

Manipulation de macromolécules uniques

Dans les cellules vivantes, l'application de forces et couples mécaniques sur l'ADN, la longue molécule en double hélice, joue un rôle crucial dans divers processus biologiques. Par exemple, pendant la *transcription*, l'enzyme appelée *ARN-polymérase* doit accéder à l'information génétique codée dans la séquence d'ADN. Pour ce faire, l'enzyme doit séparer les deux brins de la double hélice, puis l'ADN doit glisser à travers l'ARN-polymérase lors de la transcription, ce qui nécessite une force de traction sur l'ADN. Il est donc important de comprendre comment des forces mécaniques agissent sur l'ADN pour décrire les mécanismes moléculaires qui régissent ces fonctions cellulaires vitales.

Les pinces magnétiques (*magnetic tweezers* en anglais) sont des instruments scientifiques permettant de manipuler des (longues) molécules individuelles, maintenues par leurs extrémités. Cette technique de pointe permet d'étudier l'élasticité et la flexibilité de l'ADN, en mettant en lumière sa réponse aux forces mécaniques rencontrées dans l'environnement cellulaire. Elle permet également d'étudier le repliement de l'ADN dans l'espace et ses changements de conformation. En appliquant des forces mécaniques contrôlées à la molécule d'ADN pendant qu'elle interagit avec des protéines spécifiques, les chercheurs peuvent aussi sonder la force et la stabilité de ces interactions.

Le plus souvent, une molécule d'ADN est attachée entre une surface en verre et une microbille magnétique (Figure 2). Cette dernière est manipulée grâce à un champ magnétique et observée par microscopie. Malgré la relative simplicité du dispositif, plusieurs astuces sont nécessaires afin de pouvoir obtenir des informations sur la macromolécule étudiée : en effet, celle-ci n'est pas visible au cours de l'expérience et son comportement doit être déduit de celui de la bille magnétique à laquelle elle est ancrée. Le positionnement de la microbille en 3D est réalisé avec une précision de quelques nanomètres. Des forces de quelques dixièmes à des dizaines de piconewtons sont mesurées simultanément.

Dans ce problème, nous étudierons en détail les différents aspects de cette technique expérimentale, ainsi que certains des résultats qu'elle a permis d'obtenir.

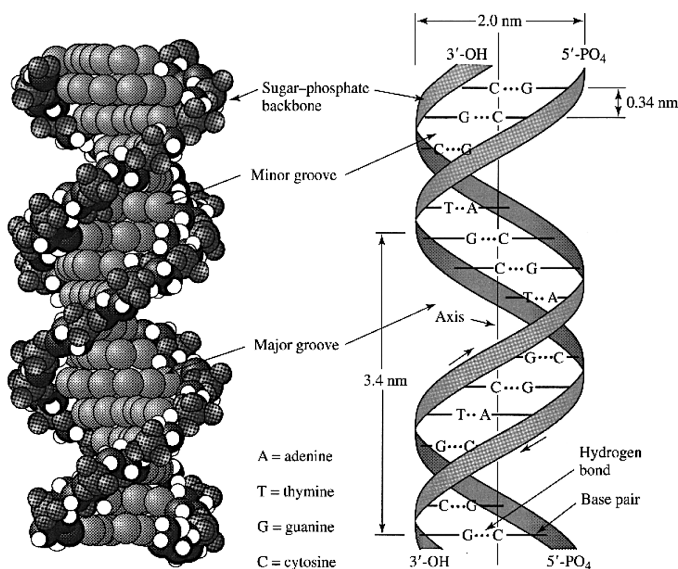


FIGURE 1 – Représentations atomistique et simplifiée de la double hélice d'ADN avec les dimensions principales. Adapté de "Biology" (Solomon/Martin/Berg/Villee, 1993).

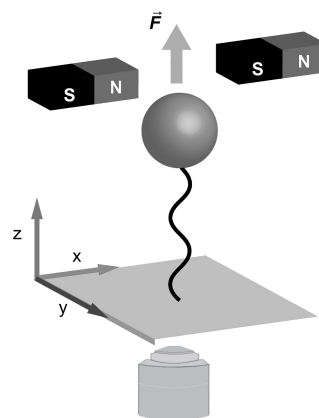


FIGURE 2 – Pinces magnétiques

Constantes fondamentales

$$\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$$

$$\mu_0 = 1,26 \times 10^{-6} \text{ H} \cdot \text{m}^{-1}$$

$$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$$

$$\mathcal{N}_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$e = 1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

Fonctions hyperboliques

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$$

$$\tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

$$\coth(x) = \frac{\cosh(x)}{\sinh(x)} = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}}$$

Transformée de Fourier

Définition de la transformée de Fourier $X(\omega)$ de la fonction $f(t)$:

$$X(\omega) = TF[x(t)] = \int_{-\infty}^{+\infty} x(t) e^{-i\omega t} dt.$$

Définition de la transformée de Fourier inverse de $X(\omega)$:

$$x(t) = TF^{-1}[X(\omega)] = \int_{-\infty}^{+\infty} X(\omega) e^{i\omega t} d\omega.$$

Transformée de Fourier et dérivation :

$$TF\left[\frac{d}{dt}x(t)\right] = i\omega TF[x(t)]$$

Intégrales utiles

$$\int_{-1}^{+1} dx \, x^2 (1 - x^2)^{1/2} = \frac{\pi}{8}$$

$$\int_0^A dx \int_0^A dx' e^{-|x-x'|} = 2 \int_0^A dx'' \int_{x''}^A dx e^{-x''}$$

Formules physiques

Champ magnétique créé par un dipôle

Champ magnétique créé en $\vec{r}$ par un dipôle magnétique $\vec{M}$ positionné à l'origine et indépendant du temps :

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3(\vec{M} \cdot \vec{r})\vec{r} - r^2\vec{M}}{r^5}$$

Définition du module de Young

Le module de Young, aussi appelé module d'élasticité (longitudinale) ou module de traction est la constante qui relie la contrainte de traction (ou de compression) et la déformation de faible amplitude d'un matériau élastique isotrope. Il intervient dans la loi d'élasticité qu'on appelle loi de Hooke. Dans le cas d'une tige de longueur au repos L_0 et de section A soumise à une force de traction f , on a :

$$\sigma = Y\varepsilon$$

où :

- $\sigma = f/A$ est la contrainte,
- $\varepsilon = (L - L_0)/L_0$ où L est la longueur sous contrainte σ ,
- Y est le module de Young.

A. Fonctionnement du dispositif

A.1. Piégeage de la bille magnétique

Un dispositif de pinces magnétiques utilise des billes magnétiques de taille micrométrique qui peuvent être manipulées à l'aide d'un champ magnétique externe. La position des billes magnétiques est ensuite déterminée par un objectif microscopique équipé d'une caméra.

A.1.1. Création du champ magnétique

Pour pouvoir agir mécaniquement sur les billes, on utilise deux aimants, qu'on assimile à deux dipôles magnétiques $\vec{M}_1$ et $\vec{M}_2$ colinéaires et de même sens.

1. Donner l'expression de l'énergie potentielle E_p d'un dipôle magnétique $\vec{M}$ dans un champ magnétique $\vec{B}$. Donner les expressions du moment $\vec{\Gamma}$ et de la force $\vec{F}$ subis par le dipôle magnétique $\vec{M}$, préciser dans quelles conditions la force est non nulle.

Solution:

L'énergie potentielle est $E_p(\vec{B}) = -\vec{M} \cdot \vec{B}$.

Le moment de la force est $\vec{\Gamma} = \vec{M} \wedge \vec{B}$.

La force se déduit de l'énergie potentielle : $\vec{F} = -\vec{\text{grad}} E_p = \vec{\text{grad}}(\vec{M} \cdot \vec{B})$.

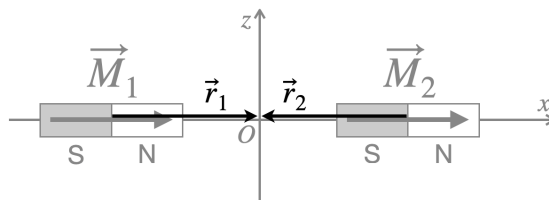
Par conséquent, si le champ magnétique est partout le même, la quantité $\vec{M} \cdot \vec{B}$ ne dépend pas de l'espace et la force magnétique est nulle : la force est non nulle seulement pour $\vec{B}$ **non homogène**.

On considère la configuration de la Figure 2 et on définit un axe horizontal (vecteur unitaire $\vec{e}_x$), colinéaire aux moments magnétiques des deux aimants, et un axe vertical, orienté vers le haut et identifié par le vecteur unitaire $\vec{e}_z$. L'origine de ce repère est le point O situé exactement à même distance des deux aimants et à hauteur de leur axe commun.

