Entropie statistique : système à N niveaux d'énergie

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

Présentation

Principe

On cherche tous les N-uplets $\{n_0, n_1, \ldots, n_{N-1}\}$ tel que $n_i \in \mathbb{N}$ vérifiant

$$\begin{cases} n_0 + n_1 + \cdots + n_{N-1} = n_{tot} \\ n_0.e_0 + n_1.e_1 + \cdots + n_{N-1}.e_{N-1} = e_{tot} \end{cases}$$

avec n_{tot}, e_i et e_{tot} des constantes données.

Contexte

Soit un système Σ, isolé, d'énergie totale e_{tot}, constitué de n_{tot} particules pouvant occuper N niveaux d'énergie e_i (notés e_0, e_1,... e_{N-1}).

Le niveau d'énergie e_i est occupé par n_i particules.

La conservation de la matière impose : $n_0 + n_1 + \cdots + n_{N-1} = n_{tot}$.

La conservation de l'énergie impose : $n_0.e_0 + n_1.e_1 + \cdots + n_{N-1}.e_{N-1} = e_{tot}$.

Exemple : $N = 4$ avec $e_0 = 0$, $e_1 = \varepsilon$, $e_2 = 2.\varepsilon$, $e_3 = 3.\varepsilon$, $n_{tot} = 3$ particules notées A, B, C et $e_{tot} = 3.\varepsilon$.

On a :

Niveaux d'énergie	Configurations									
$3.\varepsilon$		A	B	C						
$2.\varepsilon$					A	A	B	B	C	C
ε	ABC				B	C	A	C	A	B
0		BC	AC	AB	C	B	C	A	B	A

Si les particules A, B et C sont **discernables** (i.e. on peut différencier les particules), on a $\Omega = 10$ N-uplets possibles : {0,1,0,0}, {2,0,0,1} trois fois et {1,1,1,0} six fois.

Si les particules A, B et C sont **indiscernables** (i.e. rien ne peut différencier les particules), on a $\Omega = 3$ N-uplets possibles : {0,1,0,0}, {2,0,0,1} et {1,1,1,0}.

Les Ω N-uplets représentent les états microscopiques compatibles avec les conditions macroscopiques que l'on a imposées (ici : $n_{tot} = 3$ et $e_{tot} = 3.\varepsilon$).

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.

Dans l'exemple ci-dessus, pour des particules discernables, $\Omega = 10$ et la probabilité de chaque micro-état est $P_\ell = \frac{1}{10}$.

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 : $S = -k_B. \sum_\ell P_\ell. \ln(P_\ell) = -k_B. \sum_{\ell=1}^{\Omega} \frac{1}{\Omega}. \ln\left(\frac{1}{\Omega}\right) = k_B.\Omega.\frac{1}{\Omega}. \ln(\Omega) = k_B. \ln(\Omega)$

Dans l'exemple ci-dessus : $S = k_B. \ln(10)$ pour des particules discernables.

Algorithme

Ecrire une fonction `microetats(niveaux_energie,nbre_particules,energie_totale,indiscernable)` qui prend en arguments : `niveaux_energie` : la liste des niveaux d'énergie, `nbre_particules` : l'entier n_{tot}, `energie_totale` l'entier e_{tot} et `indiscernable` : un booléen indiquant le type de particules.

La fonction renvoie la liste des Ω N-uplets (sous le forme de listes) triée à l'aide de la fonction `sort`.

```
Exemple:
entrée
[0,1,2,3],3,3,True
sortie
[[0, 3, 0, 0], [1, 1, 1, 0], [2, 0, 0, 1]]

entrée
[0,1,2,3],3,3,False
sortie
[[0, 3, 0, 0], [1, 1, 1, 0], [1, 1, 1, 0], [1, 1, 1, 0], [1, 1, 1, 0], [1, 1, 1, 0],
 [1, 1, 1, 0], [2, 0, 0, 1], [2, 0, 0, 1], [2, 0, 0, 1]]
```