Entropie statistique :
système à 2 états de même énergie

F. Kany. ISEN-Brest & La Croix-Rouge

Présentation

On considère un système Σ, isolé, constitué de n_{tot} particules pouvant se répartir entre deux états 1 et 2 de même énergie ε.

Exemple 1 : n_{tot} molécules de gaz parfait dans une enceinte de volume V que l'on sépare en deux compartiments de volume $V/2$; on appelle n_1 le nombre de particules dans le compartiment de gauche (état 1) et n_2 le nombre de particules dans le compartiment de droite (état 2). On a : $n_1 + n_2 = n_{tot}$.

Exemple 2 : n_{tot} spins sur un réseau (i.e. ayant une position fixe) pouvant avoir deux états (état 1 noté $\uparrow$ et état 2 noté $\downarrow$), sans interaction entre eux, sans champ magnétique extérieur ; on appelle n_1 le nombre de spins dans l'état $\uparrow$ et n_2 le nombre de particules dans l'état $\downarrow$. On a : $n_1 + n_2 = n_{tot}$.

On suppose que les particules sont discernables (c'est le cas dans l'exemple 2 [où les positions des spins sont fixes] ; c'est le cas dans l'exemple 1, si on peut voir - pour une particule donnée à l'avance - si elle se trouve dans le compartiment de gauche ou de droite).

Questions

1. Au total, combien y a-t'il de micro-états possibles ? On notera Ω_{tot} ce nombre.
2. Tous ces micro-états sont, a priori, équiprobables.
   Combien y a-t'il de micro-états particuliers Ω_{n_1} avec n_1 particules dans l'état 1 (et n_2 particules dans l'état 2) ?
3. On note $x = \frac{n_1}{n_{tot}}$.
   Avec Python, tracer $\ln(\Omega_{n_1})$ en fonction de x pour $n_{tot} \in [10, 200]$.
   (Pour chaque n_{tot} : on fait varier n_1 de 0 à n_{tot} ; on calcule x et Ω_{n_1}).
   Ce tracé correspond à l'entropie du système (voir Annexe).
   Pour quelle valeur $x = x_{max}$, Ω_{n_1} est-il maximum ?
   Cette valeur correspond à l'état d'équilibre du système (i.e. celui qui maximise l'entropie dans l'ensemble micro-canonique).
4. On note $P_{n_1} = \frac{\Omega_{n_1}}{\Omega_{tot}}$ la probabilité que Σ se trouve dans un des états Ω_{n_1}.
   - Avec Python, tracer P_{n_1} en fonction de x pour $n_{tot} \in [10, 200]$.
   - Normalement $\sum_{n_1} P_{n_1} = 1$ (ou $\int_0^1 P(x).\mathrm{d}x = 1$ par passage à la limite), pourtant la surface sous la courbe pour $n_{tot} = 10$ semble plus grande que la surface sous la courbe pour $n_{tot} = 200$. Expliquer.
   - Avec Python, tracer P_{n_1} en fonction de x pour $n_{tot} \in [1000, 2000]$.
   - Lorsque n augmente, que peut-on dire de P_{max} le maximum de P_{n_1} ?
   - Tracer $\log(P_{max})$ en fonction de $\log(n_{tot})$ pour $\log(n_{tot}) \in [1, 5]$; faire une régression linéaire et en déduire un équivalent de P_{max} et de Ω_{max}.

Annexe

Ensemble micro-canonique

En physique statistique, on définit l'ensemble micro-canonique comme l'ensemble des répliques fictives d'un système réel dont l'énergie (e_{tot}), le volume (V) et le nombre de particules (n_{tot}) sont fixés.

L'**hypothèse micro-canonique** consiste à supposer que, quand un système est **isolé** et en équilibre, celui-ci se trouve avec probabilités égales dans chacun de ses micro-états accessibles.

Lien avec l'entropie

On appelle entropie statistique, dans un état macroscopique donné, la quantité :

$$S = -k_B.\sum_{\ell} P_\ell.\ln(P_\ell)$$

D'après l'hypothèse micro-canonique $P_\ell = \frac{1}{\Omega}$ où Ω est la nombre de micro-états accessibles.
Donc : $S = -k_B.\sum_\ell P_\ell.\ln(P_\ell) = -k_B.\sum_{\ell=1}^{\Omega} \frac{1}{\Omega}.\ln\left(\frac{1}{\Omega}\right) = k_B.\Omega.\frac{1}{\Omega}.\ln(\Omega) = k_B.\ln(\Omega)$