2. Réaliser un schéma de la géométrie du problème, incluant les dipôles $\vec{M}_1$ et $\vec{M}_2$. Exprimer le champ magnétique $\vec{B}$ au point O en fonction de la distance d entre les aimants.

Solution:

Schéma :



Nous connaissons (voir formulaire) le champ créé par un dipôle magnétique $\vec{M}$:

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{3(\vec{M} \cdot \vec{r})\vec{r} - r^2\vec{M}}{r^5}.$$

Ici, les moments $\vec{M}_1 = \vec{M}_2 = \vec{M}$ des deux aimants sont identiques, colinéaires à $\vec{e}_x$ et dirigés en direction $+\vec{e}_x$ si on choisit N et S comme sur la figure.

Puisque O est également sur l'axe, $\vec{M}$ et $\vec{r}_1 = -\vec{r}_2 = \vec{r}$ sont également colinéaires, pour les deux aimants (r étant la distance de O du centre de chaque aimant).

Enfin, puisque O est à égale distance des deux aimants, les deux champs magnétiques sont identiques et se somment. On écrit donc

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3(\vec{M}_1 \cdot \vec{r}_1)\vec{r}_1 - r_1^2 \vec{M}_1}{r_1^5} + \frac{3(\vec{M}_2 \cdot \vec{r}_2)\vec{r}_2 - r_2^2 \vec{M}_2}{r_2^5} \right)$$

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3M_1 r_1 r_1 \vec{e}_x - M_1 r_1^2 \vec{e}_x}{r_1^5} + \frac{3(-M_2 r_2)(-r_2 \vec{e}_x) - M_2 r_2^2 \vec{e}_x}{r_2^5} \right).$$

Ici, $r = d/2$, donc

$$\vec{B}(\vec{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{4M(d/2)^2}{(d/2)^5} \vec{e}_x = \frac{8 \mu_0 M}{\pi d^3} \vec{e}_x.$$

La distance d entre les deux aimants détermine donc le champ magnétique appliqué à la bille.

3. On considère maintenant un point P , toujours à égale distance des aimants, mais situé à un niveau vertical différent, en position $(0, z)$ par rapport au repère choisi.
Déterminer l'expression du champ magnétique en P en fonction de d et z .
Déterminer à quelle(s) distance(s) z de l'origine O le champ magnétique s'annule.

Solution:

On a dans ce cas

$$\vec{r}_1 = \left(\frac{d}{2} \vec{e}_x + z \vec{e}_z \right), \vec{r}_2 = \left(-\frac{d}{2} \vec{e}_x + z \vec{e}_z \right), |\vec{r}_1|^2 = |\vec{r}_2|^2 = \left(\frac{d}{2} \right)^2 + z^2, \text{ et}$$

$$\begin{aligned} 3(\vec{M}_1 \cdot \vec{r}_1)\vec{r}_1 - r_1^2 \vec{M}_1 &= 3M \frac{d}{2} \left(\frac{d}{2} \vec{e}_x + z \vec{e}_z \right) - M \left(\left(\frac{d}{2} \right)^2 + z^2 \right) \vec{e}_x = \\ &= \left(2M \left(\frac{d}{2} \right)^2 - M z^2 \right) \vec{e}_x + 3M \frac{d}{2} z \vec{e}_z; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 3(\vec{M}_2 \cdot \vec{r}_2)\vec{r}_2 - r_2^2 \vec{M}_2 &= -3M \frac{d}{2} \left(-\frac{d}{2} \vec{e}_x + z \vec{e}_z \right) - M \left(\left(\frac{d}{2} \right)^2 + z^2 \right) \vec{e}_x = \\ &= \left(2M \left(\frac{d}{2} \right)^2 - M z^2 \right) \vec{e}_x - 3M \frac{d}{2} z \vec{e}_z, \end{aligned}$$

les parties suivant $\vec{e}_z$ s'annulent et celles suivant $\vec{e}_x$ sont identiques, ce qui donne

$$\vec{B}(0, z) = \frac{\mu_0}{4\pi} 2 \frac{M \left(2 \left(\frac{d}{2} \right)^2 - z^2 \right)}{\left(\left(\frac{d}{2} \right)^2 + z^2 \right)^{5/2}} \vec{e}_x = \frac{\mu_0}{4\pi} M \frac{\left(\frac{d^2}{2} - z^2 \right)}{\left(\frac{d^2}{4} + z^2 \right)^{5/2}} \vec{e}_x$$

On cherche enfin à déterminer la valeur de z où $B(0, z) = 0$. Ceci donne

$$\left(\frac{d^2}{2} - z^2 \right) = 0 \quad \text{d'où} \quad z = \pm \frac{d}{\sqrt{2}}.$$

A.1.2. Bille superparamagnétique

Qualitativement, les matériaux peuvent être décrits par leur réponse à un champ magnétique appliqué. Si un matériau est placé dans un champ magnétique, les moments magnétiques atomiques individuels du matériau contribuent à sa réponse globale au champ magnétique.

Dans la suite, on considèrera toujours un matériau magnétique linéaire, homogène et isotrope (LHI) vis-à-vis de ses propriétés magnétiques.

4. — Donner les définitions d'un matériau magnétique (i) linéaire, (ii) homogène, (iii) isotrope.
- Écrire, dans un tel milieu, la relation entre le champ magnétique $\vec{B}$ qui règne dans le matériau, l'excitation magnétique $\vec{H}$ et l'aimantation $\vec{M}$ du matériau. Préciser la définition de ces grandeurs et leurs unités usuelles.

Solution:

Un milieu matériel est dit linéaire si ses perméabilité magnétique et permittivité diélectrique **ne dépendent pas des champs** appliqués. Il est dit homogène si ses propriétés sont les **mêmes en tout point**. Il est dit isotrope si ses propriétés sont les mêmes **dans toutes les directions**.

On a $\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$, où :

$\vec{M}$ est l'**aimantation** du matériau, c'est-à-dire la **densité volumique de moment magnétique** (induit par un champ magnétique extérieur ou pas). Elle s'exprime en **ampères par mètre** (A/m).

$\vec{B}$ est le **champ magnétique** qui règne dans le matériau et s'exprime en **tesla** (T). Il dépend à la fois des courants libres et des courants liés (donc de la magnétisation du matériau).

$\vec{H}$ est l'**excitation magnétique**, c'est un champ auxiliaire qui ne dépend **que des courants libres** dans le matériau. $\vec{H}$ est donc qualitativement le champ magnétique duquel on a retiré la contribution de la matière. Il est homogène à l'aimantation et il est également donc exprimé en **ampères par mètre** (A/m).

Explications supplémentaires, non exigibles : L'équation de Maxwell-Ampère s'applique à $\vec{B}$ pourvu qu'on tienne compte à la fois des courants libres et des courants liés, dûs à la magnétisation du matériaux : $\text{rot} \vec{B} = \mu_0 (\vec{j}_{\text{libre}} + \vec{j}_{\text{lié}})$ où $\vec{j}_{\text{lié}} = \text{rot} \vec{M}$ (ici en conditions statiques).

On définit alors un vecteur excitation magnétique $\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M}$, tel que $\text{rot} \vec{H} = \vec{j}_{\text{libre}}$, ce qui correspond à l'expression $\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$ donnée plus haut.

5. — Définir la susceptibilité magnétique χ_m et donner son expression approchée lorsque l'aimantation permanente du matériau est nulle et que les valeurs de M et H sont suffisamment faibles pour que l'on puisse se limiter au terme d'ordre 1 dans le développement limité de M en fonction de H .
- Montrer que, dans ces hypothèses, on peut écrire

$$\vec{B} = \mu \vec{H}$$

et exprimer μ , la perméabilité magnétique du matériau, en fonction de χ_m , sa susceptibilité magnétique et de μ_0 .

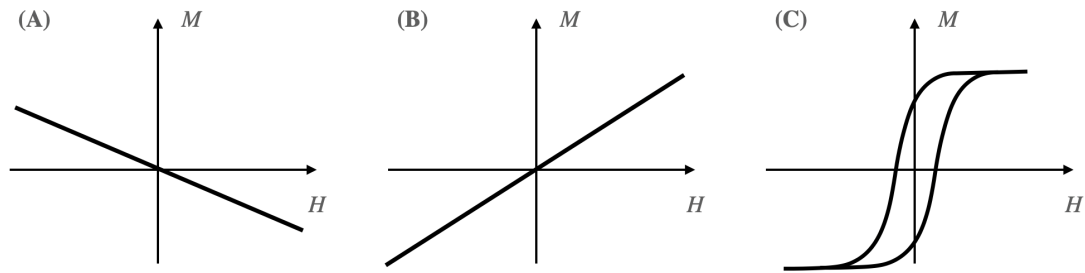


FIGURE 3 – Réponses magnétiques de différents matériaux.

