

EXAMEN PARTIEL DE PHYSIQUE STATISTIQUE

Mardi 6 mars 2018

*Durée de l'épreuve : 2 heures.**L'utilisation de documents, téléphones portables, calculatrices, ... est interdite.*

Recommandations :

Lisez attentivement l'énoncé et **récrivez** *succinctement* et *clairement* votre réponse.Vérifiez vos calculs (analyse dimensionnelle, etc) ; n'oubliez pas de vous **relire**.**Question de cours : distribution canonique (~ 20mn)**

On considère un système \mathcal{S} en contact avec un thermostat \mathcal{T} , l'ensemble étant isolé. On note ℓ un microétat d'énergie ε_ℓ de \mathcal{S} . On note $\Omega(\varepsilon)$ le nombre de microétats accessibles lorsque \mathcal{S} a une énergie ε . De même, on note Λ un microétat d'énergie E_Λ de \mathcal{T} , et $\Omega_{\mathcal{T}}(E)$ désigne le nombre de microétats accessibles pour le thermostat ayant une énergie E . On pourra aussi avoir besoin de $\Omega_{\mathcal{S} \otimes \mathcal{T}}(E_{\text{tot}})$, le nombre de microétats accessibles du système complet.

1/ Quel est le rôle du thermostat ? Quelle condition doivent satisfaire ε_ℓ et E_Λ ? Quelle est la définition de la température canonique (notée T par la suite) ?

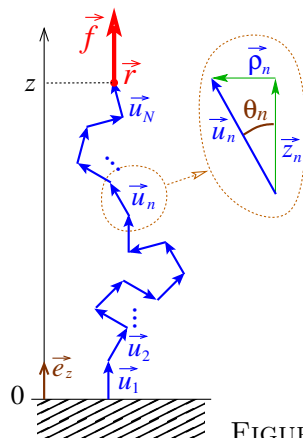
2/ Partant du postulat fondamental de la physique statistique, que l'on rappellera, exprimer la probabilité P_ℓ^C d'occupation d'un microétat du **système**, \mathcal{S} , en fonction des nombres de microétats accessibles introduits plus haut.

3/ En utilisant la condition du 1/, retrouver la distribution canonique.

4/ Rappeler les définitions de la fonction de partition Z et de l'énergie libre F .

5/ Démontrer la relation entre l'énergie moyenne $\bar{\varepsilon}^C$ et la fonction de partition.

6/ Rappeler la définition de l'entropie statistique. Dédurre l'expression de l'entropie canonique S^C en fonction de F et $\bar{\varepsilon}^C$.

Problème : Élasticité de la molécule d'ADN (~ 1h40mn)FIGURE 1 : Polymère de N monomères.

Il y a quelques années, des expérimentateurs ont mené une étude sur l'élasticité de l'ADN en fixant une molécule d'ADN sur une surface et en tirant dessus.

On peut modéliser la molécule d'ADN, un « polymère », comme une longue chaîne de N monomères, chacun repéré par un vecteur \vec{u}_n de longueur $\|\vec{u}_n\| = a$ (figure 1). Un *microétat* correspond donc à l'ensemble des directions $\{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_N\}$. Le monomère \vec{u}_n fait un angle θ_n avec l'axe vertical. La molécule est à l'équilibre thermodynamique avec une solution à température T .

A. Modèle sans interaction.— Dans cette partie, on suppose que les monomères sont sans interaction. L'énergie de la molécule sur laquelle on exerce une force $\vec{f} = f \vec{e}_z$ est

$$H(\{\vec{u}_n\}) = E_{\text{pot}} = -\vec{f} \cdot \vec{r} = -\sum_{n=1}^N \vec{f} \cdot \vec{u}_n = -fa \sum_{n=1}^N \cos \theta_n, \quad (1)$$

où \vec{r} est l'extrémité de la chaîne (nous n'incluons pas d'énergie cinétique).

