

Série 4.

Théorème de Liouville. Ensemble microcanonique.

Exercice 4.1 Théorème de Liouville.

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

$$\Omega = dq_1 \dots dq_N dp_1 \dots dp_N \quad (1)$$

se conserve sous le flot hamiltonien."

Procéder de la façon suivante:

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

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

(2) Pour le champ de vitesse hamiltonien,

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

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

Exercice 4.2 La fonction delta.

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

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

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'états $\rho(E) dE$. [Dans le cas particulier du gaz parfait monoatomique, la densité d'états par particule est $\rho(E) = \text{const} \sqrt{E}$, avec la constante proportionnelle au volume du système]. La densité d'états du système composé est donc

$$\rho_{\text{tot}} = \int \dots \int \prod_{i=1}^N dE_i \rho(E_i) \delta\left(\sum_{i=1}^N E_i - U\right). \quad (4)$$

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

$$p(E) = \frac{1}{\rho_{\text{tot}}} \int \dots \int \prod_{i=1}^N dE_i \rho(E_i) \delta\left(\sum_{i=1}^N E_i - U\right) \delta(E_1 - E). \quad (5)$$

(2) Calculer ρ_{tot} en introduisant le multiplicateur de Lagrange pour la fonction δ :

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

Et ainsi

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

Après intégration sur E_i , on obtient

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

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

(3) Dans la limite $N \rightarrow \infty$, l'intégrale (8) peut être estimée par la méthode du point selle. Le comportement asymptotique de ρ_{tot} lorsque $N \rightarrow \infty$ est déterminé par le point selle de $s(\lambda)$ [voir Exercice 1.3 et références d'analyse complexe]:

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

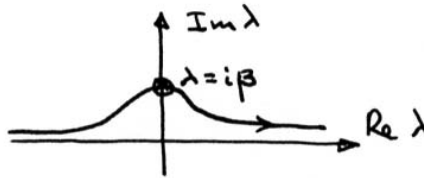
où λ_0 est le point selle:

$$s'(\lambda_0) = 0. \quad (10)$$

Remarquer que le point selle se trouve sur l'axe imaginaire: $\lambda_0 = i\beta$ et que le contour d'intégration doit ainsi être déformé pour passer sur λ_0 (voir Fig.). Montrer que la valeur de β est déterminée par la condition

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

[L'interprétation physique de cette grandeur est l'énergie par particule à température β^{-1} .]



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

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

Dans l'approximation du point selle,

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

où

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

On retrouve “miraculeusement” la distribution de Boltzmann à température β^{-1} .

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