Solution:

Grâce à l'hypothèse d'isotropie les trois vecteurs $\vec{B}$, $\vec{M}$ et $\vec{H}$ sont colinéaires et on peut donc les remplacer par leur norme. Par définition, χ_m caractérise la faculté d'un matériau à s'aimanter sous l'action d'une excitation magnétique et on a

$$\chi_m = \frac{\partial M}{\partial H}.$$

Pour des champs M et H faibles, on écrit $M = M_0 + \frac{\partial M}{\partial H} H$

qui devient $M = \frac{\partial M}{\partial H} H$ si l'aimantation permanente M_0 est nulle. Dans ce cas, on peut donc écrire

$$\chi_m = \frac{M}{H}.$$

À partir de $\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$ en remplaçant $\vec{M} = \chi_m \vec{H}$ on obtient

$$\vec{B} = \mu_0 (1 + \chi_m) \vec{H} = \mu_0 \mu_r \vec{H} = \mu \vec{H}$$

avec, donc, $\mu = \mu_0 (1 + \chi_m)$.

On s'intéresse maintenant à la relation entre l'aimantation $\vec{M}$ et le champ $\vec{H}$. Nous admettrons que $\vec{M} = \chi_m \vec{H}$.

6. La Figure 3 montre les réponses magnétiques $M(H)$ associées à différentes classes de matériaux magnétiques. Associer chacune des courbes (A), (B) et (C) avec une des classes de matériaux suivants en justifiant votre réponse par une description du comportement associé :
- matériaux ferromagnétiques (FM),
 - matériaux diamagnétiques (DM),
 - matériaux paramagnétiques (PM).

Solution:

(A) : diamagnétiques (DM) : matériaux qui, lorsqu'ils sont soumis à un champ magnétique, acquièrent une très **faible aimantation opposée** au champ extérieur et donc engendrent un champ magnétique opposé au champ extérieur. La susceptibilité magnétique des matériaux diamagnétiques est constante, très faible et négative, d'où le comportement $M(H)$ observé.

(B) : paramagnétiques (PM) : matériaux qui, lorsqu'ils sont soumis à un champ magnétique,

acquièrent une **faible aimantation dans la direction du champ extérieur**. L'aimantation du milieu disparaît lorsque le champ d'excitation est coupé. La susceptibilité magnétique des matériaux diamagnétiques est constante et positive, d'où le comportement $M(H)$ observé.

(C) : ferromagnétiques (FM) : matériaux qui, lorsqu'ils sont soumis à un champ magnétique, acquièrent une **aimantation dans la direction du champ extérieur et qui gardent cette aimantation lorsque le champ est coupé**. L'aimantation peut ensuite être renversée par un champ de direction opposée, mais on observe un phénomène d'hystérésis, traduisant le fait qu'il faut appliquer un champ non nul et opposé afin de réduire puis renverser l'aimantation acquise. Ce cycle est visible sur la figure.

Les billes utilisées communément dans les pinces magnétiques, d'un diamètre de l'ordre du micromètre, ont la propriété d'être *superparamagnétiques*. Elles sont constituées d'une matrice poreuse en latex dans laquelle des nanoparticules ferromagnétiques ont été incorporées. Les nanoparticules sont si petites qu'elles constituent des domaines ferromagnétiques uniques.

Dans ce cas, et en l'absence d'un champ magnétique extérieur, la barrière d'énergie ΔE nécessaire au retournement de l'aimantation peut être franchie grâce à l'agitation thermique. La barrière d'énergie ΔE est proportionnelle au volume v des nanoparticules :

$$\Delta E = K v.$$

Le retournement étant activé thermiquement, on peut le décrire par une loi d'Arrhenius pour le temps caractéristique τ de retournement entre les deux directions d'aimantation :

$$\tau = \tau_0 \exp(\Delta E / k_B T).$$

7. Expliquer pourquoi, si l'on observe, en champ extérieur magnétique nul, le comportement magnétique de la nanoparticule sur des temps de mesure $\tau_{\text{mes}} \gg \tau$, l'aimantation moyenne de la particule mesurée sera nulle, en champ extérieur nul : on est alors dans le régime *superparamagnétique*. Justifier la référence au paramagnétisme dans le nom de ce régime.

Solution:

Pour $\tau_{\text{mes}} \gg \tau$, l'aimantation moyenne de la particule mesurée sera **nulle**, car **elle change de sens en permanence** pendant la mesure.

On parle de superparamagnétisme, car cet état correspond à une apparence paramagnétique de la particule (**absence de magnétisation résiduelle** à champ magnétique nul) **malgré** le fait que tous les moments atomiques sont **ferromagnétiquement couplés**.

8. Dans le cas contraire, $\tau_{\text{mes}} \ll \tau$, l'aimantation mesurée a une valeur non nulle : la particule peut être assimilée à un moment magnétique fixe et elle est alors dite « *bloquée* ».

Pour un τ_{mes} donné, déterminer la température de blocage T_B correspondante et préciser dans quelles conditions la particule est bloquée.

Solution:

À partir de la loi d'Arrhenius on voit que la valeur critique pour laquelle $\tau(T_B) = \tau_{\text{mes}}$ est

$$T_B = \frac{\Delta E}{k_B \ln \left(\frac{\tau_{\text{mes}}}{\tau_0} \right)}.$$

Ainsi, si $\tau(T_B) = \tau_{\text{mes}} < \tau(T)$, c'est-à-dire si $\exp(\Delta E/k_B T_B) < \exp(\Delta E/k_B T)$, ou encore

$$\frac{1}{T_B} < \frac{1}{T} \quad \Rightarrow \quad T < T_B,$$

la particule est *bloquée*.

9. On mesure par d'autres moyens $K \simeq 350 \text{ kJ/m}^3$ et la valeur de $\ln(\tau_{\text{mes}}/\tau_0) \simeq 20$. On veut disposer de billes ayant un moment magnétique bloqué à température ambiante. Quelle doit être la taille des nanoparticules ?

Solution:

On veut $T_B > T \simeq 300 \text{ K}$. La relation trouvée à la question précédente permet d'écrire

$$\frac{Kv}{k_B \ln\left(\frac{\tau_{\text{mes}}}{\tau_0}\right)} > T$$

d'où

$$v > \frac{k_B T}{K} \ln\left(\frac{\tau_{\text{mes}}}{\tau_0}\right)$$

et

$$v > \frac{1,38 \times 10^{-23} \text{ J}}{350 \text{ kJ/m}^3} \cdot 20 \simeq \frac{4,1 \times 10^{-21}}{3,5 \times 10^5} \text{ m}^3 \simeq 230 \times 10^{-27} \text{ m}^3 \simeq (6 \text{ nm})^3.$$

Les nanoparticules doivent avoir une taille suffisante, mais restent de **taille nanométrique**.

A.1.3. Force magnétique sur la bille

Lorsqu'un champ magnétique externe $\vec{B}$ est appliqué à l'assemblage de nanoparticules superparamagnétiques réunies dans la bille micrométrique, leurs moments magnétiques ont tendance à s'aligner le long du champ appliqué, ce qui entraîne une aimantation résultante non nulle.

Pour une excitation pas trop intense, le moment magnétique induit $\vec{m}(\vec{B})$ est proportionnel au champ magnétique :

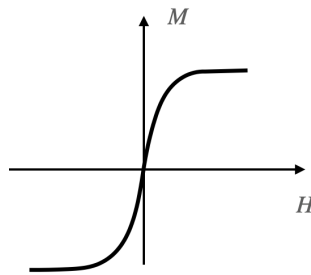
$$\vec{m}(\vec{B}) = \alpha \vec{B} \quad (\vec{B} \text{ faible}) \quad (1)$$

où la constante α est indépendante de $\vec{B}$, mais dépend du volume de la microbille et de sa perméabilité magnétique relative. Pour une excitation intense, le moment magnétique induit sature à une valeur dépendant du matériau, $\vec{m}_{\text{sat}}$.

10. En tenant compte des éléments discutés ci-dessus, tracer schématiquement la réponse magnétique d'une bille superparamagnétique et comparer avec les réponses décrites en Figure 3.

Solution:

$\vec{B}$ est proportionnel à $\vec{H}$ et on peut donc tracer $M(H)$:



La bille magnétique se comporte comme un matériau paramagnétique, c'est-à-dire que sa **magnétisation croît linéairement avec le champ $\vec{H}$** , avec une magnétisation toujours **nulle pour $\vec{H} = \vec{0}$** , mais présente toutefois une **saturation pour $|\vec{H}|$ grand** comme pour un ferromagnétique. En d'autres mots, c'est un **ferromagnétique linéaire (sans hystérésis)**.

