fait que nous avons deux états de spin possibles pour chaque niveau d'énergie. Pour visualiser la situation, nous représentons les niveaux d'énergie comme sur la Fig. 10.2, où les niveaux d'énergie deviennent de plus en plus serrés au fur et à mesure que l'on monte. À une température de $T = 0$, tous les états d'énergie inférieurs à μ sont occupés, tandis que les autres restent vides.

La valeur $\mu(T = 0)$ est appelée énergie de Fermi ϵ_F . Le niveau d'énergie de Fermi est implicitement défini par la fonction :

$$N = \int_0^{\epsilon_F} g \nu(\epsilon) d\epsilon,$$

Figure 10.2: Puits de potentiel montrant le niveau d'énergie de Fermi ϵ_F .

où N est donné par le nombre de particules dans le système.

Ainsi, en utilisant la Fig.10.2 il est utile de définir la température de Fermi, donnée par: $T_F = \frac{\epsilon_F}{k_B}$. Tant que la température du système T reste inférieure T_F , la particule considérée restera immobile. Illustrons ces principes par deux exemples importants.

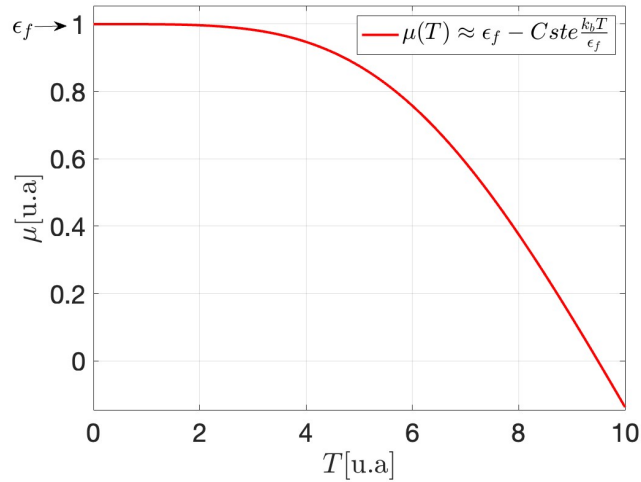


Figure 10.3: Évolution du potentiel chimique μ en fonction de la température T

Ex.1 : Electrons dans une solide

Considérons un système d'électrons dans une solide sans interactions entre eux, ainsi un gaz d'électrons indépendant mais qui peut interagir avec la solide. La température de Fermi typique d'un tel système est de l'ordre de $T_F \approx 60000\text{K}$, ce qui implique que la température du système peut être approximée comme nulle.

Ainsi, les seules particules qui réagissent à un flux rentrant d'énergie sont celles qui se trouvent au seuil d'énergie donnée par ϵ_F . Les électrons qui peuvent réagir se trouvent dans ce qui est appelé la "Mer de Fermi".

Pour illustrer l'aspect fondamental du concept du niveau de fermi, il faut s'intéresser à la théorie des bandes d'énergies. Dans la figure 10.4, le premier cas de peuplement permet de faire bouger les électrons en leur envoyant de l'énergie. Dans le second cas, le peuplement est à la fin de la bande d'énergie autorisée et la seule manière pour les électrons de bouger est de sauter les bandes d'énergies interdites. Pour cela, il faut leur envoyer une grande quantité d'énergie et ainsi selon la largeur de la bande interdite être soit dans le cas d'un isolant ou d'un conducteur.

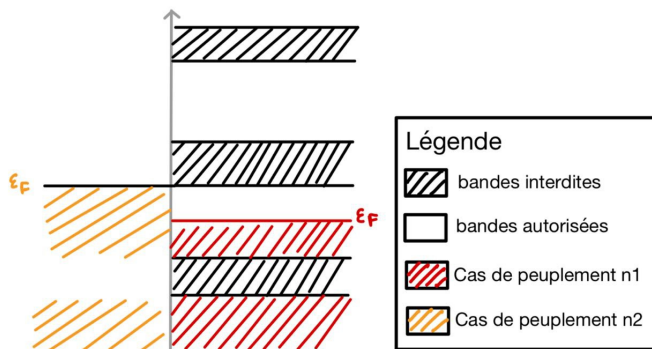


Figure 10.4: Diagramme de bandes d'énergie d'un système de particules en fonction de 2 niveaux de Fermi ϵ_F .

