

Théorème d'équipartition de l'énergie

Modèle classique.

① Supposons $E = \underbrace{\frac{1}{2m} p^2}_{E_c} + \underbrace{\frac{1}{2} k x^2}_{E_p}$: énergie totale

D'après la loi de Boltzmann, la densité de probabilité sur l'espace des phases $(x, p) \in \mathbb{R}^2$ est

$$P(x, p) dx dp = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E}{kT}} dx dp$$

vérifiant $\int_{\mathbb{R}^2} P(x, p) dx dp = 1$

$$\text{On a } \frac{E}{kT} = \frac{1}{2m kT} p^2 + \frac{1}{2 kT} k x^2$$
$$= X_2^2 + X_1^2$$

avec le changement de variables $(x, p) \leftrightarrow (X_1, X_2)$:

$$X_1 = \sqrt{\frac{k}{2kT}} x, \quad X_2 = \frac{1}{\sqrt{2m kT}} p$$

alors
$$E = \underbrace{kaT X_1^2}_{E_p} + \underbrace{kbT X_2^2}_{E_c}$$

et
$$P(x, p) dx dp = \frac{1}{Z} e^{-X_1^2 - X_2^2} dx_1 dx_2$$

$$= \left(\frac{1}{Z_1} e^{-X_1^2} dx_1 \right) \left(\frac{1}{Z_2} e^{-X_2^2} dx_2 \right)$$

avec $Z = Z_1 Z_2$ et Z_1, Z_2 choisis

tds que
$$\int \frac{1}{Z_j} e^{-X_j^2} dx_j = 1 \Leftrightarrow Z_j = \int e^{-X_j^2} dx_j$$
 pour $j=1,2$.

Alors

$$\langle E_c \rangle = kbT \langle X_2^2 \rangle$$

$$= kbT \int X_2^2 \frac{1}{Z_2} e^{-X_2^2} \frac{1}{Z_1} e^{-X_1^2} dx_1 dx_2$$

$$= kbT \left(\int X_2^2 \frac{1}{Z_2} e^{-X_2^2} dx_2 \right) \left(\int \frac{1}{Z_1} e^{-X_1^2} dx_1 \right)$$

$$= kbT \frac{1}{Z_2} \left(\int X_2^2 e^{-X_2^2} dx_2 \right) = kbT \frac{1}{2}$$

de même
$$\langle E_p \rangle = kaT \langle X_1^2 \rangle = \frac{1}{2} kbT$$