Exercice sur la physique statistique

1 L'énergie libre

L'état microscopique à un certain instant d'un système mécanique avec un grand nombre de molécules est représenté par un espace de phase $\mathcal{P}$ muni d'une forme symplectique, d'une mesure de Liouville μ et d'un hamiltonien $H : \mathcal{P} \longrightarrow \mathbb{R}$. On s'intéresse à ses états d'équilibre, modélisés par une mesure de probabilité $d\nu = \rho d\mu$. On note

$$S(\rho) := -k \int_{\mathcal{P}} \rho \log(\rho\epsilon) d\mu$$

l'entropie associée à la densité ρ, où $\epsilon := \mu(\omega)$ est le volume de Liouville d'une cellule microscopique ω dans $\mathcal{P}$ et k est la constante de Boltzmann. On rappelle que la densité (de Boltzmann–Gibbs) correspondant à l'état d'équilibre pour une valeur moyenne de l'énergie $\langle H \rangle_\nu$ fixée, égale à U, est de la forme

$$\rho = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta H}, \tag{1}$$

où $\beta = 1/kT$ et où T est la température.
1) Déterminer la valeur de Z en fonction de β. Montrer que l'on peut calculer $\langle H \rangle_\nu$ directement en connaissant la fonction $\beta \longmapsto Z(\beta)$.
2) On note $F := U - TS$ l'*énergie libre*. Exprimer la valeur de F à l'équilibre (pour une valeur moyenne de l'énergie $\langle H \rangle_\nu$ fixée, égale à U) en fonction de $Z(\beta)$ et de β.
3) On ne suppose plus a priori que la mesure ρ est celle de Boltzmann–Gibbs. On suppose que ρ rend minimale l'énergie libre F à température fixée. Montrer que cela entraîne à nouveau que ρ est la mesure de Boltzmann–Gibbs.