Ex.2 : Gaz parfait de fermions avec spin $\frac{1}{2}$

Considérons un système de gaz parfait de fermions avec la densité d'énergie donnée par les particules dans une boîte sans interactions. Il est important de noter que la contrainte que deux fermions ne puissent pas se trouver au même niveau d'énergie impliquera une interaction de quelque sorte. Le nombre de particules est donnée par:

$$N = \int_0^{\epsilon_F} 2 \cdot 2\pi V \sqrt{\epsilon} \cdot \frac{(2m)^{3/2}}{h^3} d\epsilon \quad (10.10)$$

En supposant que l'on se trouve avec l'énergie de Fermi ϵ_F et qu'ainsi $T = 0$, l'Eq.(10.10) se réduit:

$$N = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2} \cdot 2 \quad (10.11)$$

Ainsi, on trouve l'énergie de Fermi pour ce système:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{2/3} \quad (10.12)$$

On trouve donc qu'à température nulle, l'énergie des fermions n'est pas nulle: Il existe une énergie résiduelle *non nulle* pour un système de fermions à température zerp! Ce résultat a des conséquences physiques fondamentales.

Rappelons la relation entre pression et énergie pour un système classique, $pV = \frac{2}{3}E = \frac{2}{3} \frac{3}{3} Nk_B T$. Et donc on retrouve $pV = Nk_B T$.

Ici, c'est différent: Un gaz d'électrons est complètement dégénéré lorsque $T \leq T_F$. Dans ce régime tous les niveaux d'énergie jusqu'à l'énergie de fermi sont occupés et on est essentiellement à température nulle. Donc : les électrons remplissent tout l'espace des phases jusqu'à la surface de Fermi. Les seules excitations possibles sont à une énergie ϵ_F . Pour créer une excitation, il faut déplacer un électron d'un état occupé vers un état vide — et les états vides les plus proches sont juste au-dessus.

Procedons mathematiquement: L'énergie totale est donnée par l'intégrale

$$\langle E \rangle = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon g(\varepsilon) d\varepsilon,$$

où la densité d'états pour des électrons libres non relativistes vaut

$$\nu(\varepsilon) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}.$$

On obtient donc

$$\langle E \rangle = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon.$$

L'intégrale est immédiate :

$$\int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon = \frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2}.$$

Ainsi

$$\langle E \rangle = \frac{V}{5\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon_F^{5/2}.$$

Pour un gaz de fermions, on peut définir la pression de Fermi, autrement appelée la pression de dégénérescence en utilisant encore une fois $pV = 2/3\langle E \rangle$ et l'on trouve donc

$$p_F = \frac{2}{5} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} \frac{N^{5/3}}{V^{5/3}} \quad (10.13)$$

Par l'Eq.(10.13) on peut constater, en rassemblant les termes constants sous x , que la pression de dégénérescence pour une boîte de rayon R se comporte comme:

$$p_F \simeq x \frac{N^{5/3}}{R^5},$$

Dans le cas où il y a beaucoup d'électrons dans un gaz dans une boîte, la masse commence à compter. Il en découle la question suivante: est-ce que la pression p_F devient assez forte pour contrebalancer la gravité?

On peut étudier ce cas de figure en prenant en exemple des étoiles très denses. On peut procéder par analyse dimensionnelle; comparons la pression due à la force de gravitation avec la pression de Fermi:

$$p_{grav} = \frac{F}{A} \simeq \frac{M^2 G}{R^4}, \quad p_F \simeq \left(\frac{N}{V} \right)^{5/3} \simeq \frac{M^{5/3}}{R^5}$$

Il s'avère qu'en admettant que la densité de l'étoile n'est pas trop grande, la pression est en effet suffisante pour contrebalancer les forces gravitationnelles! Ceci peut être observé: Une naine blanche est précisément le résidu compact d'une étoile dont l'effondrement gravitationnel est *stoppé* par la pression de dégénérescence des électrons.