Remarque : Un graphe analogue s'obtient avec $M(B)$.

11. On considère une bille micrométrique superparamagnétique soumise à un champ magnétique $\vec{B}$. Si la valeur de $\vec{B}$ est suffisamment élevée pour que l'aimantation de la bille arrive à sa valeur de saturation, on peut montrer que l'énergie potentielle de la bille s'écrit

$$E_p(B) = -\frac{1}{2} \vec{m}_{\text{sat}} \cdot \vec{B}.$$

- En déduire la force $\vec{F}$ subie par la bille dans ces conditions.
- Dans une expérience typique, l'intensité du champ magnétique $\vec{B}$ vaut environ 0,5 T au milieu des aimants et décroît jusqu'à zéro sur une distance d'environ 5 mm. Le moment magnétique $\vec{m}_{\text{sat}}$ de la bille à saturation est de l'ordre de $10^{-12} \text{ A} \cdot \text{m}^2$. Déterminer l'ordre de grandeur de la force agissant sur la bille.

Solution:

Comme vu plus haut, la force $\vec{F}$ subie par une bille est dérivée de l'énergie potentielle : $\vec{F} = -\vec{\text{grad}} E_p$. Si, en champ fort, $E_p(B) = -\frac{1}{2} \vec{m}_{\text{sat}} \cdot \vec{B}$, alors

$$\vec{F} = -\vec{\text{grad}} E_p = \frac{1}{2} \vec{\text{grad}} (\vec{m}_{\text{sat}} \cdot \vec{B}) = \frac{1}{2} \vec{\text{grad}} (m_{\text{sat}} B) = \frac{1}{2} m_{\text{sat}} \vec{\text{grad}} (B)$$

puisque $\vec{m}_{\text{sat}}$ et $\vec{B}$ sont colinéaires.

Puisque le moment magnétique de la bille s'aligne avec le champ appliqué nous pouvons écrire (dans la limite de champ fort, où $m = m_{\text{sat}}$)

$$F = \frac{1}{2} m_{\text{sat}} \frac{\Delta B}{\Delta z}$$

d'où

$$F \sim \frac{1}{2} 10^{-12} \text{ A} \cdot \text{m}^2 \cdot \frac{0,5 \text{ T}}{5 \times 10^{-3} \text{ m}} = 5 \times 10^{-11} \text{ N} = 50 \text{ pN}.$$

Remarque : dans toute la suite du problème, on néglige le poids de la bille.

A.2. Mesures de force

La détermination précédente de la force exercée par le champ magnétique sur les billes magnétiques n'est pas précise. Cependant, lorsque une molécule d'ADN est attachée entre la surface en verre mentionnée dans le préambule (Figure 2) et la bille, la force peut être calculée bien plus précisément à partir des fluctuations thermiques de la position de la bille dans le plan horizontal.

La Figure 4 illustre le système : la bille micrométrique est accrochée à une extrémité de la molécule d'ADN, dont l'autre extrémité est attachée, en bas, à la surface en verre. L'ADN fait avec la verticale un angle β . On choisit maintenant un repère cartésien dont l'origine $O = (0, 0)$ coïncide avec le point d'ancrage de l'ADN sur la surface. L'axe vertical, aligné avec la force magnétique $\vec{F}$ supposée uniforme, définit la direction $\vec{e}_z$. Un vecteur $\vec{e}_x$ indiquera la direction horizontale.

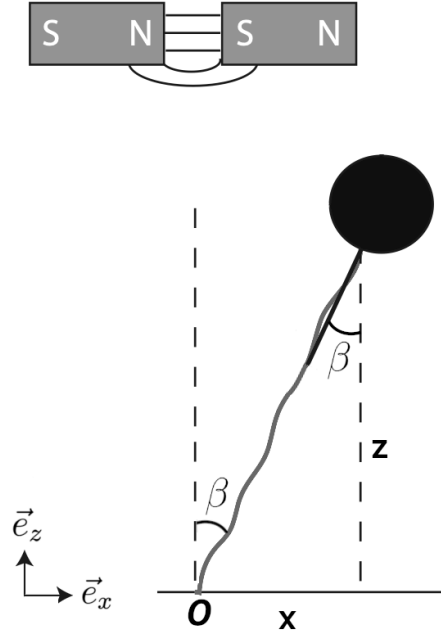


FIGURE 4 – Configuration typique en « pendule inversé », telle qu'observée à un instant donné au cours de l'expérience.

A.2.1. Modèle de pendule inversé

Dans toute la partie A, on considère l'ADN comme un fil sans masse, tendu et inextensible, de longueur L . Aussi, nous négligeons, pour le moment, les fluctuations thermiques.

On peut alors faire l'analogie avec un pendule inversé, car la force magnétique $\vec{F}$ est verticale, uniforme et constante. Nous allons ici étudier la dynamique de ce pendule. La tension du « fil » modélisant l'ADN est notée $\vec{F}_t$.

12. — Identifier et exprimer l'ensemble des forces agissant sur la bille, puis écrire les conditions d'équilibre mécanique du système en faisant référence à la configuration de la Figure 4.
- Trouver la position d'équilibre de la bille (l'exprimer en fonction de l'angle β) et la justifier par une démonstration.

Solution:

La bille n'est soumise qu'à deux forces : la **force magnétique** due aux aimants, $\vec{F} = F\vec{e}_z$ et la **tension du « fil »** $\vec{F}_t$.

Cette dernière a, en principe, deux composantes, une horizontale et l'autre verticale. À un instant donné, on peut choisir l'axe Ox dans la direction du déplacement horizontal de la bille et écrire

$$\vec{F}_t = F_{tx}\vec{e}_x + F_{tz}\vec{e}_z = -F_t \sin \beta \vec{e}_x - F_t \cos \beta \vec{e}_z.$$

À l'équilibre, la somme des forces doit être nulle : on a donc

$$F\vec{e}_z + F_{tz}\vec{e}_z = \vec{0} \Rightarrow F_{tz} = -F \Rightarrow F_t \cos \beta = F,$$

$$F_{tx}\vec{e}_x = \vec{0} \Rightarrow F_{tx} = 0 \Rightarrow F_t \sin \beta = 0.$$

D'après les conditions d'équilibre, on doit avoir $F_t \sin \beta = 0$, d'où $\beta = 0$: la position d'équilibre du système est telle que **l'ADN est vertical**, avec $\beta = 0$ (et $F_t = F$).

13. Le vecteur unitaire normal à la trajectoire et dirigé du point de suspension du pendule vers la bille, sera noté $\vec{e}_r$. Le vecteur unitaire tangent à la trajectoire et orienté dans le sens trigonométrique, sera noté $\vec{e}_\theta$.
- Écrire le principe fondamental de la dynamique pour la bille dans le repère identifié par ces vecteurs.
 - En déduire une équation différentielle pour l'angle $\beta(t)$, puis une expression pour la tension du fil $\vec{F}_t$ en fonction de β , $\dot{\beta}$ et des paramètres du problème.

Solution:

Nous sommes en coordonnées polaires. L'accélération de la bille est alors

$$\vec{a} = (\ddot{r} - r\dot{\theta}^2) \vec{e}_r + (2\dot{r}\dot{\theta} + r\ddot{\theta}) \vec{e}_\theta = -L\dot{\theta}^2 \vec{e}_r + L\ddot{\theta} \vec{e}_\theta = -L\dot{\beta}^2 \vec{e}_r - L\ddot{\beta} \vec{e}_\theta$$

puisque $\theta = \frac{\pi}{2} - \beta$ et $r = L$, constant. Le PFD s'écrit donc

$$-mL\dot{\beta}^2 \vec{e}_r - mL\ddot{\beta} \vec{e}_\theta = -F_t\vec{e}_r + F \cos \beta \vec{e}_r + F \sin \beta \vec{e}_\theta.$$

La projection sur $\vec{e}_\theta$ donne l'équation différentielle

$$mL\ddot{\beta} + F \sin \beta = 0 \quad \text{ou} \quad \ddot{\beta} + \frac{F}{mL} \sin \beta = 0.$$

La projection sur $\vec{e}_r$ donne pour F_t la relation $F_t = mL\dot{\beta}^2 + F \cos \beta$, d'où ($\vec{F}_t$ étant orientée vers le point O donc selon $-\vec{e}_r$) :

$$\vec{F}_t = -(mL\dot{\beta}^2 + F \cos \beta) \vec{e}_r.$$

14. Toujours dans la configuration de la Figure 4 écrire l'énergie potentielle E_p du pendule inversé, son énergie cinétique E_c et son énergie mécanique $E_m(\beta, \dot{\beta})$. Expliquer pourquoi la tension de l'ADN $\vec{F}_t$ ne travaille pas. En déduire une équation différentielle pour β . Comparer au résultat de la question 13.

