**Série 4.**
Théorème de Liouville. Ensemble microcanonique.

**Exercice 4.1** Théorème de Liouville.

On considère un système classique défini sur l'espace de phase $(q_1, \ldots, q_N, p_1, \ldots, p_N)$ où les $q_i$ et $p_i$ sont les cordonnées et leurs moments conjugués. Le système est gouverné par un Hamiltonien $H(q,p)$. Etablir le théorème de Liouville: "Le volume

$$\Omega = dq_1 \ldots dq_N \, dp_1 \ldots dp_N \tag{1}$$

se conserve sous le flot hamiltonien."

Procéder de la façon suivante:

(1) Pour un champ vectoriel $v(x)$ dans un espace euclidien $(x_1, \ldots, x_n)$ montrer que la derivée du volume $\Omega = dx_1 \ldots dx_n$ le long du flot $v(x)$ est donnée par $\mathcal{L}_v \, \Omega = \Omega \, \mathrm{div} \, v$.

Par conséquent, le volume $dx_1 \ldots dx_n$ se conserve si $\mathrm{div} \, v = 0$.

(2) Pour le champ de vitesse hamiltonien,

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \tag{2}$$

vérifier la condition $\mathrm{div} \, v = 0$.

**Exercise 4.2** La fonction delta.

Prouver la proprieté suivante de la fonction delta. Pour une fonction $f(x)$,

$$\delta(f(x) - f_0) = \sum_{f(x_i) = f_0} \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i) \tag{3}$$

où la somme est prise sur les solutions de l'équation $f(x) - f_0 = 0$.

**Exercice 4.3** Ensemble microcanonique.

On considère un gaz parfait monoatomique ($N$ particules dans un volume $V$). L'énergie totale est fixée: $U = N\varepsilon$. Dans l'ensemble microcanonique, calculer la distribution de probabilité pour l'énergie d'une particule individuelle.

Procéder de la façon suivante:

(1) Considérer le cas général de $N$ systèmes identiques indépendantes avec densité d'etats $\rho(E) \, dE$. [Dans le cas particulier du gaz parfait monoatomique, la densité d'états par particule est $\rho(E) = \mathrm{const} \sqrt{E}$, avec la constante proportionnelle au volume du système]. La densité d'etats du système composé est donc

$$\rho_{\mathrm{tot}} = \int \!\! \ldots \!\! \int \prod_{i=1}^{N} dE_i \, \rho(E_i) \, \delta(\sum_{i=1}^{N} E_i - U) \, . \tag{4}$$

La distribution de probabilité pour l'énergie d'une particule est donnée par $dP(E) = p(E)\,dE$ où

$$p(E) = \frac{1}{\rho_{\rm tot}} \int\!...\!\int \prod_{i=1}^{N} dE_i\,\rho(E_i)\,\delta(\sum_{i=1}^{N} E_i - U)\,\delta(E_1 - E)\,. \tag{5}$$

(2) Calculer $\rho_{\rm tot}$ en introduissant le multiplicateur de Lagrange pour la fonction $\delta$:

$$\delta(x) = \int \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda x}. \tag{6}$$

Et ainsi

$$\rho_{\rm tot} = \int \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-i\lambda U} \int\!...\!\int \prod_{i=1}^{N} dE_i\,\rho(E_i)\,e^{i\lambda E_i}\,. \tag{7}$$

Après intégration sur $E_i$, on obtient

$$\rho_{\rm tot} = \int \frac{d\lambda}{2\pi} e^{Ns(\lambda)}. \tag{8}$$

Trouver l'expression pour $s(\lambda)$.

(3) Dans la limite $N \to \infty$, l'intégrale (8) peut être estimée par la méthode du point selle. Le comportement asymptotique de $\rho_{\rm tot}$ lorsque $N \to \infty$ est determiné par le point selle de $s(\lambda)$ [voir Exercice 1.2 et références d'analyse complexe]:

$$\rho_{\rm tot} \sim \sqrt{\frac{2\pi}{-Ns''(\lambda_0)}} e^{Ns(\lambda_0)}\,, \tag{9}$$

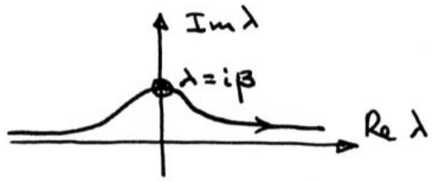
où $\lambda_0$ est le point selle:

$$s'(\lambda_0) = 0\,. \tag{10}$$

Remarquer que le point selle se trouve sur l'axe imagnaire: $\lambda_0 = i\beta$ et que le contour d'intégration doit ainsi être deformé pour passer sur $\lambda_0$ (voir Fig.). Montrer que la valeur de $\beta$ est déterminée par la condition

$$\frac{\int_0^\infty E\,e^{-\beta E}\,\rho(E)\,dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E}\,\rho(E)\,dE} = \varepsilon\,. \tag{11}$$

[L'interpétation physique de cette grandeur est l'énergie par particule à température $\beta^{-1}$.]




(4) De façon similaire, la distribution d'énergie par particule $p(E)$ est déterminée par le même point selle:

$$p(E) = \frac{1}{\rho_{\rm tot}} \int \frac{d\lambda}{2\pi} e^{(N-1)s(\lambda)}\,\rho(\lambda)\,e^{i\lambda(E-\varepsilon)}. \tag{12}$$

Dans l'approximation du point selle,

$$p(E) = \rho(E)\, e^{-s(i\beta)+\beta\varepsilon-\beta E} = \frac{1}{Z}\rho(E)e^{-\beta E} \tag{13}$$

où

$$Z = \int e^{-\beta E}\,\rho(E)\,dE \tag{14}$$

On retrouve "miraculeusement" la distribution de Boltzmann à température $\beta^{-1}$.

(5) Pour le gaz parfait monoatomique, en prenant $\rho(E) = \text{const}\,\sqrt{E}$, déterminer $\beta$ et $p(E)$ comme fonctions de $\varepsilon$.