Autrement dit : l'étoile est très massive et très dense, la température interne est insuffisante pour soutenir l'étoile par la pression thermique, mais les électrons sont tellement comprimés qu'ils

forment un gaz complètement dégénéré, et l'effet Pauli (la pression de Fermi) empêche les électrons d'être comprimés davantage.

C'est donc la mécanique quantique, via le principe d'exclusion de Pauli, qui soutient une naine blanche contre la gravité.

Si elle acquiert un peu de masse supplémentaire, elle peut produire une nova, une explosion superficielle qui n'affecte pas la stabilité globale de l'étoile. En revanche, si sa masse dépasse la limite de Chandrasekhar, la pression de Fermi ne suffit plus : la naine blanche s'effondre brutalement et est entièrement détruite dans une supernova de type Ia.

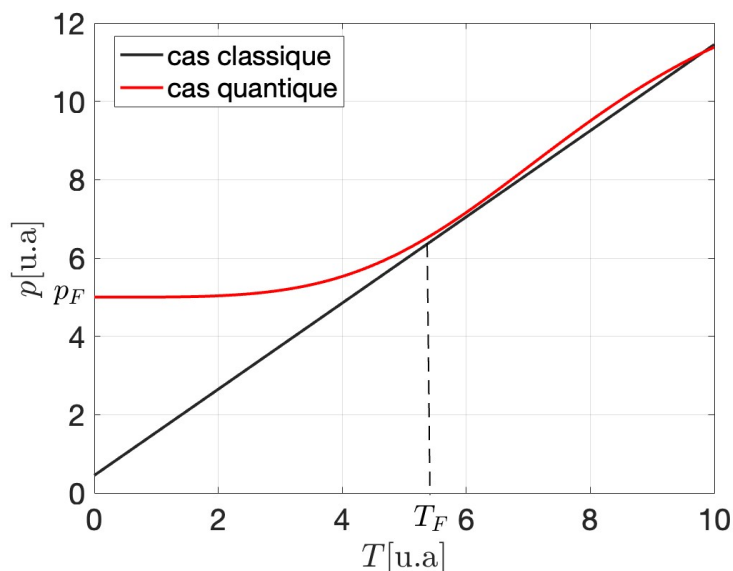


Figure 10.5: Évolution de la pression en fonction de la température T dans les cas classique et quantique

10.4 Ensemble de Bosons

Les bosons possèdent une caractéristique fondamentale qui les distingue des fermions : ils peuvent occuper le même état quantique sans restriction. Cette propriété est à l'origine de phénomènes uniques tels que la condensation de Bose-Einstein, où un grand nombre de bosons se trouvent dans le même état fondamental à basse température. En cas de dégénérescence, le nombre de particules pouvant occuper un état donné est théoriquement illimité. Dans ce contexte, nous supposons que la dégénérescence est incluse dans la somme des états considérés.

La fonction de partition grand canonique pour un ensemble de bosons est donnée par :

$$\log \Xi = - \sum_i \log \left(1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)} \right)$$

où $\beta = \frac{1}{k_B T}$, μ est le potentiel chimique, et ε_i sont les énergies des états accessibles.

Le nombre moyen de particules est :

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log \Xi}{\partial \mu} = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} = \sum_i \langle n_i \rangle$$

La fonction de distribution de Bose-Einstein, qui donne le nombre moyen de bosons occupant l'état i , est :

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1}$$

10.4.1 Comparaison des Distributions

Le graphique ci-dessous montre la distribution de Bose-Einstein en fonction de $(\varepsilon - \mu)/kT$:

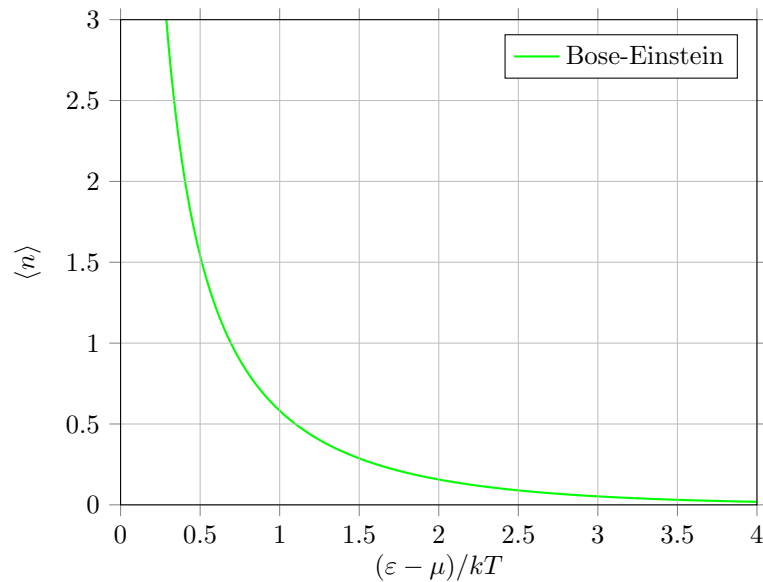


Figure 10.6: Distribution de Bose-Einstein en fonction de $(\varepsilon - \mu)/kT$.

Le graphique suivant compare les distributions de Bose-Einstein, de Maxwell-Boltzmann et de Fermi-Dirac :

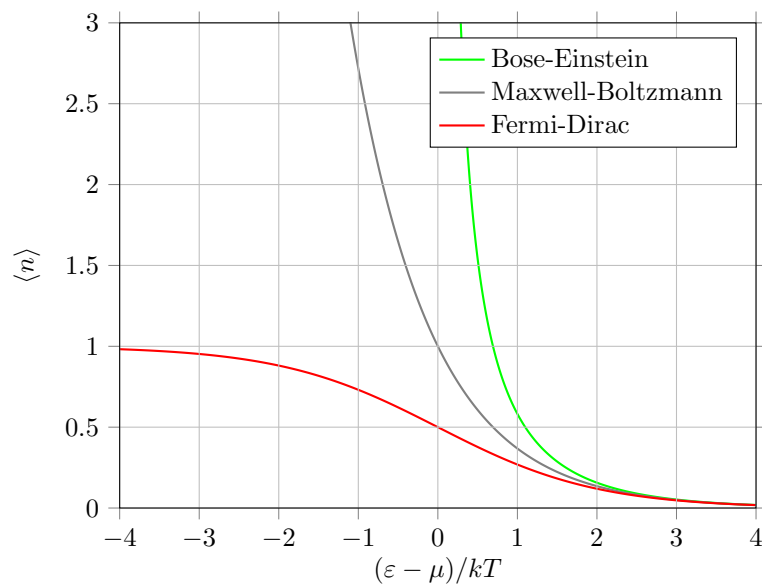


Figure 10.7: Comparaison des distributions de Bose-Einstein, Maxwell-Boltzmann et Fermi-Dirac.

On peut faire aussi la comparaison du potentiel chimique des fermions et bosons en fonction de la température:

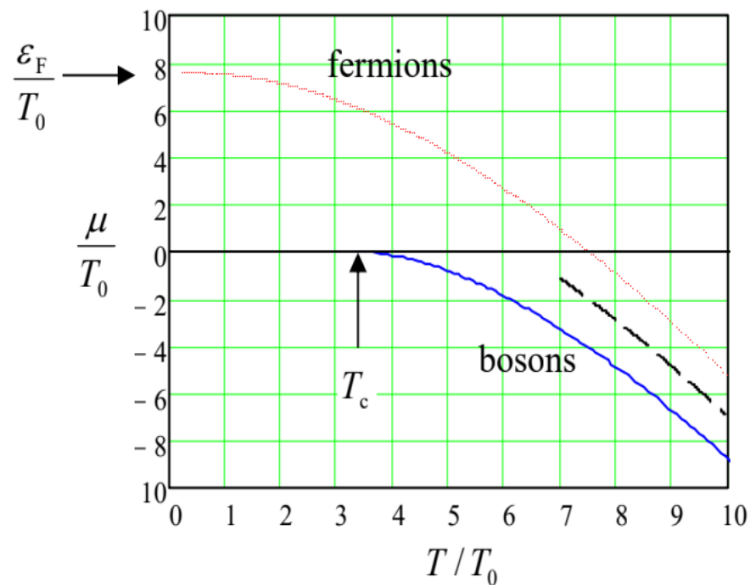


Figure 10.8: Potentiel chimique en fonction de la température.

Ce graphique présente une comparaison entre les comportements thermodynamiques des fermions et des bosons en fonction de la température réduite T/T_0 . L'axe vertical représente le rapport du potentiel chimique μ ou de l'énergie de Fermi ε_F à une température de référence T_0 . L'axe horizontal indique la température réduite.

- **Courbe rouge (fermions)** : Cette courbe montre comment l'énergie de Fermi (ε_F) diminue progressivement avec l'augmentation de la température. Cela reflète le comportement des fermions qui, en raison du principe d'exclusion de Pauli, conservent une énergie non nulle même à basse température.
- **Courbe bleue (bosons)** : Cette courbe représente le potentiel chimique des bosons. À basse température, le potentiel chimique reste proche de zéro, ce qui indique la formation d'un condensat de Bose-Einstein. À la température critique T_c , marquée par une flèche, le potentiel chimique commence à diminuer rapidement à mesure que la température augmente.

10.4.2 Nombre de Particules en Fonction de la Température

Le nombre total de particules dans un gaz de bosons est donné par :

$$N = \int_0^\infty d\varepsilon \nu(\varepsilon) g \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} \quad (10.14)$$

où $\nu(\varepsilon)$ est la densité des états, g est la dégénérescence, et h est la constante de Planck.

Dans le cas où $\mu = 0$, cette expression devient :

$$N = \frac{2\pi gV}{h^3} (2m)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} \quad (10.15)$$

avec $\int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} = \zeta(3/2) \cdot \sqrt{\pi}/2$ où ζ dénote la fonction Zeta de Riemann. Le graphique ci-dessous illustre la relation entre le nombre de particules N et la température T pour un gaz de bosons :

Relation entre N et T pour un gaz de Bosons

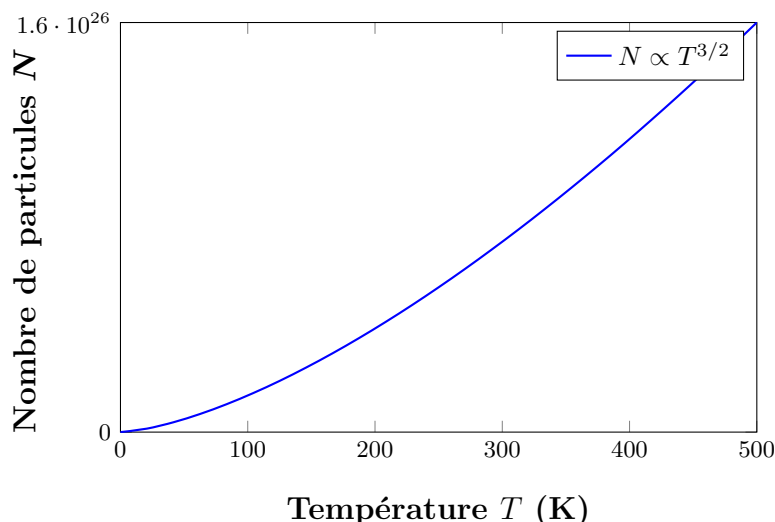


Figure 10.9: Relation entre le nombre de particules N et la température T pour un gaz de bosons.

Où nous pouvons voir que l'expression correspond essentiellement à $N \propto T^{\frac{3}{2}}$.

