PHY2215 - HIVER 2009

Cours 01 – Multiplicité des états

Survol

- Entropie
- Système de particules à deux états
- Distributions binomiale et générale
- Moyenne, variance
- Grandes valeurs de N
- approximation de Sterling

L'entropie

Vous connaissez des quantités comme

- l'énergie E
- la pression p
- la température T

…ou vous pensez la connaître!

Que connaissez-vous de l'entropie S?

Principes de la thermodynamique:

0. si un système A est en équilibre avec B, et B avec C, alors A est en équilibre avec C (i.e. leur température est la même)
1. **conservation de l'énergie (fondamental en physique)**
2. **tout processus tend à augmenter l'entropie**
3. Quand $T \to 0$, $S \to S_0$ (S_0 indépendant de tout paramètre)

L'entropie est un :

- Paramètre associé au «nombre d'états accessibles au système»
    - «nombre d'états»: nombre de façons équivalentes de disposer un système
    - «accessibles au système»: un système ne peut accéder à n'importe quel état, par exemple parce que son énergie est fixe, parce qu'il est isolé, parce que l'énergie est conservée, parce que la mécanique quantique l'interdit
- Dans les trois prochains cours, nous allons entre autres montrer par quelques exemples que:
    - Pour un système constitué d'un grand nombre de particules, le maximum de probabilité est très prononcé;
    - Le système se trouve ainsi toujours très proche de son maximum;
    - Lorsqu'on met deux systèmes en contact, ils échangent de l'énergie de sorte à tendre vers l'état le plus probable, celui avec la plus grande multiplicité

Système de particules à deux états

Illustration du 2e principe avec "pile ou face":
- l'état ne change pas "l'énergie" des pièces
- toutes les pièces reposent sur la table avec la même énergie
- de ce point de vu, 100 faces, 0 piles est aussi *probable* que 50-50
- tous les états sont également probables, mais certains états équivalents sont beaucoup plus nombreux

Supposons que 100 pièces sont sur une table à l'état "face";
- on les jette toutes en l'air;
- il y a une chance sur 2^{100} qu'elles reviennent toutes dans le même état;

Les chances sont beaucoup plus nombreuses d'arriver à une combinaison proche de 50 piles, 50 faces. Pourtant, pour les pièces, il n'y a pas de changement d'énergie entre l'état initial et l'état final. Qu'est-ce qui guide le système?

Calculons les probabilités de manière générale de façon à comprendre comment se comprendre comment se comporte la distribution. Soit N pièces lancées sur une table
- n_1 piles, n_2 faces, $N = n_1 + n_2$
- $m = excès = n_1 - n_2 = 2n_1 - N$

Distribution binomiale
- p: probabilité d'obtenir pile
- q: probabilité d'obtenir face

La probabilité d'obtenir une séquence particulière est

$$\underbrace{pppp}_{n_1\ fois}....\underbrace{qqqq}_{n_2\ fois}... = p^{n_1} q^{n_2}$$

mais il y a plusieurs séquences équivalentes (mêmes n_1, n_2)

e.g. $pqqppqpq....pqpppqq... = p^{n_1} q^{n_2}$

Quelle est la multiplicité (nombre d'états équivalents? La réponse nous est donnée par les *permutations.* Pour des pièces ***non-identiques***
- 1 pièce, 1 seule façon de la disposer
- 2 pièces, 2 dispositions
- 3 pièces, 6 dispositions
- N pièces, N! dispositions possibles

Mais s'il n'y a que ***deux types de pièces distinguables***, il y aura $n_1!$, $n_2!$ permutations inutiles. Ainsi, pour N pièces, il y a $N!/n_1!n_2!$ permutations possibles. Revenons à notre exemple de 3 pièces (N=3), mais en supposant qu'il n'y a que 2 types de pièces distinguables : il n'y a alors que 3 dispositions possibles, *la multiplicité est de 3*

Distribution binomiale

La probabilité d'avoir n_1 piles, n_2 faces est donnée par

$$(p+q)^N = \sum_{n_1=0}^{N} \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1}$$

... aussi appelée la distribution binomiale car

$$P_N(n_1, n_2 = N-n_1) = \frac{N!}{n_1!n_2!} p^{n_1} q^{n_2} = \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1}$$

