Série 5

On applique dans cette série les méthodes de la mécanique statistique à des systèmes en interaction avec un environnement. On étudie un oscilllateur harmonique en contact avec un bain thermique. L'oscillateur harmonique décrit les vibrations de molécules et de solides ; il est par ailleurs à la base de la plupart des méthodes perturbatives.

1 Oscillateur harmonique

On place une masse m accrochée à un ressort de raideur k et de longueur à vide nulle dans un bain thermique à la température T. Ce système représente par exemple une molécule diatomique en solution. On cherche à déterminer l'amplitude typique des fluctuations de la masse autour de sa position d'équilibre en fonction de la température.

1. On adopte une description quantique pour le ressort. Ecrire le hamiltonien correspondant en fonction des opérateurs position et impulsion, et de la pulsation propre $\omega = \sqrt{k/m}$.
2. Les énergies propres de ce hamiltonien sont $E_n = \hbar\omega(n + 1/2), n \in \mathbb{N}$. En déduire la fonction de partition canonique du système.
3. Calculer l'énergie moyenne du système.
4. On donne, pour les états propres $|n\rangle$ de l'oscillateur harmonique, $\langle n|\hat{x}^2|n\rangle = (2n + 1)\hbar/(2m\omega)$. En déduire la variance $\langle\hat{x}^2\rangle$ des fluctuations de position de la masse. Esquisser $\langle\hat{x}^2\rangle$ en fonction de T et commenter.
5. Que deviennent ces résultats dans la limite classique (de haute température) $k_\mathrm{B}T \gg \hbar\omega$? Montrer que l'énergie cinétique et l'énergie potentielle moyenne du ressort valent alors toutes deux $k_\mathrm{B}T/2$. Comment s'appelle ce résultat ?
6. *Question subsidiaire : Retrouver que* $\langle n|\hat{x}^2|n\rangle = (2n+1)\hbar/(2m\omega)$. *On pourra utiliser les opérateurs de création et d'annihilation et on n'hésitera pas à consulter l'article Wikipédia correspondant.*