À présent, fixons le nombre de particules à N^* . Il existe une température, dite température de Bose T_B , pour laquelle $N(\mu = 0, T_c) = N^*$. Pour toute température $T > T_B$, il nous faudra donc prendre strictement $\mu < 0$, pour fixer $N(\mu, T) = N^*$. Plus la température augmente, et plus μ devient (négativement) grand.

Par contre nous avons un problème pour $T < T_B$! En effet, nous ne pouvons pas aller à des $\mu > 0$, et donc il semble que nous ayons rempli tout le système avec $N < N^*$, ou vont les autres particules?

Il faut maintenant se souvenir que la forme intégrale (10.15) n'est valable qu'à la condition que la distance $\Delta\varepsilon$ entre les niveaux d'énergie sur lesquels on intègre soient suffisamment petite. Or dans le cas de petites températures, les bosons sont en majorité dans l'état fondamental (ou le premier, deuxième état excité, jamais vraiment plus haut). Il faut donc se souvenir que nous avons, en réalité, une somme discrète.

Une façon simple de modéliser la situation est, au lieu de calculer le nombre de particules à partir de (10.15), d'écrire à la place

$$N^* = N_0 + \int_{0^+}^{\infty} d\varepsilon g\nu(\varepsilon) \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}, \quad (10.16)$$

où N_0 désigne le nombre de particules EXACTEMENT dans l'état fondamental.

L'intégrale (10.15) calcule donc, en réalité, le nombre d'états excités. Simplement dans le cas $\Delta\varepsilon \ll 1$ (quand les niveaux d'énergie peuvent être traités comme un continuum), la frontière $\varepsilon = 0$

du domaine d'intégration, c'est-à-dire le nombre de particules dans l'état fondamental, peut-être négligée. Mais pas ici : quand $T < T_B$ N_0 devient grand par rapport à l'intégrale ci-dessus. Appelons $N(\mu, T)$ cette intégrale. Alors on a

$$N_0 = N^* - N(\mu, T). \quad (10.17)$$

On s'intéresse à la proportion des particules qui sont dans l'état fondamental : N_0/N^* dans le cas $\mu = 0$. Substituant (??) dans (10.17) on a

$$\frac{N_0}{N^*} = 1 - \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2}. \quad (10.18)$$

On observe ainsi le phénomène suivant : pour tout $T > T_B$, le nombre de bosons dans l'état fondamental *en proportion du nombre total de bosons* est négligeable. Mais aussitôt que la température descend en dessous de Bose ($T < T_B$), une **fraction finie** du nombre total de bosons occupe l'état fondamental.

Cette transition de phase s'appelle *condensation de Bose-Einstein*. Elle s'observe expérimentalement et est à l'origine d'un certain nombre de phénomènes physiques quantique : superfluidité, superconductivité, ... La quantification de l'énergie (propriété quantique) et l'apparition brusque (transition de phase) de bosons en proportion de N^* occupant l'état fondamental donne donc à voir des phénomènes non-triviaux même dans un système à priori simple tel un gaz de bosons libres!

10.5 Rayonnement du corps noir

Le corps noir est un objet idéal qui absorbe toute l'énergie électromagnétique incidente. Cette énergie est après émise en forme de radiation thermique.

On peut donc dire qu'un corps noir est a un "absorbeur" parfait, et un "emetteur" parfait, à l'équilibre thermique. "Corps noir" trompeur, puisque l'objet n'est pas forcément noir!

On va se demander quelle est la distribution des fréquences des photons dans un corps noir, un calcul célèbre qui a donné naissance à la mécanique quantique!

Selon la loi de Planck, l'énergie d'un photon en fonction de sa fréquence est: $E = \hbar\omega = h\nu$. On reprend l'expression de ν obtenue précédemment, mais il faut faire attention parce que on ne peut pas utiliser celle avec la masse (les photons n'ont pas de masse):

$$\nu_p(p) = g \frac{4\pi p^2}{h^3} V = \frac{8\pi p^2}{h^3} V \quad (10.19)$$

Avec $g = 2$ (Les photons ont seulement spin ± 1 dû à des effets relativistes, il n'est pas possible d'avoir un spin 0).