Remarque: p peut être différent de q, mais $p+q=1$, donc

$$(p+q)^N = 1^N = 1 = \sum_{n_1=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n}, \quad n = n_1$$

Considérons le cas de trois pièces : $p = q = ½$ et N = 3. Les différentes probabilités sont
$P_3(n=0) = 1/8$, $P_3(n=1) = 3/8$, $P_3(n=2) = 3/8$, $P_3(n=3) = 1/8$

De manière générale, pour une distribution de probabilité quelconque, il faut que:

- $\sum_{n=0}^{N} P_N(n) = 1$
- le système soit complètement décrit
- tous les états soient équiprobables

Moyenne

Variance

$$\overline{(\Delta n)^2} \equiv \overline{(n-\bar{n})^2} = \overline{\left(n^2 - 2\,n\bar{n} + \bar{n}^2\right)} = \overline{n^2} - \bar{n}^2$$

$$\overline{n^2} = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!}\left[n^2\, p^n\right] q^{N-n} = \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!}\left[p\frac{\partial}{\partial p}\right]^2 p^n q^{N-n}$$

$$= \left[p\frac{\partial}{\partial p}\right]^2 \sum_{n=0}^{N} \frac{N!}{n!(N-n)!} p^n q^{N-n} = \left[p\frac{\partial}{\partial p}\right]^2 (p+q)^N = \left[p\frac{\partial}{\partial p}\right]\left[p\frac{\partial}{\partial p}\right](p+q)^N$$

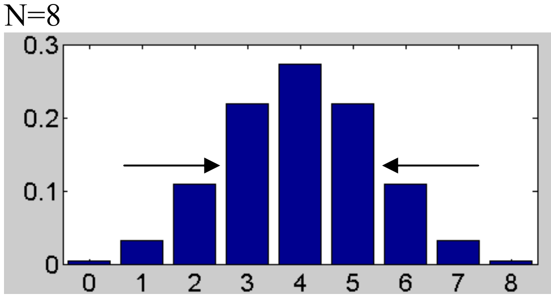
$$= p\frac{\partial}{\partial p}\left[pN(p+q)^{N-1}\right] = p\left[N\underbrace{(p+q)}_{=1}{}^{N-1} + pN(N-1)\underbrace{(p+q)}_{=1}{}^{N-2}\right]$$

$$= p\left[N + pN(N-1)\right] = (pN)^2 + p(1-p)N = (pN)^2 + pqN = \bar{n}^2 + pqN$$

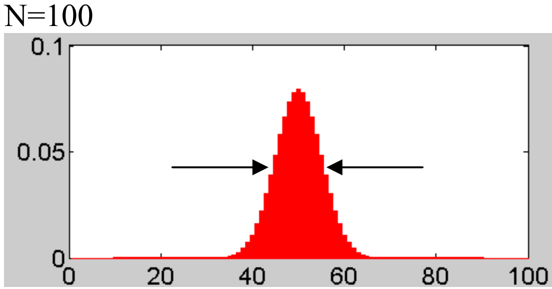
- si on lance plusieurs fois *N* pièces
- si on détecte *N* particules*
- s'il y a *N* désintégrations* dans un échantillon
- s'il tombe *N* gouttes d'eau dans une flaque*...

→ *N* fluctuera ~ $N^{1/2}$ entre chaque essai ou mesure
→ la fluctuation relative diminuera en $1/N^{1/2}$

