Examen de Physique Statistique : Conformation d'un polymère à 2 dimensions.

M1PC, Université Joseph Fourier, Mars 2009

Nous pouvons considérer un polymère comme $N+1$ bâtonnets rigides (monomères) reliés par leurs extrémités les uns aux autres (fig.1). Nous pouvons caractériser la conformation d'un polymère par la donnée des N angles $\{\theta_1, \theta_2, ..., \theta_N\}$, $\theta_i \in [-\pi, \pi]$. Il existe une élasticité entre bâtonnets qui tend à les aligner les uns parallèlement aux autres que nous pouvons modéliser par

$$E(\theta_1, \theta_2, ..., \theta_N) = -J \sum_{i=1}^{N} \cos(\theta_i)$$

où J est une constante caractéristique du polymère.

1. Décomposition de la fonction de partition. Ecrivez la forme de la fonction de partition Z du polymère (nous prenons en compte ici que les contributions des conformations) et montrer qu'elle peut s'écrire comme

$$Z = Z_1^N$$

où Z_1 est la fonction de partition de l'angle entre deux bâtonnets voisins quelconques.

I. APPROXIMATION BASSE TEMPÉRATURE.

A basse température, le système ne sera pas loin de son état d'énergie minimum $\theta_i \approx 0$. Nous pouvons donc approximer $\cos(\theta) \approx 1 - \theta^2/2$. Par ailleurs, nous savons que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-au^2} du = \sqrt{\pi} a^{-1/2}$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} u^2 e^{-au^2} du = \left(\sqrt{\pi}/2\right) a^{-3/2}$$

2. fonction de partition approchée. Dans ces conditions, calculer exactement la fonction de partition Z_1 pour un angle θ_i quelconque, en supposant que les angles varient de $]-\infty, +\infty[$ (la faible valeur de T nous assure que de toute façon, les grands angles ne contribuent pas à l'intégrale, nous pouvons relâcher donc la contrainte sur les bornes). Donner la densité de probabilité $p(\theta)$ d'observer un angle θ entre deux bâtonnets quelconque.

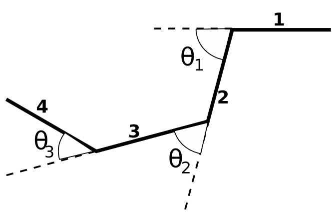

FIG. 1: Un polymère, vue comme la jonction de $N+1$ bâtonnets rigides.

3. fluctuations d'angle entre voisins. Montrer que l'angle moyen $\langle\theta\rangle = 0$ et calculer les fluctuations d'angle entre deux bâtonnets voisins

$$\langle\theta^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2 \, p(\theta) d\theta$$

Sachant que nous avions supposé les angles petits, que veut on dire par basse température ?

4. fluctuations d'angle entre monomère distants Une autre quantité intéressante est Ψ_n, l'angle entre le monomère $n+1$ et le monomère 1. Expliquer pourquoi

$$\Psi_n = \sum_{i=1}^{n} \theta_i$$

En utilisant l'indépendance entre les angles θ_i, calculer $\langle\Psi_n^2\rangle$.

II. CALCUL SANS APPROXIMATION.

Pour aller plus loin, nous devons connaître un peu plus les fonctions de Bessels (voir annexe III A). A partir de maintenant, nous utilisons la forme exacte de l'énergie.

5. fonction de partition. Calculer la fonction de partition exacte Z_1 d'un angle θ_i. En déduire la densité de probabilité $p(\theta)$ d'observer un angle θ entre deux monomère.

6. moyenne du cosinus d'angle. Calculer la valeur moyenne du cosinus d'un angle

$$\langle\cos\theta\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \cos\theta \, p(\theta) d\theta$$

Quel est la limite quand $T \ll J$? Que peut -on dire alors de l'angle θ ? Vérifier qu'en utilisant la relation $\cos\theta \approx 1 - \theta^2/2$ nous retrouvons la même valeur qu'à la question 3.

7. HT. Que vaut $\langle\cos\theta\rangle$ à haute température quand $T \gg J$ (donner l'expression comme un polynôme de J/T) ? Que vaut $\langle\sin\theta\rangle$? Comment peut on interpréter physiquement ce résultat ?

