Université Paris 7 – Denis Diderot
Master 2 de Mathématiques

Année 2010/2011
Introduction à la mécanique quantique

Examen du 2 novembre 2010

1 Mécanique

Un point matériel de masse m glisse sans frottement à la surface d'une demi-sphère de rayon $R > 0$: $S_+ := \{(x = (x^1, x^2, x^3)| \; |x|^2 = R^2 \text{ et } x^3 \geq 0\}$ et est soumis à la force de gravitation $F = mg(0, 0, -1)$ et à la force de réaction de la surface. On notera $u(t) = (r(t)\cos\theta(t), r(t)\sin\theta(t), \sqrt{R^2 - r(t)^2})$ la position de ce point à un instant $t \in I \subset \mathbb{R}$.

1) La force de réaction de la surface est normale à la surface : pourquoi ? De quel potentiel dérive la force F ?

2) Donner les expressions de l'énergie cinétique $E_c(t)$, de l'énergie potentielle $E_p(t)$ et de l'énergie mécanique totale $E(t)$ du point à l'instant t.

3) Construire un lagrangien $L : [0, R] \times (\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}) \longrightarrow \mathbb{R}$ tel que les trajectoires décrites plus haut soient obtenues en prenant les points critiques $t \longmapsto (r(t), \theta(t))$ de l'action $\mathcal{L}[r, \theta] := \int_I L(r(t), \theta(t), \dot{r}(t), \dot{\theta}(t))dt$.

4) Ecrire les équations d'Euler–Lagrange de l'action $\mathcal{L}$. Observer s'il existe des quantités conservées au cours du temps pour ces solutions. Interpréter. (On ne cherchera pas à résoudre les équations).

2 Calcul des variations et champ magnétique

On considère un ouvert Ω de $\mathbb{R}^n$ et on se donne un lagrangien régulier

$$\begin{array}{rccc} L : & \Omega \times \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & (x, v) & \longmapsto & L(x, v) \end{array}$$

et l'action $\mathcal{L}[u] := \int_I L(u(t), \dot{u}(t))dt$ définie sur l'espace des chemins $\{u : I \longrightarrow \Omega\}$, où I est un intervalle de $\mathbb{R}$. On considère une 1-forme régulière $A = A_i dx^i$ sur Ω et on considère le lagrangien

$$\begin{array}{rccc} \widetilde{L} : & \Omega \times \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & (x, v) & \longmapsto & \widetilde{L}(x, v) \end{array}$$

où

$$\widetilde{L}(x, v) := L(x, v) + A_i(x)v^i.$$

Enfin on définit l'action $\widetilde{\mathcal{L}}[u] := \int_I \widetilde{L}(u(t), \dot{u}(t))dt$.

1) Ecrire l'équation d'Euler–Lagrange des points critiques de $\widetilde{\mathcal{L}}$ en fonction de L et de A. On pourra poser $F = \sum_{1 \leq i < j \leq n} F_{ij} dx^i \wedge dx^j = \frac{1}{2} F_{ij} dx^i \wedge dx^j := dA$.

2) (Etude d'un exemple.) On suppose que $n = 2$, $\Omega = \mathbb{R}^2$, $L(x, v) = \frac{1}{2}m|v|^2$ et on pose $B = F_{12}$. Ecrire les équations d'Euler–Lagrange pour les points critiques de $\widetilde{\mathcal{L}}$ dans ce cas et expliciter les solutions de ces équations.

3) On suppose dans cette question et les suivantes que la transformée de Legendre pour L est *non dégénérée*, c'est à dire que :

$$\begin{array}{ccc} \Omega \times \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \Omega \times (\mathbb{R}^n)^* \\ (x, v) & \longmapsto & \left(x, \frac{\partial L}{\partial v^i}(x, v) dx^i\right) \end{array}$$

est un difféomorphisme. On définit $H : \Omega \times (\mathbb{R}^n)^* \longrightarrow \mathbb{R}$ par : $H(x,p) = p_i v^i - L(x,v)$ pour tout (x,v,p) tel que $p_i = \frac{\partial L}{\partial v^i}(x,v)$. Démontrer que la transformée de Legendre pour $\widetilde{L}$ est également non dégénérée. On notera $\widetilde{p}_i$ les coordonnées de l'impulsion pour la transformée de Legendre de $\widetilde{L}$ et $\widetilde{H}$ l'hamiltonien qui est image de $\widetilde{L}$. Exprimer $\widetilde{p}$ en fonction de p et A et $\widetilde{H}$ en fonction de H et A.

4) On note $\widetilde{\omega} = d\widetilde{p}_i \wedge dx^i$ la forme symplectique sur $T^*\Omega = \Omega \times (\mathbb{R}^n)^*$. Expliciter les coordonnées du champ de vecteur hamiltonien $\xi_{\widetilde{H}}$ associé à $\widetilde{H}$ en fonction de H et de A.

5) On note

$$\begin{array}{rccc} \varphi : & T^*\Omega & \longrightarrow & T^*\Omega \\ & (x,p) & \longmapsto & (x, p + A_x). \end{array}$$

Calculer $\varphi^*\widetilde{H} = \widetilde{H} \circ \varphi$ et $\varphi^*\widetilde{\omega}$ en fonction de H, A et $\omega := dp_i \wedge dx^i$. Ecrire les équations de Hamilton pour $\varphi^*\widetilde{H}$ et $\varphi^*\widetilde{\omega}$, c'est à dire les équations du flot du champ de vecteur ζ sur $T^*\Omega$ défini par $\zeta \lrcorner \varphi^*\widetilde{\omega} + d\varphi^*\widetilde{H} = 0$. Interpréter.