1/ Justifier que la fonction de partition canonique de la molécule est donnée par

$$Z(f) = C \int_{\|\vec{u}_1\|=a} d^3\vec{u}_1 \dots \int_{\|\vec{u}_N\|=a} d^3\vec{u}_N e^{-\beta H(\{\vec{u}_n\})} \quad (2)$$

où $\beta \stackrel{\text{def}}{=} 1/(k_B T)$ et C est une constante indépendante de f sans importance. Calculer explicitement cette intégrale (indication : utiliser la séparabilité et passer en coordonnées sphériques).

2/ On s'intéresse à l'élongation z , dans la direction de la force (cf. figure). $F(f)$ est l'énergie libre de la molécule. Montrer la relation générale donnant la moyenne canonique de l'élongation :

$$\ell \stackrel{\text{def}}{=} \bar{z}^c = -\frac{\partial F(f)}{\partial f}. \quad (3)$$

3/ Dédurre que ℓ/L , où $L = Na$, s'exprime à l'aide de la fonction de Langevin $\mathcal{L}(\xi) \stackrel{\text{def}}{=} \coth \xi - 1/\xi$ (on rappelle que $\coth \xi \simeq 1/\xi + \xi/3$ pour $\xi \rightarrow 0$). Quelle est l'échelle d'énergie caractéristique qu'on doit comparer à $k_B T$ afin de définir les deux régimes de « petite » et de « grande » force ?

4/ Régime de « petite » force ($f \rightarrow 0$) : **loi de Hooke**.— Montrer que la force est proportionnelle à l'élongation. Quelle est l'origine physique de la force de rappel exercée par le polymère (suggestion : commenter la dépendance en température) ?

5/ Régime de « grande » force ($f \rightarrow \infty$).— Donner le *comportement* limite de ℓ/L avec f .

6/ Tracer *soigneusement* ℓ/L en fonction de f .

B. Modèle avec interaction.— Dans le régime proche de l'élongation maximale, le modèle sans interaction ne décrit pas correctement les résultats expérimentaux (cf. Figure 2). En plus du terme d'énergie potentielle (1), on introduira dorénavant l'énergie d'interaction

$$E_{\text{int}} = J \sum_{n=1}^{N-1} \left(1 - \frac{\vec{u}_{n+1} \cdot \vec{u}_n}{a^2} \right) \quad (4)$$

qui favorise l'**alignement** des monomères voisins (comme sur la figure 1). L'énergie intervenant dans la fonction de partition (2) est maintenant $H = E_{\text{int}} + E_{\text{pot}}$. Il n'est plus possible de calculer l'intégrale multiple de (2) (à cause des contraintes $\|\vec{u}_n\| = a$). On propose un traitement approché dans le régime proche de l'élongation maximale. Dans ce cas, on peut décomposer chaque vecteur \vec{u}_n selon une composante verticale et une composante perpendiculaire $\vec{\rho}_n \in \mathbb{R}^2$ (cf. figure 1). En supposant $\|\vec{\rho}_n\| \ll a$, on obtient $\vec{u}_{n+1} \cdot \vec{u}_n \simeq a^2 - \frac{1}{2}(\vec{\rho}_{n+1} - \vec{\rho}_n)^2$.

1/ En développant le terme d'énergie potentielle, montrer que la fonction de partition

$$Z(f) \simeq C \int_{\mathbb{R}^2} d^2\vec{\rho}_1 \dots \int_{\mathbb{R}^2} d^2\vec{\rho}_N e^{-\beta H} \quad \text{avec } H \simeq -Nfa + \frac{J}{2a^2} \sum_{n=1}^{N-1} (\vec{\rho}_{n+1} - \vec{\rho}_n)^2 + \frac{f}{2a} \sum_{n=1}^N \vec{\rho}_n^2 \quad (5)$$

décrit un ensemble de $2N$ oscillateurs harmoniques classiques *couplés* (sans terme cinétique).