8. Corrélation. Une quantité très intéressante à connaître est $\langle\cos\Psi_n\rangle$. Expérimentalement, c'est cette quantité que l'on mesure pour connaître les propriétés élastiques d'un polymère (voir par exemple la figure 3) . En remarquant que

$$\Psi_n = \Psi_{n-1} + \theta_n$$

et en utilisant la relation $\cos(a+b) = \cos a \cos b - \sin a \sin b$ et l'indépendance entre les angles, démontrer par récurrence que

$$\langle\cos\Psi_n\rangle = \lambda^n \tag{1}$$

où vous préciserez la valeur de λ.

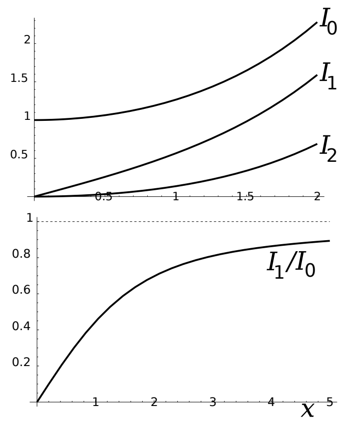

FIG. 2: Les fonctions de Bessel $I_0(x), I_1(x), I_2(x)$ ainsi que le ratio $I_1(x)/I_0(x)$.

9. Rayon. [Ne tenter cette question que si il vous reste du temps]. Soit l'axe x défini par l'orientation du premier monomère et R la projection de l'extrémité du monomère n sur cet axe. Nous noterons a la taille de chaque monomère. Démontrer que

$$R/a = 1 + \sum_{i=1}^{n} \cos(\Psi_n)$$

en déduire que

$$\langle R/a \rangle = (1 - \lambda^n)/(1 - \lambda)$$

A. Quantités thermodynamique.

10. Energie moyenne. Calculer l'énergie moyen par angle entre bâtonnets voisins. Vous pouvez utiliser directement

$$u = -\frac{1}{Z_1} \frac{\partial Z_1}{\partial \beta}$$

où $\beta = 1/T$. Donner l'expression de u dans le cas $T \ll J$ (BT) et $T \gg J$ (HT).

11. Chaleur spécifique. Calculer l'expression de la chaleur spécifique par angle C_v. Donner la limite $T \gg J$. (si nous avions un peu plus de temps, nous aurions pu démontrer que la limite basse température est $C_v = 1/2$).

III. ANNEXES.

A. Les fonctions de Bessels.

La fonction Bessel d'ordre n (fig. 2) présente pas mal de similarité avec la fonction exponentielle. Elle est définie par

$$I_n(x) = (1/\pi) \int_0^{\pi} e^{x \cos\theta} \cos(n\theta) d\theta$$

Nous avons seulement besoin de savoir que pour $x \gg 1$

$$I_n(x) \approx \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}}$$

et que pour $x \ll 1$,

$$\begin{aligned} I_0(x) &\approx 1 + x^2/4 \\ I_1(x) &\approx x/2 \end{aligned}$$

Enfin, nous savons que $I_0'(x) = I_1(x)$ et $I_1'(x) = (I_0(x) + I_2(x))/2$.

B. Commentaire final.

La relation (1) définit une "longeur de persistence" du polymère $\ell_p = a \log \lambda$: un polymère paraît droit à cette échelle. Autrement dit, connaissant l'orientation du polymère à un endroit, son orientation ℓ_p plus loin ne sera pas très différent. Le cytoskelette des cellules est formé d'un polymère appelé microtubule dont la longeur de persistence est de l'ordre du cm, bien supérieur à la taille de la cellule ; le chromosome mitotique (fig.3) a une longueur de persistence de l'ordre du micron.

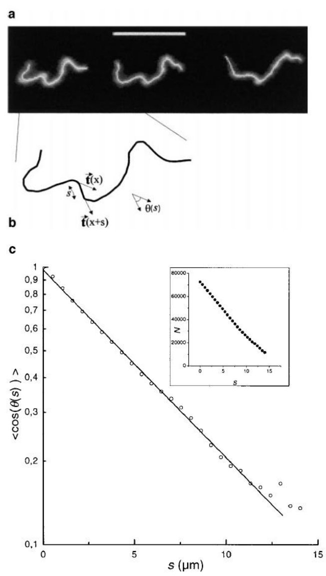

FIG. 3: Mesure de l'élasticité des chromosome mitotique afin de comprendre leurs structure interne. La figure du haut représente des photographies de chromosomes à différent instant. L'angle θ sur cette figure correspond à l'angle Ψ dans notre énoncé. Notez également que l'axe y est en échelle logarithmique. [Source : Journal of Cell Biology, 1999.]