Solution:

On écrit l'énergie potentielle E_p d'un pendule, où le poids mg est remplacé par l'intensité de la force magnétique F : l'énergie potentielle s'écrit comme le travail de la force constante F , $E_p = F\Delta z$ avec Δz le déplacement vertical par rapport à la position d'équilibre, $\Delta z = L - L \cos \beta$.

On a donc $E_p = FL(1 - \cos \beta)$.

L'énergie cinétique est $E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}mL^2\dot{\beta}^2$.

Finalement, $E_m(\beta, \dot{\beta}) = E_c + E_p = \frac{1}{2}mL^2\dot{\beta}^2 + FL(1 - \cos \beta)$.

La tension $\vec{F}_t$ est toujours perpendiculaire au déplacement $d\vec{\ell}$ de la bille, donc

$$\delta W = \vec{F}_t \cdot d\vec{\ell} = 0.$$

Puisque $E_m(\beta, \dot{\beta})$ est constante, sa dérivée temporelle est nulle :

$$\dot{E}_m(\beta, \dot{\beta}) = mL^2\dot{\beta}\ddot{\beta} + FL\dot{\beta} \sin \beta = 0.$$

On peut exclure la solution évidente $\dot{\beta} = 0$ et on a donc

$$\ddot{\beta} + \frac{F}{mL} \sin \beta = 0.$$

On retrouve bien le même résultat qu'à la question 13.

15. Par un développement limité (dont on explicitera l'expression), simplifier l'équation obtenue dans le cadre de petits angles. Nommer l'équation obtenue.

Solution:

Dans le cas où $\beta \ll 1$ rad, on peut développer $\sin \beta$ au premier ordre en β : $\sin \beta = \beta + o(\beta^3)$

On obtient alors l'équation :

$$\ddot{\beta} + \omega_0^2 \beta = 0$$

avec $\omega_0^2 = \frac{F}{mL} > 0$, qui est l'équation de l'oscillateur harmonique.

16. Dans l'expérience réelle avec la molécule d'ADN, en présence de solvant et à température donnée, on peut observer l'angle β osciller autour de sa valeur d'équilibre. Énoncer et décrire le(s) phénomène(s) physique(s) qui permet(tent) d'expliquer cet effet.

Solution:

Dans ces conditions réelles, la bille interagit avec les molécules du solvant, qui sont agitées par un mouvement brownien et font donc des collisions sur sa surface. L'action résultante de toutes ces collisions peut être décrite par une force aléatoire $\vec{F}_c$, ou force de Langevin.

En moyenne, $\langle \vec{F}_c \rangle = \vec{0}$, par isotropie.

Cependant, à un instant donné, la force aléatoire peut déplacer la bille de sa position d'équilibre.

A.2.2. Fluctuations thermiques

On considère maintenant le système réel microscopique immergé dans un solvant, à la température T . L'ADN est toujours considéré comme un fil inextensible, sans masse, et tendu par l'action de la force magnétique. On supposera que le mouvement de la bille est situé dans le plan $(\vec{e}_x, \vec{e}_z)$ (voir Figure 4).

17. Effectuer un développement limité pour exprimer l'énergie potentielle $E_p(\beta)$ du pendule inversé dans le cas de petites fluctuations, $\beta \ll 1$. En déduire une expression de cette énergie potentielle en fonction de la coordonnée x de la bille, $E_p(x)$, toujours dans le cas de petites fluctuations. Quelle est la nature de la force qui détermine le mouvement *horizontal* de la bille ?

Solution:

On a, pour $\beta \ll 1$, le DL $1 - \cos \beta = 1 - \left(1 - \frac{\beta^2}{2} + O(\beta^4)\right) = \frac{\beta^2}{2} + O(\beta^4)$ d'où

$$E_p(\beta) = FL(1 - \cos \beta) \simeq \frac{1}{2}FL\beta^2.$$

Puisque $\beta \simeq x/L$ dans ces mêmes conditions, on trouve finalement $E_p(x) \simeq \frac{1}{2} \frac{F}{L} x^2$.

Dans la direction x on a une force $F_x = -\frac{dE_p(x)}{dx} = -\frac{F}{L} x = -k x$: il s'agit d'une force de rappel, linéaire et analogue à celle d'un ressort.

La Figure 5 montre l'enregistrement expérimental de la position x de la bille au cours du temps, ainsi que l'histogramme correspondant $\mathcal{P}(x)$. C'est à partir de cette mesure qu'il est possible d'avoir une détermination précise de la force magnétique $\vec{F}$ qui s'exerce sur la bille.

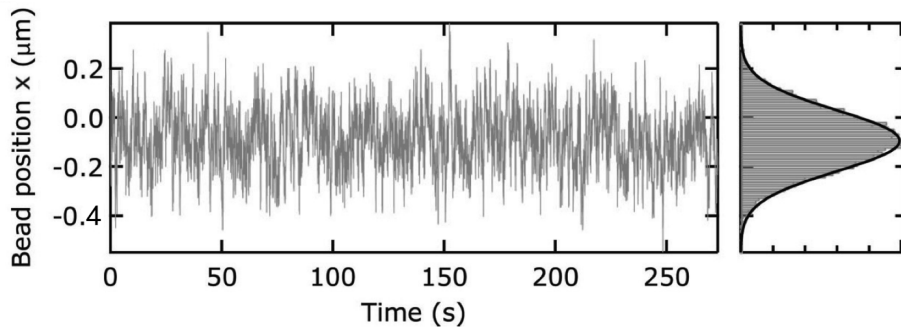


FIGURE 5 – Enregistrement expérimental de la position x de la bille au cours du temps. Le graphe de droite correspond à l'histogramme $\mathcal{P}(x)$ des positions enregistrées dans cet intervalle de temps et ajusté par une fonction gaussienne (ligne noire).

18. On réalise une expérience de pinces magnétique sur une molécule d'ADN et on enregistre les données de la Figure 5. Expliquer comment il est possible, à partir des données de la figure, de déterminer l'intensité de la force magnétique $\vec{F}$ qui s'exerce sur la bille. Montrer que l'intensité recherchée est donnée par

$$F = \frac{L k_B T}{\langle x^2 \rangle}$$

où $\langle x^2 \rangle$ est la valeur quadratique moyenne de la position x (et, on le rappelle, T est la température et L la longueur de la molécule d'ADN).

Solution: À partir du tracé de la Figure 5 (et plus précisément de l'histogramme) il est possible d'évaluer $\langle x^2 \rangle$ comme la variance de $\mathcal{P}(x)$.

En remplaçant $\langle x^2 \rangle$ dans le théorème d'équipartition

$$\frac{1}{2} \frac{F}{L} \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$$

on peut alors exprimer F en fonction de quantités connues, comme $F = \frac{L k_B T}{\langle x^2 \rangle}$.

19. En se basant sur les données de la Figure 5, donner un ordre de grandeur de la force magnétique F sur la bille lors de l'enregistrement. L'expérience est réalisée avec une molécule d'ADN de longueur $L \simeq 16,5 \mu\text{m}$.

Solution:

À partir de la figure on peut estimer l'écart type de la gaussienne $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$ à environ $0,2 \mu\text{m}$.
Donc,

$$F = \frac{L k_B T}{\langle x^2 \rangle} \simeq \frac{16,5 \times 10^{-6} \text{ m} \cdot 4,1 \times 10^{-21} \text{ J}}{(0,2)^2 \times 10^{-12} \text{ m}^2} = 2050 \times 10^{-15} \text{ N} \simeq 2,0 \text{ pN}.$$

20. Justifier le fait que l'histogramme des position $\mathcal{P}(x)$ puisse être ajusté par une fonction gaussienne.

Solution:

En vertu de la statistique de Boltzmann, car

$$\mathcal{P}(x) \propto \exp(-E_p(x)/k_B T) = \exp(-\frac{1}{2} k x^2 / k_B T)$$

avec $k = F/L$.

A.2.3. Analyse de Fourier

Dans la pratique, la méthode d'estimation de la force à partir des fluctuations de la position x est limitée par les vibrations externes de l'instrument, qui doivent être éliminées. Pour un étalonnage plus précis, une analyse dans l'espace de Fourier est utilisée.

Une expression théorique de la transformée de Fourier $X(\omega)$ de la position $x(t)$ peut être obtenue en écrivant l'équation suivante pour le mouvement de la bille :

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\gamma \frac{dx(t)}{dt} - \frac{F}{L} x(t) + \xi(t), \quad (2)$$

où m est la masse de la bille, γ le coefficient de frottement visqueux du solvant et $\xi(t)$ une force aléatoire qui représente l'effet du bruit thermique.

