Thermostatistique LU3PY403
TD1 : Quelques rappels de mécanique

Fabio Pietrucci & Alice Sinatra, Sorbonne Université

Janvier 2023

Dans ce TD, nous révisons les équations du mouvement et nous commençons à apprécier le rôle primordial joué par l'énergie dans l'étude de la dynamique et (plus tard) de la physique statistique.

1 Équations classiques du mouvement

1.1

Considérons un oscillateur harmonique classique unidimensionnel : écrivez l'équation du mouvement sous la forme de Newton. Réécrivez-la comme un système de deux équations différentielles du premier ordre en définissant formellement $p = m\dot{x}$ comme une variable distincte de x. Quel est le schéma d'intégration numérique le plus simple que l'on peut obtenir en discrétisant le temps ? Généraliser à un oscillateur tridimensionnel.

1.2

Considérons maintenant le problème de Kepler avec $U = -k/r$. Expliquer pourquoi on peut se réduire à l'étude du mouvement dans un plan. Écrivez les équations de Newton dans le plan en coordonnées cartésiennes et polaires. Pour apprécier l'avantage des formulations alternatives de la dynamique, écrivez également les équations d'Euler-Lagrange et de Hamilton en coordonnées polaires. En général, comment convient-il de choisir le système de coordonnées ?

2 Une première rencontre avec l'espace des phases

2.1

Tracez dans l'espace des phases (c'est-à-dire l'espace ayant pour axes les positions et les moments) la trajectoire d'un oscillateur harmonique unidimensionnel avec des conditions initiales données $x(t = 0) = x_0$, $p(t = 0) = 0$. Tracez une deuxième trajectoire pour le même système avec une énergie totale plus élevée. Lequel des deux systèmes explore une plus grande partie de l'espace des phases ?

2.2

Considérez la modification suivante : $\dot{x} = p/m$, $\dot{p} = -\gamma p - kx$. Indiquer qualitativement les changements dans les trajectoires de l'espace de phase par rapport à l'oscillateur harmonique. Quel type de système est représenté par de telles équations de mouvement ? Pourquoi est-il impossible d'obtenir de telles équations comme équations de Hamilton ?

2.3

En observant les trajectoires suivantes, obtenues par intégration numérique des équations de Hamilton et représentant des projections 2D d'un espace de phase à haute dimension ($\sim$ 100 atomes), déduisez quels systèmes représentent les séries (a), (b), (c) et (d).