Par ailleurs, les photons ont une particularité: Il n'y a pas de potentiel chimique ($\mu = 0$): le photon n'est pas vraiment une particule dont le nombre est conservé! Un photon est une particule de pure énergie, donc il n'y a pas de coût " μ " pour le créer (il en est de même pour les Phonons, que l'on a déjà rencontré lors de nos calculs dans le spectre de vibration des solides).

Enfin, ce ceux des particules relativistes, et il va nous falloir utiliser donc l'expression relativiste de l'énergie.

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = mc^2 \sqrt{\frac{p^2}{m^2 c^2} + 1} \approx mc^2 \left(1 + \frac{p^2}{2m^2 c^2}\right) = mc^2 + \frac{p^2}{2m} + \dots \quad (10.20)$$

Prenons l'énergie du photon (de masse nulle) comme $E(\text{photon}) = pc = \hbar\omega$, et donc on obtient $\omega = p \frac{c}{\hbar}$. Avec cette expression et celle de $\nu(p)$ on trouve $\nu_\omega(\omega)$, la densité d'état à pulsation ω :

$$\nu_\omega(\omega) d\omega = \nu_p(p) dp \quad (10.21)$$

$$\nu_\omega(\omega) = \frac{8\pi}{\hbar^3} V \frac{\omega^2 \hbar^3}{c^3} = \frac{V \omega^2}{\pi^2 c^3} \quad (10.22)$$

On peut donc maintenant donner le nombre moyen de photons avec notre formule bosonique:

$$\langle N_{\text{photons}}(\omega) \rangle = \frac{V \omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_b T}} - 1} \quad (10.23)$$

Si on prend l'énergie d'un photon ($\hbar\omega$) on arrive à la formule de Planck pour l'énergie moyenne en fonction de la pulsation:

$$E(\omega) = \langle N_{\text{photons}} \rangle \cdot \hbar\omega = \frac{V \omega^3 \hbar}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_b T}} - 1} \quad (10.24)$$

C'est une formule fondamentale, et c'est ce qui a permis à Planck de pouvoir décrire le rayonnement du corps noir!

On peut calculer l'énergie totale en intégrant sur toutes les pulsations et l'on trouve:

$$E_T = \int_0^\infty d\omega \frac{V \omega^3 \hbar}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_b T}} - 1} = \frac{V k_b^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{\frac{\hbar^3 \omega^3}{k_b^3 T^3}}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_b T}} - 1} \frac{\hbar}{k_b T} d\omega = \frac{V k_b^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx \quad (10.25)$$

L'intégrale se calcule, et l'on trouve $\frac{V}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15} k_b^4 T^4$, et la fameuse dépendance de l'énergie totale en T^4 .

10.5.1 Example

Le rayonnement du corps noir est utile afin d'observer les raies d'absorptions de l'atmosphère d'une planète. Voici un exemple dans lequel on peut déterminer la présence d'eau et de dioxyde de carbone dans l'atmosphère terrestre. La terre absorbe le rayonnement solaire et le réémet sous forme d'infrarouge correspondant au spectre d'un corps noir à une température moyenne de 288 K. Ce rayonnement va ensuite interagir avec les gaz présents dans l'atmosphère et une partie du rayonnement sera absorbé à des longueurs d'ondes caractéristiques permettant d'identifier les molécules présentes dans l'atmosphère.