21. Décrire la signification de chaque terme de l'Équation 2.

Solution:

$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2}$ c'est le terme inertiel ma ;

$-\gamma \frac{dx(t)}{dt}$ c'est la force de frottement fluide agissant sur la bille ;

$-\frac{F}{L}x(t)$ c'est la force de rappel due à la tension de l'ADN, comme décrit précédemment ;

$\xi(t)$ est, comme dit dans l'énoncé, une force aléatoire qui représente l'action des collisions avec les molécules du solvant sur le mouvement de la bille.

Dans ce contexte, on peut négliger le terme $m \frac{d^2 x(t)}{dt^2}$, car il est toujours très inférieur aux autres termes. L'équation du mouvement ainsi simplifiée peut être traitée grâce à une transformée de Fourier. On note $X(\omega) = TF[x(t)]$ la transformée de Fourier de $x(t)$ et $\Xi(\omega) = TF[\xi(t)]$ celle de $\xi(t)$.

22. Écrire la transformée de Fourier de l'Équation 2, après l'avoir simplifiée. En déduire une expression pour $X(\omega)$.

Solution:

En prenant la TF de l'équation $\gamma \frac{dx(t)}{dt} = -\frac{F}{L}x(t) + \xi(t)$ terme à terme, on a

$$i\omega\gamma X(\omega) = -\frac{F}{L}X(\omega) + \Xi(\omega).$$

On trouve donc

$$X(\omega) = \frac{1}{i\gamma\omega + (F/L)} \Xi(\omega).$$

23. On note $\bar{X}(\omega)$ le complexe conjugué de $X(\omega)$. Exprimer $S_{xx}(\omega) = \bar{X}(\omega)X(\omega) = |X(\omega)|^2$, la densité spectrale de puissance associée aux fluctuations $x(t)$, en fonction de celle de la force stochastique, $S_{\xi\xi}(\omega)$.

Montrer que l'on peut écrire

$$S_{xx}(\omega) = \frac{A}{1 + (\omega/\omega_c)^2} S_{\xi\xi}(\omega) \quad (3)$$

avec $S_{\xi\xi}(\omega) = |\Xi(\omega)|^2$, où A et ω_c sont deux constantes que l'on spécifiera.

Solution:

On trouve

$$S_{xx}(\omega) = \left(\frac{1}{-i\gamma\omega + (F/L)} \bar{\Xi}(\omega) \right) \left(\frac{1}{i\gamma\omega + (F/L)} \Xi(\omega) \right) = \frac{1}{\gamma^2\omega^2 + (F/L)^2} S_{\xi\xi}(\omega).$$

On peut donc récrire

$$S_{xx}(\omega) = \frac{A}{1 + (\omega/\omega_c)^2} S_{\xi\xi}(\omega)$$

avec $\omega_c = \frac{F}{L\gamma}$ et $A = \left(\frac{L}{F}\right)^2$.

24. En sachant que la force aléatoire $\xi(t)$ peut être modélisée par un bruit blanc, sa densité spectrale de puissance a la forme suivante :

$$S_{\xi\xi}(\omega) = 2\gamma k_B T = \text{constante.} \quad (4)$$

Déduire des équations (3) et (4) l'expression de $S_{xx}(\omega)$.

Solution:

On déduit des résultats précédents

$$S_{xx}(\omega) = \frac{2\gamma k_B T A}{1 + (\omega/\omega_c)^2} = \frac{2\gamma k_B T L/F}{1 + (\omega/\omega_c)^2} = \frac{2k_B T/(\gamma\omega_c)}{1 + (\omega/\omega_c)^2}$$

avec toujours $\omega_c = \frac{F}{L\gamma}$. Il s'agit d'une fonction Lorentzienne.

La Figure 6 reproduit le spectre des fluctuations transverses d'une bille de 1 μm de diamètre attachée à une molécule d'ADN de 16,5 μm de long. L'ajustement est obtenu à l'aide de la fonction théorique déterminée à la question précédente. Le spectre est tracé en fonction de la fréquence f .

Les ajustements permettent de déterminer précisément la valeur de la force F .

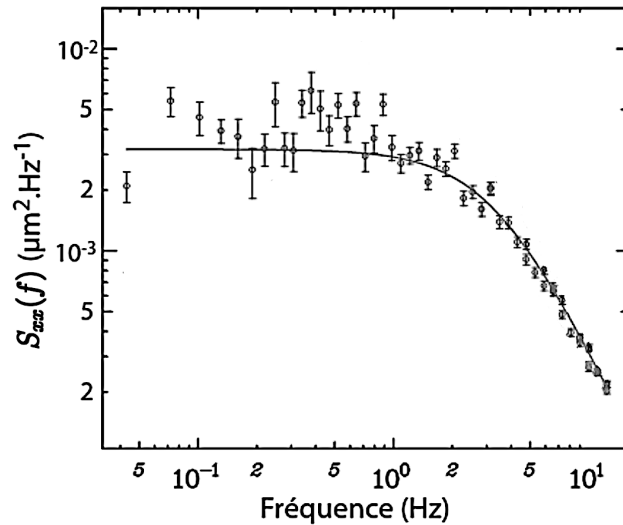


FIGURE 6 – Densité spectrale $S_{xx}(f)$ obtenue dans une expérience avec une configuration donnée des aimants sur un système DNA-bille.

25. Donner une estimation du coefficient γ en utilisant la relation (loi de Stokes)

$$\gamma = 6\pi\eta r$$

avec $\eta = 1,0 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ la viscosité de l'eau et r le rayon de la bille.

Solution:

On trouve $\gamma = 6\pi\eta r = 6\pi \cdot 10^{-3} \cdot 0,5 \times 10^{-6} = 9,4 \times 10^{-9} \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-1}$.

26. — Identifier et estimer la fréquence de coupure $f_c = \omega_c/2\pi$ à partir du graphique de la Figure 6.
- En déduire une estimation de la force F qui s'applique sur la bille dans le cas de l'expérience de la Figure 6.
 - Comparer ce résultat à l'ordre de grandeur de la force trouvée avec une méthode moins précise à la question 19.

Solution:

La fréquence (ou la pulsation) de coupure est telle que l'amplitude de $S_{xx}(f) = \frac{1}{2}S_{xx}(f \rightarrow 0)$, comme on peut le vérifier en remplaçant cette valeur dans l'expression de S_{xx} .

Sur le graphique on peut identifier

$$S_{xx}(f \rightarrow 0) \simeq 3 \times 10^{-3} \text{ } \mu\text{m}^2 \cdot \text{Hz}^{-1}, \text{ d'où}$$

$$\frac{1}{2}S_{xx}(f \rightarrow 0) \simeq 1,5 \times 10^{-3} \text{ } \mu\text{m}^2 \cdot \text{Hz}^{-1} \text{ et, par lecture directe,}$$

$$f_c \sim 4 \text{ Hz.}$$

Solution alternative : on peut également faire une lecture graphique de l'intersection des deux asymptotes (horizontale, pour fréquence faible, et « diagonale » à haute fréquence) qui est également une approximation raisonnable de la fréquence de coupure. La lecture donne dans ce cas plutôt

$$f_c \sim 3 \text{ Hz.}$$

De la relation $\omega_c = \frac{F}{L\gamma}$ on déduit

$$F = 2\pi L\gamma f_c = 2\pi \cdot 16,5 \times 10^{-6} \text{ m} \cdot 9,4 \times 10^{-9} \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-1} \cdot 4 \text{ s}^{-1} = 3898 \times 10^{-15} \simeq 3,9 \text{ pN}$$

pour $f_c \sim 4 \text{ Hz}$,

$$\text{ou } F = 2\pi L\gamma f_c = 2\pi \cdot 16,5 \times 10^{-6} \text{ m} \cdot 9,4 \times 10^{-9} \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-1} \cdot 3 \text{ s}^{-1} \simeq 2,9 \text{ pN pour } f_c \sim 3 \text{ Hz.}$$

Pour information, la valeur estimée dans le document dont la figure est extraite est de 3,3 pN.

On avait trouvé $\sim 2 \text{ pN}$: l'ordre de grandeur est correct, malgré un facteur inférieur à 2 dans la valeur obtenue.

A.3. Mesures de position

En plus de la force qui s'exerce sur la bille, le dispositif permet une mesure de la position de cette dernière.

L'échantillon est observé à l'aide d'un microscope inversé, une image CCD est traitée par un ordinateur qui commande les électro-aimants pour asservir la position des billes en temps réel.