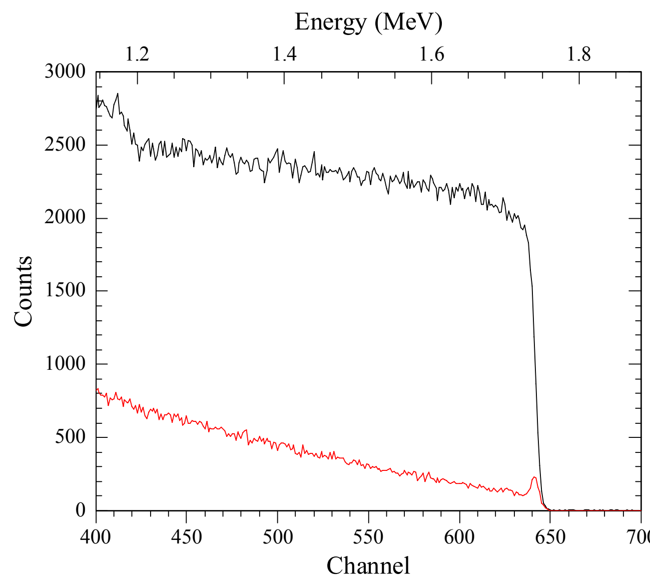
N=8

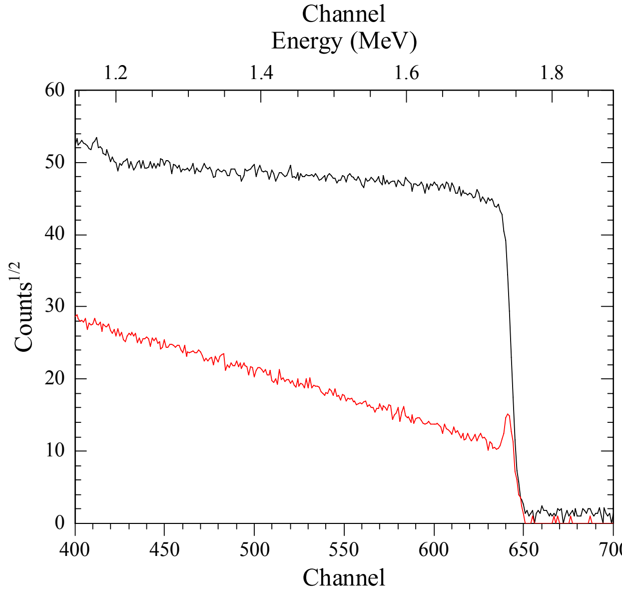


N=100



N=10^{23} ??



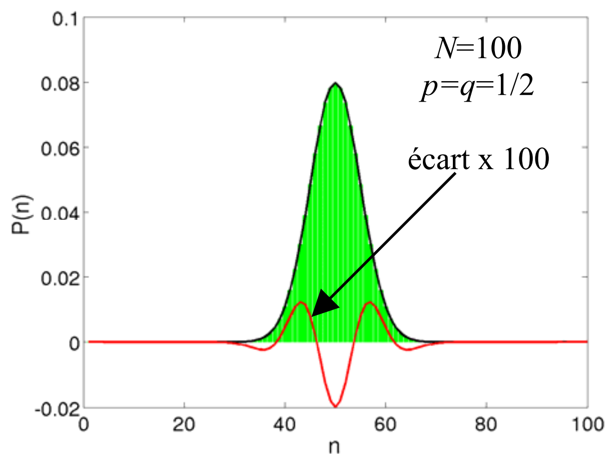


Grandes valeurs de N

Lorsque N devient grand, $P_N(n)=\dfrac{N!}{n!(N-n)!}p^n q^{N-n}$ devient difficile à calculer. Au prochain TP, on dérivera l'approximation de Sterling, $N!\approx\sqrt{2\pi N}(N/e)^N$, qu'on utilisera pour vous démontrer que

$$P_N(n)\approx\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(\frac{-(n-\overline{n})^2}{2\sigma^2}\right),\quad \underbrace{\sigma=\sqrt{Npq}}_{\text{écart type}}=\sqrt{\overline{(\Delta n)^2}}$$

... une **gaussienne**!



Attention! Dans le processus, n devient une variable continue et

$$\overline{f(u)}=\sum_{n=0}^{N}f(u_n)P_N(n)\quad\text{devient}\quad\int_{-\infty}^{\infty}f(u(n))P(n,N)dn$$

À retenir

- multiplicité
- distribution binomiale
- grand nombres (approximation continue)
- thermo-stat : compromis entre minimisation de l'énergie et maximisation des états accessibles

Exemples de projets :

- moteurs / réacteurs
- atmosphère
- changements de phase
- magnétisme frustré
- expansion de l'Univers
- cristaux, glace
- réactions chimiques
- efficacité énergétique
- effet de serre
- thermodynamique des trous noirs
- géophysique
- cryogénie / BEC
- piles à combustible
- pompes à chaleur
- surfusion
- fusion thermonucléaire
- plasma quark-gluons

… étonnez-moi!