

TD 3 : Systèmes isolés - Ensemble microcanonique

1 Systèmes à deux niveaux

On considère N sous-systèmes discernables et sans interaction, pouvant chacun se trouver dans deux états d'énergie $e_1 = \varepsilon$ ou $e_2 = 4\varepsilon$. L'énergie totale des N sous-systèmes peut ainsi s'écrire $E = M\varepsilon$ où $M \in \mathbb{N}$.

On appelle n_1 (respectivement n_2) le nombre de sous-systèmes dans l'état d'énergie e_1 (respectivement e_2).

1. Si N est fixé, dans quel intervalle varie l'énergie E du système (*i.e.* $M_{\min} \leq M \leq M_{\max}$) ? Exprimer n_1 et n_2 en fonction de N et de M .

2. Soit $\Omega(E, N)$ le nombre de microétats accessibles d'énergie E . Exprimer Ω en fonction de N et M .

3. Entropie microcanonique.

a) Déduire l'expression de l'entropie microcanonique S en fonction de N et M (on utilisera la formule de Stirling $\ln N! \simeq N \ln N - N$ pour $N \gg 1$).

b) Calculer S pour $M = M_{\min}$, $M = M_{\max}$ puis $M = (M_{\min} + M_{\max})/2$. Interpréter ces résultats.

4. Température microcanonique.

a) Calculer la température T du système.

b) Tracer l'allure de S en fonction de M (*i.e.* de E), puis l'allure de T .

2 Contact thermique entre deux systèmes de spins

I. On considère un système \mathcal{S}_A isolé, constitué de $N = 4$ spins interagissant faiblement et soumis à un champ magnétique B . Lorsqu'un spin est aligné (\uparrow) avec le champ son énergie vaut $\epsilon_\uparrow = -\epsilon_0$ et lorsqu'il est anti-aligné (\downarrow) son énergie vaut $\epsilon_\downarrow = +\epsilon_0$, où $\epsilon_0 > 0$. On pose $E = M\epsilon_0$ où $M \in \mathbb{Z}$. On note n_\uparrow (resp. n_\downarrow) le nombre de spins up (resp. down).

1. a) Lorsque le champ magnétique est nul ($\epsilon_0 = 0$), quel est le nombre Ω_0 de microétats ?
b) Si $\epsilon_0 \neq 0$, quel est le nombre $\Omega(E, N)$ de microétats accessibles ?

2. Pour le système \mathcal{S}_A de $N = 4$ spins (s_1, s_2, s_3, s_4) , faire un tableau énumérant tous les microétats possibles $[(\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow), \dots]$ ainsi que l'énergie du système E_A correspondante.

3. On considère le cas où $E_A = -2\epsilon_0$.

- a) Quel est le nombre de microétats $\Omega(E_A = -2\epsilon_0, N = 4)$?
- b) Quelle est la probabilité de se trouver dans le microétat $(\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow)$?
- c) Quelle est la probabilité pour que le spin s_1 soit up : Proba($s_1 = \uparrow$) ?
- d) Quelle est la valeur moyenne d'un spin $\langle s_i \rangle$?

4. Reprendre les questions de **3** lorsque $E_A = 0$.

II. On considère maintenant un deuxième système \mathcal{S}_B constitué d'un unique spin s_5 .

1. Systèmes séparés. Dans un premier temps les deux sous-systèmes sont séparés. Le système \mathcal{S}_A a une énergie $E_A = -2\epsilon_0$. \mathcal{S}_B un énergie $E_B = +\epsilon_0$. Quels sont les nombres de microétats Ω_A et Ω_B des deux sous-systèmes ? Quel est le nombre de microétats Ω du système total ?

2. Contact thermique. Dans un second temps on établit le contact thermique : on autorise des échanges d'énergie entre les deux sous-systèmes. L'énergie totale $E_{\text{tot}} = E_A + E_B = -2\epsilon_0 + \epsilon_0$ reste constante mais les énergies de chaque sous-système peuvent fluctuer.

a) Quel est le nombre de microétats Ω' du système $\mathcal{S}_A + \mathcal{S}_B$?

b) Énumérer tous les microétats d'énergie $E_{\text{tot}} = -\epsilon_0$. Quelle est la probabilité pour que \mathcal{S}_A ait une énergie donnée : $\text{Proba}(E_A = M\epsilon_0)$ pour $M = 4, 2, 0, -2, -4$?

c) Quelle est la valeur moyenne de l'énergie de \mathcal{S}_A : $\langle E_A \rangle$? Et $\langle E_B \rangle$? Calculer les fluctuations de l'énergie de \mathcal{S}_A : $\langle E_A^2 \rangle - \langle E_A \rangle^2$?

3. Comment a varié l'entropie lorsqu'on a établi le contact thermique (de **2** à **3**) ?

3 Un modèle simple de gaz parfait

On considère N molécules d'un gaz contenues dans un volume V . On suppose que toutes les molécules ont la même énergie et l'on oublie les degrés de liberté liés aux vitesses des molécules, ainsi l'espace des phases se réduit à l'espace des positions.

On divise le volume V en p cases identiques, avec $N \gg p \gg 1$.

Un **microétat** est caractérisé par l'ensemble des positions (cases) des N molécules : (i_1, i_2, \dots, i_N) avec $i_k \in \{1, \dots, p\}$.

Un **macroétat** est caractérisé par les nombres d'occupation $\{N_1, \dots, N_p\}$ des p cellules (la cellule i contient N_i molécules).

1. Quel est le nombre Ω de microétats ?

2. Donner le nombre Ω_{N_1, \dots, N_p} de microétats dans le macroétat $\{N_1, \dots, N_p\}$. Quelle est la probabilité de se trouver dans ce macroétat ?

3. Macroétat le plus probable. Montrer que la configuration des N_m qui maximise Ω_{N_1, \dots, N_p} est $N_1 = N_2 = \dots = N_p$.

Indications :

(i) On recherchera le maximum de $\ln(\Omega_{N_1, \dots, N_p})$, fonction des p variables, sans oublier la contrainte $N = N_1 + \dots + N_p$.

(ii) On utilisera la formule de Stirling $\ln N! \simeq N \ln N - N$ pour $N \gg 1$.

4. On imagine maintenant que le volume V de départ est séparé en deux volumes égaux V_1 et V_2 . Si toutes les molécules du gaz sont dans le volume V_1 , quel est le macroétat le plus probable ? Quel est le nombre de microétats associés à ce macroétat ?

5. Comparer les probabilités des macroétats des questions **3** et **4**. Quelle expérience peut-on interpréter à l'aide de ce résultat ?