

République Algérienne démocratique et populaire
Ministère de l'enseignement supérieur
et de la recherche scientifique

Universitaire de Relizane

Faculté des sciences et technologie

Département de chimie

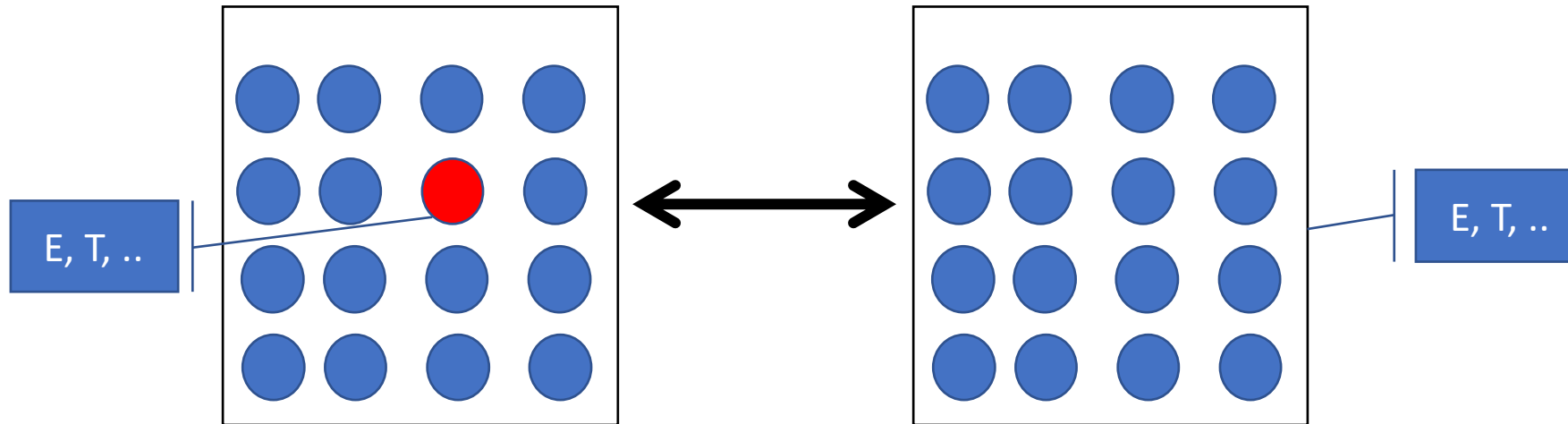
Thermochimie et Thermodynamique

Filière « Chimie »

Master 1 « Chimie des matériaux »

De la thermodynamique classique vers la thermodynamique statique

- Lorsqu'un système est composé d'un grand nombre d'éléments identiques, vous pouvez utiliser le comportement observé d'un élément individuel pour prédire les propriétés de l'ensemble du système, ou inversement, vous pouvez utiliser les propriétés observées de l'ensemble du système pour en déduire les comportements probables des éléments individuels



- L'étude de cette traduction bidirectionnelle entre le comportement des éléments individuels et les propriétés du système dans son ensemble s'appelle la mécanique statistique.
- À l'aide d'outils statistiques, nous pouvons relier les propriétés d'un système macroscopique aux comportements de ses éléments individuels, et ainsi obtenir une meilleure compréhension des deux
- L'idée de base de la thermodynamique statistique est simple: d'une part, nous avons la mécanique newtonienne et quantique et nous savons que les molécules doivent y adhérer, et d'autre part nous savons que les systèmes constitués de nombreuses molécules peuvent être correctement décrits par phénoménologique (ou classique)

Problème de l'étude microscopique sur les bases de la mécanique statique

La thermodynamique statistique permet de faire une liaison entre le monde macroscopique et le monde microscopique, on peut définir l'état d'un système la macroscopique (macro-état) avec des variables thermodynamiques indépendantes

Exemple

d'un gaz parfait, on peut définir son état avec (P, T, V, n) il suffit de fixer trois paramètres et le quatrième paramètre est obtenu à partir de l'équation d'état des gaz parfaits. Peu de paramètres sont donc nécessaires pour déterminer un macro-état

Si l'on étudie le système au niveau de ses constituants, on s'intéresse au monde microscopique (Thermodynamique statistique). Il convient à ce stade d'analyser les caractéristiques principales des constituants élémentaires de ce corps tels que nous venons de les citer :

- Ils sont extrêmement petits. Cela signifie que leurs propriétés sont souvent dominées par les phénomènes quantiques
- Ils sont extrêmement nombreux. Leur évolution ne peut donc pas être traitée individuellement mais comme un élément particulier d'un ensemble aux propriétés plus globales

L'état complet du système mécanique à un instant donné, codé mathématiquement comme un point de phase (mécanique classique) ou un vecteur d'état quantique pur (mécanique quantique). Une équation de mouvement qui fait avancer l'état dans le temps: les équations de Hamilton (mécanique classique) ou l'équation de Schrödinger (mécanique quantique). En utilisant ces deux concepts, l'état à tout autre moment, passé ou futur, peut en principe être calculé.

déterminisme/indéterminisme.

La sensibilité aux conditions initiales signifie que le comportement d'un système peut diverger rapidement de conditions légèrement différentes, ce qui les rend imprévisibles.

L'une des découvertes majeures du XXe siècle était que les **systems déterministes pouvaient être intrinsèquement imprévisibles**. Dans les années 1960, le météorologue **Edward Lorenz** a observé que des variations infimes des valeurs initiales des variables de son modèle météorologique informatique à douze variables pouvaient entraîner des modèles météorologiques extrêmement divergents

Deux états différant par des quantités imperceptibles peuvent éventuellement évoluer vers deux états considérablement différents . Si, alors, il y a une erreur quelconque dans l'observation de l'état présent et dans tout système réel de telles erreurs semblent inévitables - une prédiction acceptable d'un état instantané dans le lointain l'avenir pourrait bien être impossible

La mécanique quantique est régit par une équation linéaire l'équation de Shrodinger déterministe par exemple le cas de l'équation d'évolution de la fonction d'onde $\varphi_i(r, t)$ qui représente l'état du système à l'instant t . Cette fonction d'onde et représenté par un ensemble E de systèmes identiques rigoureusement préparés dans les mêmes conditions initiales $\varphi_i(r, t)$. Si on mesure une propriété X du système à n'importe quelle l'instant t , on trouve une distribution aléatoire des valeurs (x) où la probabilité $P(x, t)$ peut se calculer à partir de la fonction $\varphi_i(r, t)$.. On a donc bien des résultats aléatoires.

Alors on peut dit que la petite changement sur les conditions initiaux se retrouvera comme une petite différence des distributions de probabilité. Ceci est une conséquence de la linéarité de l'équation de Shrodinger alors que le chaos déterministe est une conséquence de la non linéarité de certaines équations

Références bibliographiques

- [1] K. Stowe, An introduction to thermodynamics and statistical mechanics, Cambridge University Press 2007.
- [2] C. Ngô, H. Ngô, Physique statistique-3ème édition, Dunod 2008.
- [3] J. Gibbs, Elementary Principles in Statistical Mechanics (New York: Charles Scribner's Sons), (1902).
- [4] G. Betz, Sensitive dependence on initial conditions, Prediction or Prophecy? The Boundaries of Economic Foreknowledge and Their Socio-Political Consequences, (2006) 131-144.