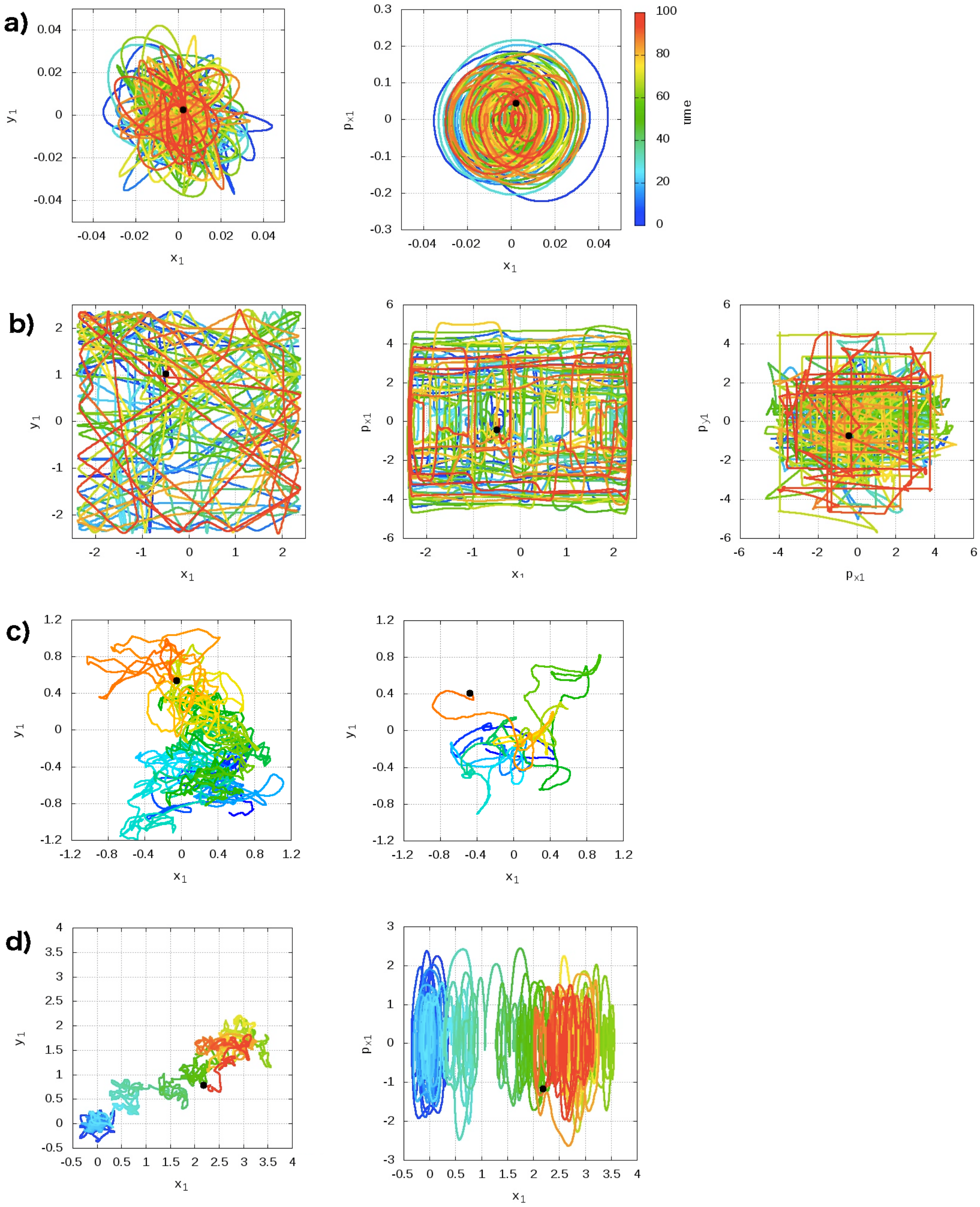

Figure 1: Chaque graphique dans les séries (a),(b), et (d) est une projection différente du même atome, tandis que les deux graphiques dans (c) correspondent à trajectoires de la même durée pour deux atomes différents. Les unités ne sont pas spécifiées.

3 Évolution temporelle des observables

3.1

Considérez une observable physique $A(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ fonction des $2n$ variables $(q_1, \ldots, q_n, p_1, \ldots, p_n)$ de l'espace de phase et telle que $\partial A/\partial t = 0$. Quelle relation entre A et H doit être satisfaite pour que $dA/dt = 0$ le long d'une trajectoire (solution des équations de Hamilton) ? Utilisez la relation pour démontrer la conservation de l'énergie, ainsi que la conservation de toute fonction de l'énergie $f(H)$.

3.2

Considérons maintenant le problème équivalent en mécanique quantique : rappelons d'abord l'équation de Schrödinger et l'expression formelle de l'opérateur d'évolution temporelle $U(t)$ tel que $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$. Ensuite exprimer $d\langle\hat{A}\rangle/dt$ (avec $\hat{A}$ une observable qui peux éventuellement dépendre explicitement du temps, et $\langle\hat{A}\rangle \equiv \langle\Psi|A|\Psi\rangle$) en utilisant le commutateur avec le Hamiltonien, et déduire la conservation de l'énergie pour une système isolé (où $\hat{H}$ ne dépends pas explicitement du temps) et de toute fonction de l'énergie.

3.3 (tiré du CC1 2023)

Considérez un système formé par N particules qui intéragissent à travers la force de Coulomb et à travers une repulsion à courte distance, cette dernière avec énergie potentielle ϵ/R^{12}, où R est la distance entre deux particules. Quel est le signe de ϵ ? Ecrivez l'hamiltonien et les équations d'Hamilton.