2/ On peut effectuer un changement de variables dans l'intégrale sur les $\vec{\rho}_n = (x_n, y_n)$: on pose $X_k \stackrel{\text{def}}{=} (1/\sqrt{N}) \sum_n x_n e^{-ikn}$ et $Y_k \stackrel{\text{def}}{=} (1/\sqrt{N}) \sum_n y_n e^{-ikn}$ avec $k \in [-\pi, +\pi]$. L'énergie s'exprime alors comme $H \simeq -Nfa + \frac{1}{2} \sum_k \Omega_k(f)^2 [X_k^2 + Y_k^2]$ avec $\Omega_k(f)^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{4J}{a^2} \sin^2(k/2) + \frac{f}{a}$. En admettant que $\int d^2\vec{\rho}_1 \cdots \int d^2\vec{\rho}_N = \prod_k \int_{\mathbb{R}} dX_k \int_{\mathbb{R}} dY_k$ dans (5), montrer que

$$Z(f) \simeq C e^{N\beta fa} \prod_k \frac{2\pi}{\beta \Omega_k(f)^2}. \quad (6)$$

Quelle interprétation physique pouvez-vous donner aux nouvelles coordonnées (X_k, Y_k) et aux Ω_k ? En utilisant $\sum_k \rightarrow N \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{dk}{2\pi}$, déduire une expression de l'énergie libre $F(f)$, sous une forme intégrale.

3/ Déduire l'élongation moyenne sous la forme d'une intégrale. Calculer explicitement cette intégrale (cf. annexe) et montrer que

$$\frac{\ell}{L} \simeq 1 - \frac{k_B T/a}{\sqrt{f(f + 4J/a)}} \quad (7)$$

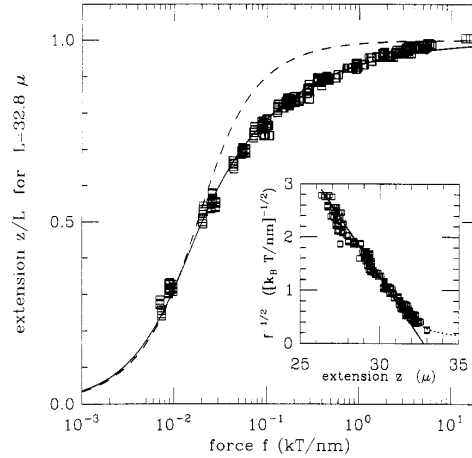


FIGURE 2 : Extension ℓ (notée « z » sur la figure) en fonction de la force f pour une molécule d'ADN de $L \simeq 33 \mu\text{m}$. La ligne en tirets correspond au modèle sans interaction. En insert : $1/\sqrt{f}$ est tracée en fonction de l'extension ℓ . Figure tirée de « *Stretching DNA* », J. F. Marko & E. D. Siggia, *Macromolecules* **28**, p. 8759 (1995).

4/ Vérifier qu'en faisant $J = 0$, on retrouve bien le résultat du modèle sans interaction (partie A). Quelle est la relation entre la force f et l'élongation relative ℓ/L dans le régime où l'interaction est importante $J \gg fa$ (avec $fa \gg k_B T$ pour justifier l'approximation de grande élongation)? Comparer aux données expérimentales (en particulier l'insert de la figure 2).

A.N. : L'expérience donne une longueur de persistance $\xi = 53 \text{ nm}$ (longueur sur laquelle se courbe la molécule). En écrivant $J/k_B T = \xi/a$ et en prenant $a = 3.4 \text{ nm}$ (périodicité de la structure en double hélice de l'ADN) et $T = 300 \text{ K}$, déduire J en eV.

Annexe

- Une intégrale

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{A - \cos k} = \frac{1}{\sqrt{A^2 - 1}} \quad \text{pour } A > 0.$$

- Constante de Boltzmann : $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$. Charge de l'électron : $|q_e| = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$.