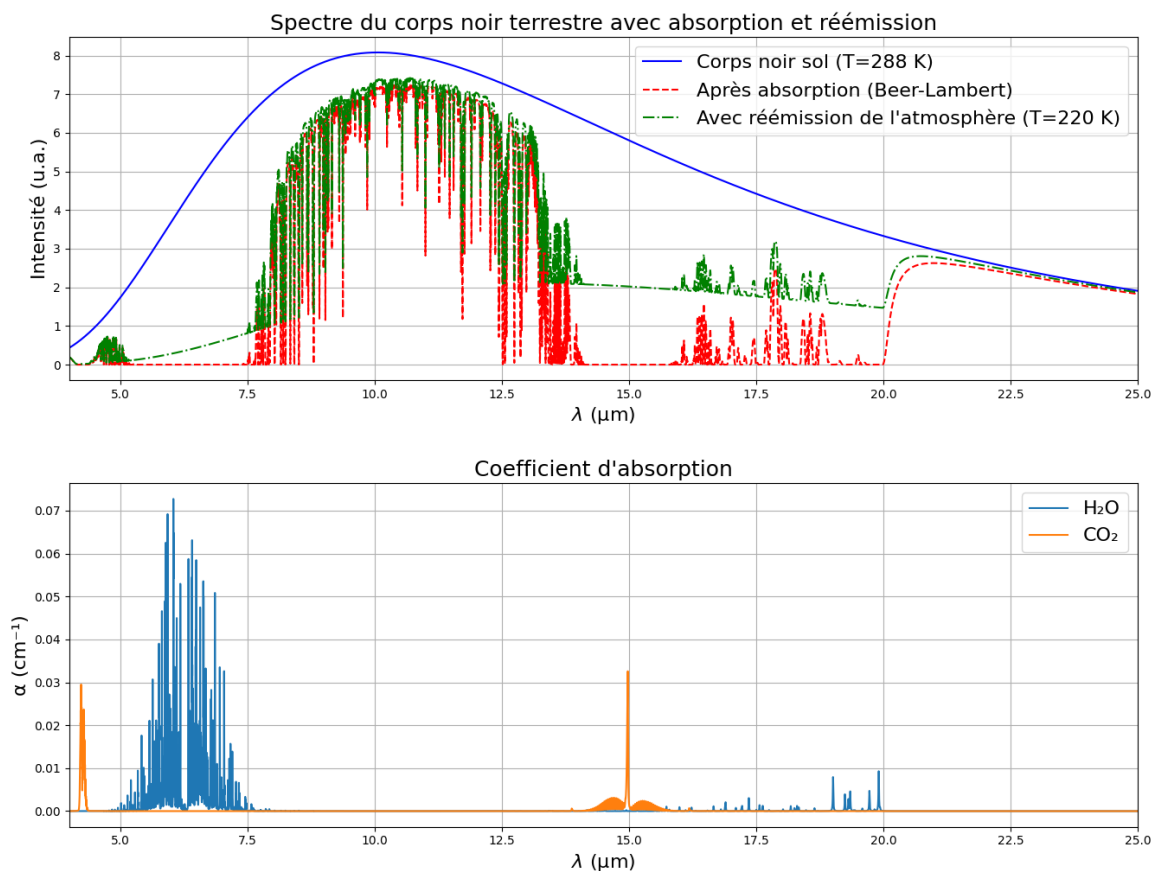


Figure 10.10: Comparaison entre le rayonnement de corps noir émis par la terre à température $T=288$ K et une modélisation de l'absorption par l'atmosphère du rayonnement terrestre en utilisant des données de l'HITRAN [Data] pour l'isotope le plus abondant de chaque molécule suivante: H_2O , CO_2 , O_3 , N_2O , CO , CH_4 ; ainsi que les coefficients d'absorption α des molécules de H_2O et CO_2 .

Dans le premier graphe, la courbe bleue représente le spectre du corps noir tel qu'il serait émis par la surface terrestre à 288 K sans aucune atmosphère pour l'absorber. La courbe rouge montre ce qui reste du rayonnement après avoir traversé l'atmosphère, en ne tenant compte que de l'absorption (loi de Beer-Lambert). La courbe verte montre ce qui se passe quand on tient compte à la fois de l'absorption et de la réémission infrarouge par l'atmosphère. Le deuxième graphe montre le coefficient d'absorption pour les molécules de H_2O et CO_2 en fonction de la longueur d'onde. Ce coefficient α exprime à quel point une molécule absorbe à une longueur d'onde λ donnée.

References

- [1] Données de l'Hitran, <https://hitran.org/lbl/>