Les positions x, y sont d'abord obtenues par corrélation en temps réel des images des billes. La position x, y est mesurée avec une précision de quelques nanomètres.

La position verticale z , c'est-à-dire la distance bille-plan, est obtenue, avec une résolution de 10 nm, en utilisant la variation des anneaux de diffraction qui entourent l'image de la bille lorsqu'elle se déplace verticalement. Le suivi le long de l'axe vertical z peut utiliser ce motif caractéristique car le rayon des cercles concentriques observés dépend de la position du centre de la bille par rapport au plan focal de l'objectif.

A.3.1. Position horizontale

Un faisceau lumineux monochromatique de longueur d'onde λ en incidence normale arrive sur une pupille plane diffractante (S) placée en $z = 0$. On observe la répartition de l'intensité lumineuse sur un écran plan placé à la distance z de l'obstacle. Les notations sont les suivantes : $M \equiv (x', y', 0)$ repère un point de la pupille diffractante et $P \equiv (x, y, z)$ un point de l'écran d'observation.

27. — Définir le cadre de la diffraction de Fraunhofer, encore nommée diffraction en champ lointain ou approximation de Fraunhofer.
- Dans l'expérience, la diffraction est due à une pupille circulaire de rayon a : décrire ce qu'on observe à l'écran dans le cas d'une diffraction de Fraunhofer. Faire un dessin schématique, donner le nom de la figure de diffraction obtenue.

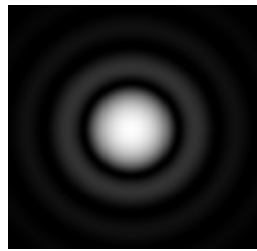
Solution:

L'approximation de Fraunhofer consiste à se placer dans l'approximation paraxiale ($x, y \ll z$) et en champ lointain ($z \gg x', y'$).

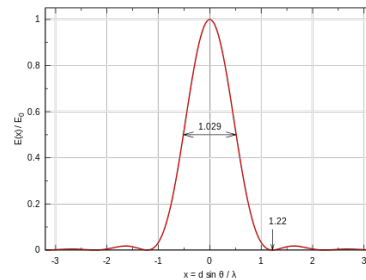
En d'autres mots, la source ponctuelle doit être très éloignée de l'ouverture plane pour que les ondes qui parviennent jusqu'à l'objet réfractant soient planes ou quasi planes et l'observation se fait à l'infini.

On observe une tache de diffraction avec des anneaux concentriques et un disque central éclairé. L'éclairement varie donc en fonction de l'angle θ entre le point considéré et le centre de la figure.

Deux choix de figures sont possibles :



ou bien



Il s'agit d'une tache d'Airy.

Pour information : l'expression est $E(x) = E_0 \left(\frac{2J_1(\pi x)}{\pi x} \right)^2$ où $x = \frac{a \sin \theta}{\lambda}$, J_1 est la fonction de Bessel du premier ordre, λ est la longueur d'onde de la lumière.

Dans le cas d'une pupille circulaire, la figure de diffraction est également à symétrie circulaire et présente une première frange noire pour

$$\theta_1 \simeq 1,22 \frac{\lambda}{a}.$$

28. Dans le cas de l'expérience des pinces magnétiques, l'objet diffractant n'est pas une ouverture dans un écran, mais la bille magnétique. Expliquer les analogies et différences par rapport au cas discuté plus haut d'une ouverture circulaire, dans l'hypothèse d'un montage optique identique et en considérant la bille comme un objet opaque.

Solution:

On doit invoquer le principe de Babinet : les figures de diffraction de Fraunhofer des deux écrans complémentaires sont identiques, sauf sur l'image géométrique S' de la source S .
On aura donc une figure de diffraction identique à celle obtenue avec un écran circulaire.

29. Dans l'expérience, une lentille mince de focale f' est utilisée pour former l'image de la bille sur le plan de la caméra CCD, qu'on suppose coïncidant avec le plan focal image. Exprimer le diamètre d_1 de la première frange noire à l'écran en fonction des paramètres du problème.

Solution:

Puisque la diffraction de Fraunhofer se fait à l'infini, le faisceau incident sur la lentille est supposé parallèle. La distance entre la lentille et l'écran doit être donc égale à la distance focale, f' .

Nous connaissons par ailleurs le diamètre angulaire de la frange noire, donné par 2θ , avec $\theta \simeq 1,22 \lambda/a$.

Le diamètre à l'écran est alors $d_1 = 2f'\theta$, donc $d_1 = 2,44 f' \frac{\lambda}{a}$.

30. L'ouverture de la pupille est $a = 10 \mu\text{m}$. On éclaire le système à l'aide d'une LED rouge. L'image enregistrée par la caméra CCD est formée de pixels carrés de $10 \mu\text{m}$ de côté. Déterminer la focale f' qu'il conviendrait de choisir pour pouvoir observer l'image dans ces conditions, en supposant que l'objectif travaille dans l'air (« objectif sec »).

Solution:

LED rouge : on peut prendre $\lambda \simeq 650 \text{ nm}$ (600 à 700 nm).

On veut que le diamètre d_1 à l'écran soit ne soit pas inférieur à quelques pixels, prenons 6 pixels par exemple (par référence, 1 à 12 pixels).

La condition à respecter est donc

$$d_1 = 2,44 f' \frac{\lambda}{a} \geq 6 \times 10 \mu\text{m} \quad (\text{respectivement, } 10 \mu\text{m} \text{ à } 120 \mu\text{m})$$

d'où

$$f' \geq \frac{10 \times 10^{-6}}{2,44 \times 650 \times 10^{-9}} 60 \times 10^{-6} \text{ m} = 0,38 \text{ mm} \quad (0,06 \text{ mm} \text{ à } 0,8 \text{ mm}).$$

A.3.2. Position verticale

Dans le système réel, la bille n'est pas à une distance infinie de la lentille et il est nécessaire d'ajuster la distance du plan focal pour avoir une image nette. Lorsque la bille se déplace en direction z , elle sort donc du plan focal. Par conséquent, le profil de sa figure de diffraction change. Cet effet est utilisé pour déterminer précisément sa position z .

Document scientifique 1 : extrait d'article**Positionnement de la bille le long de l'axe vertical**

Lorsque la bille est légèrement hors plan focal, elle apparaît entourée d'une série de cercles

concentriques (figure a).

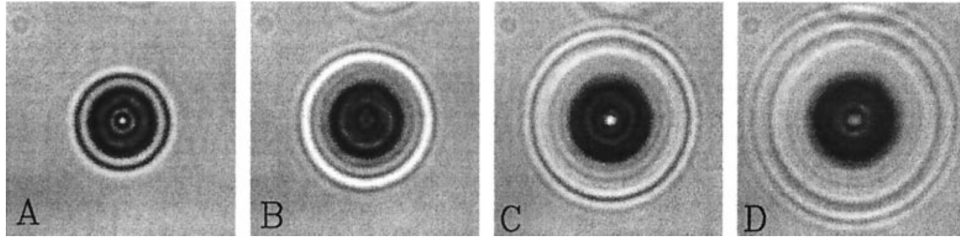


Figure a

Le suivi le long de l'axe vertical z peut utiliser ce motif caractéristique car le rayon des cercles concentriques observés dépend de la position du centre de la bille par rapport au plan focal de l'objectif. Lors du suivi en x, y d'une bille posée sur le fond, on construit d'abord une image d'étalonnage. Typiquement, 32 profils radiaux sont enregistrés sur une profondeur d'environ $10\text{ }\mu\text{m}$ au-dessus du centre de la particule (Figure b).

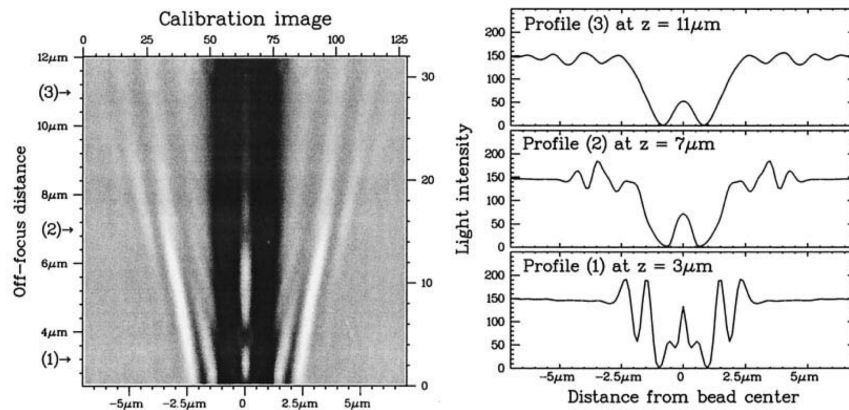


Figure b

Ensuite, pour le positionnement vertical, le profil radial de l'objet est comparé en temps réel à cet ensemble de référence. Plus précisément, une méthode des moindres carrés permet de déterminer grossièrement les profils de référence les plus proches. Ce processus est ensuite suivi d'une interpolation de l'emplacement précis de la bille. Cette interpolation repose sur les aspects ondulatoires des anneaux de diffraction. Il s'avère que le déphasage entre les profils successifs est relativement linéaire en fonction de leur distance par rapport au plan focal. Comme pour le suivi x, y , la résolution spectrale du suivi z à haute fréquence est de l'ordre de $1\text{ nm} \cdot \text{Hz}^{-1/2}$. Bien entendu, la position verticale de la bille ne peut être mesurée que dans une profondeur d'environ $10\text{ }\mu\text{m}$ au-dessus du plan focal. Plus loin, les anneaux oscillants disparaissent progressivement.