6) Que peut-on dire dans les questions précédentes lorsque $A = dV$, où $V : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$?

3 Matériau paramagnétique

Un matériau paramagnétique [1] est modélisé par une assemblée de N moments magnétiques (numérotés par i, variant entre 1 et N). Pour tout i, la composante μ_i suivant la direction e_3 du moment magnétique numéro i ne peut prendre que deux valeurs : μ et $-\mu$. On notera $\mu_i = \mu\sigma_i$, où $\sigma_i = \pm 1$. On associera à l'état microscopique du matériau la collection $\sigma = (\sigma_1, \cdots, \sigma_N) \in \{-1,1\}^N =: \mathcal{P}$. On suppose que le matériau est soumis à un champ magnétique constant et uniforme, dirigé dans la direction e_3 et d'intensité B. L'énergie de l'ion numéro i est égale à $-B\mu_i = -B\mu\sigma_i$ et on néglige l'énergie d'interaction entre les différents ions (comme pour un gaz parfait), de sorte que l'on suppose que l'énergie totale du matériau dans l'état microscopique $\sigma \in \mathcal{P}$ est

$$H(\sigma) := \sum_{i=1}^{N} -B\mu_i = -\mu B \sum_{i=1}^{N} \sigma_i.$$

Pour toute loi de probabilité p sur $\mathcal{P}$ et pour toute observable $A : \mathcal{P} \longrightarrow \mathbb{R}$, on note

$$\langle A \rangle_p := \sum_{\sigma = (\sigma_1, \cdots, \sigma_N) \in \mathcal{P}} p(\sigma) A(\sigma).$$

1) On suppose uniquement dans cette question que $B = 0$, que le système est totalement désordonnée et que chaque état microscopique est équiprobable : à quelle loi de probabilité ces hypothèses corresondent ? Quelle est la valeur de l'entropie correspondante ?

2) On suppose désormais que le système est soumis à un champ magnétique B non nul (donc l'hamiltonien H est non nul). Pour $\beta > 0$, on pose

$$Z_N(\beta) := \sum_{\sigma \in \mathcal{P}} e^{-\beta H(\sigma)}.$$

Montrer que la fonction $\beta \longmapsto Z_N(\beta)$ peut se factoriser comme le produit de N fonctions identiques. [Indication : si on ne voit pas comment faire, on pourra commencer par considérer le cas $N = 1$, puis $N = 2$, etc.] En déduire quel est le nombre d'états microscopiques $\sigma \in \mathcal{P}$ tels que $H(\sigma) = -\mu B(N - 2q)$, où $q \in \mathbb{N}$ est compris entre 0 et N.

3) On suppose que N est très grand et se donne une valeur $U \in [-N\mu B, N\mu B]$, qui n'est pas proche[2] de $-N\mu B$ ou de $N\mu B$. On suppose que les ions peuvent échanger de l'énergie entre eux et que le système peut ainsi évoluer vers un état d'équilibre thermodynamique que l'on représente par une loi de probabilité

[1] solide ionique isolant dont certains ions ont un moment magnétique non nul

[2] par exmple au sens où $|U \pm N\mu B| > \alpha N\mu B$, où $0 < 1/N << \alpha < 1$

p sur $\mathcal{P}$. On suppose que le système a été préparé de manière « microcanonique », c'est à dire de façon telle que que son énergie totale soit dans l'intervalle $[U - \delta U, U + \delta U]$, où δU est une incertitude très petite (par exemple, du même ordre de grandeur que μB). Donner une estimation du nombre W d'états microscopiques autorisés au système (on rappelle la formule de Stirling $N! \simeq N^N e^{-N}\sqrt{2\pi N}$). Estimer l'entropie $S = k \log W$ en fonction de U (on pourra aussi poser $U = N\mu B u$).

4) Dans la suite, on considèrera u comme une variable continue : justifier ce point.

5) On considère deux morceaux de tailles différentes du matériau étudié jusqu'à présent : le premier système contient N_1 ions et est soumis à un champ magnétique constant égal à $B_1 e_3$, le deuxième système contient N_2 ions et est soumis à un champ magnétique constant égal à $B_2 e_3$ (où $N_1, N_2 >> 1$). On suppose que le premier système a initialement une énergie $\overline{U}_1$ et le deuxième, une énergie $\overline{U}_2$. Enfin les deux systèmes sont isolés adiabatiquement du reste du monde. On les met en contact thermique l'un avec l'autre (tout en restant chacun soumis aux champs magnétiques B_1 et B_2 respectivement) et on attend que l'équilibre thermodynamique s'établisse dans le système total. Montrer que la théorie de Boltzmann permet de calculer les énergies U_1 et U_2 des deux échantillons une fois que l'on est arrivé à l'équilibre (on se contentera de poser un système d'équations qu'on ne cherchera pas à résoudre). Justifier au passage pourquoi il est raisonnable de définir la température T d'un matériau paramagnétique par :

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U} = \frac{1}{N\mu B}\frac{\partial S}{\partial u}.$$

6) On considère à nouveau un seul morceau de matériau, comme dans les questions 2) à 4), soumis à un champ magnétique fixe B. On suppose que le matériau est à l'équilibre thermodynamique. Exprimer la température T en fonction de U et en déduire U en fonction de T.