

# L'Ensemble Microcanonique

## 1 Défauts dans un cristal : ensemble microcanonique

Dans un cristal parfait, les atomes occupent les sites d'un réseau périodique (cubique par exemple). Certains atomes peuvent sortir de leur position d'équilibre pour occuper des sites dits interstitiels (situés par exemple entre deux atomes) mais avec une pénalité en énergie  $+dE$ .

Un cristal contient  $10^{24}$  atomes pouvant occuper des sites interstitiels, et  $dE = 0.1\text{eV}$ . On crée une population de sites interstitiels d'énergie totale  $4000J$ . Ce système est isolé de l'extérieur.

On observe l'état d'un des atomes. Quelle est la probabilité de l'observer dans sa position interstitielle ?

Pour un système isolé en équilibre, tous les micro-états accessibles sont également probables.

Tout d'abord, nous observons que  $E = 4000J \implies \frac{4000J}{0.1\text{eV}} = 2.5 \times 10^{23}$  atomes occupent des sites interstitiels.

Ainsi, la probabilité qu'un atome occupe un site interstitiel est  $\frac{2.5 \times 10^{23}}{10^{24}} = \frac{1}{4}$ .

## 2 Fluctuations de densité dans un gaz parfait

Une bouteille de 1 litre contient une mole de gaz, et elle est bien isolée de l'extérieur. Ce gaz est supposé parfait, ce qui signifie que, si l'on néglige la force de pesanteur, l'énergie est indépendante des positions des molécules du gaz.

On regarde à un instant donné un petit volume de la bouteille qui est un cube de  $0.01$  micron de côté. Quelle est la probabilité qu'il n'y ait aucune molécule dans ce volume ?

Encore une fois, nous avons un système isolé en équilibre, donc tous les micro-états accessibles sont également probables.

Soit  $X_i$  une variable aléatoire désignant la position de la particule  $i$ . Nous supposons que les  $X_i$  sont indépendants et identiquement distribués.

Nous savons que  $X_i$  suit une **distribution uniforme** sur le volume de la bouteille car l'énergie est indépendante des positions des molécules de gaz.

Par indépendance, la probabilité qu'il n'y ait pas de molécules dans ce volume est le produit des probabilités que chaque particule individuelle ne soit pas dans le volume.

$$\left(1 - \left(\frac{0.01\mu\text{m}}{10^5\mu\text{m}}\right)^3\right)^{6.022 \times 10^{23}} \leq e^{-6.022 \times 10^{16}} \approx 10^{-260}$$

Nous avons utilisé l'inégalité

$$(1 - x)^n \leq e^{-nx}$$

qui est vraie pour  $n \geq 1$  et  $-1 \leq x \leq 1$ .

### 3 Information génétique et cerveau

L'ADN humain contient environ 3 milliards de paires de bases. Le cerveau humain contient environ  $10^{11}$  neurones, chacun étant connecté à environ  $410^3$  synapses.

On suppose pour simplifier que les synapses peuvent être seulement de deux types, excitatrices ou inhibitrices. Y a-t-il assez d'information dans l'ADN pour coder l'état de chaque synapse ?

On calcule la quantité d'information dans les deux canaux d'information en utilisant l'entropie de Shannon.

L'ADN est constitué de paires de bases A-T ou C-G qu'on suppose équiprobables. On a

$$H_1 = \sum_{\text{pair}} \frac{1}{2} \log(2) = \frac{3 \cdot 10^9}{4} \log(2) \approx 2,26 \cdot 10^8$$

Dans l'approximation où chaque synapse peut être de deux types qu'on suppose équiprobables, on a

$$H_2 = \sum_{\text{synapse}} \frac{1}{2} \log(2) = \frac{10^{11} \cdot 410^3}{2} \log(2) \approx 2,07 \cdot 10^{18}$$

On en conclue qu'il n'y a pas d'information dans l'ADN pour coder l'état de chaque synapse.