31. En suivant le document scientifique 1, les profils radiaux des images enregistrées lors d'une expérience peuvent être comparés à ceux obtenus lors de la phase d'échantillonnage grâce à un ajustement par la méthode des moindres carrés. Décrire cette méthode dans le cas général : donner son objectif, le principe de la méthode, expliciter la fonction S qui doit être minimisée et par rapport à quelles variables on doit minimiser.

Solution:

La méthode des moindres carrés permet de réaliser une comparaison entre une série de valeurs « mesurées » $\{y_i\}$ et une série de valeurs « de référence » $\{Y_i(\theta)\}$ dépendant d'une série de

paramètres θ . Les valeurs de référence peuvent être issue d'une fonction théorique (dont θ seraient alors les paramètres) ou, comme ici, d'un profil mesuré dans des conditions contrôlées (correspondant à des différents θ), servant de référence.

Si les valeurs $\{y_i\}$ et $\{Y_i(\theta)\}$ se correspondent une à une, on cherche à minimiser l'écart entre chaque paire de valeurs, de manière à trouver les paramètres θ qui permettent d'approcher au mieux les mesures avec les valeurs de référence.

Concrètement, donc, il s'agit de minimiser la « somme des carrés des résidus », c'est-à-dire $S(\theta) = \sum_i (y_i - Y_i(\theta))^2$ par rapport aux paramètres θ .

Remarque : cette réponse est suffisante. On peut toutefois préciser ce qui suit :

De plus, si les incertitudes $\{\sigma_i\}$ sur les mesures $\{y_i\}$ sont connues, elle peuvent être prises en compte dans la définition de la fonction $S(\theta)$ qui s'écrit alors (moindres carrés pondérés)

$$S(\theta) = \sum_i \frac{(y_i - Y_i(\theta))^2}{\sigma_i^2}$$

qu'on note généralement $\chi(\theta)$ (fonction khi carré ou khi-deux).

32. Dans le cas de l'expérience, quelle grandeur joue le rôle des ou de la variable par rapport à laquelle on minimise S ?

Solution:

Dans le cas de l'expérience, la variable qui permet d'ajuster les valeurs des profils échantillonnés aux valeurs mesurées est la position verticale de la bille z . En minimisant $S(z)$ on détermine la position verticale la plus probable.

33. Le script Python suivant, incomplet, permet de définir une fonction qui prend en entrée une série de mesures $\{x_i, y_i\}$ et une fonction $f(x, A)$ dépendant d'un paramètre A et réalise un ajustement de la fonction aux mesures par la méthode des moindres carrés.

```
def moindres_carre(mesures, func, initial_param, step=0.01, tolerance=1e-6):
    xdata, ydata = mesures
    A = initial_param
    quantite_prec = .....
    while True:
        A += step
        quantite_actu = .....
        if abs(quantite_actu - quantite_prec) < tolerance:
            break
        quantite_prec = quantite_actu
    return A
```

- Compléter la fonction en écrivant les expressions appropriées dans les espaces indiqués par les points.
- Comment une modification de la valeur du paramètre `step` affecte-t-elle le processus d'optimisation ? Quelles peuvent être les conséquences négatives d'une valeur trop élevée ou trop basse ?

Solution:

La même formule doit être utilisée pour les deux expressions manquantes, c'est la valeur de la somme des moindres carrés :

```
np.sum((ydata - func(xdata, A))**2)
```

Le paramètre **step** détermine la manière dont le paramètre **A** est ajusté à chaque itération de la boucle d'optimisation.

Si la taille du pas est trop grande, l'algorithme risque de dépasser le minimum de la somme des carrés des résidus. Cela signifie qu'il peut sauter d'un côté à l'autre de la valeur minimale sans jamais converger vers elle. De plus, même si l'algorithme converge, la grande taille du pas conduit à un résultat moins précis. D'autre part, si la taille du pas est trop petite, l'algorithme convergera très lentement. Cela signifie qu'il faudra un grand nombre d'itérations pour atteindre le minimum, ce qui peut être inefficace, en particulier pour les grands ensembles de données ou les fonctions plus complexes. Dans certains cas, l'algorithme peut rester bloqué dans un minimum local.

B. Élasticité de l'ADN

B.1. Un comportement élastique

La Figure 7 montre une courbe force-extension typique, obtenue avec une molécule d'ADN de longueur totale $L = 16,5 \mu\text{m}$.

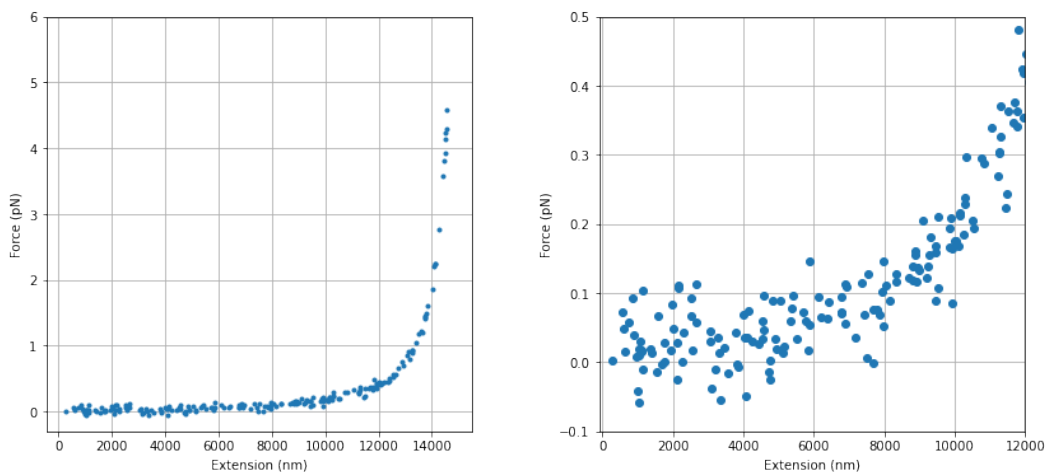


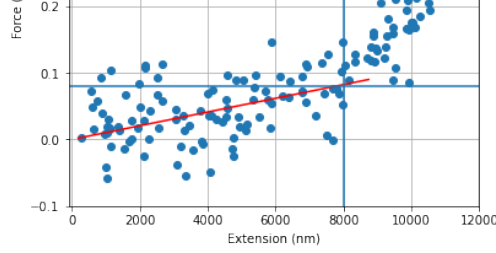
FIGURE 7 – Courbe force extension obtenue sous pinces magnétiques pour l'ADN du virus Lambda-phage, de longueur $L = 16,5 \mu\text{m}$. La figure de droite est un agrandissement du régime de faible force de la figure de gauche.

34. Justifiez l'existence d'un régime élastique pour l'ADN pour des forces suffisamment faibles sur la base de la Figure 7. Donner une estimation grossière des forces et extensions pour lesquelles ce régime est observé. Montrer que l'ordre de grandeur pour la constante de raideur associée à ce régime élastique est de quelques 10^{-8} S.I.

Solution:

Pour des faibles forces, la relation entre force et extension est linéaire (une droite), ce qui correspond à un comportement linéaire et donc à un régime élastique.

On peut supposer une dépendance linéaire pour des forces inférieures à 0,08 pN et des extensions inférieures à 8000 nm.



La constante élastique est alors donnée par la pente de la région linéaire :

$$k \sim \frac{\Delta f}{\Delta z} \sim \frac{0,08 \text{ pN}}{8000 \text{ nm}} \sim 10^{-5} \text{ pN} \cdot \text{nm}^{-1} = 10^{-8} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}.$$

35. En comparant l'extension typique du régime linéaire avec la longueur étirée L de la molécule d'ADN, justifier la nécessité d'un modèle spécifique pour expliquer ce comportement élastique.

Solution:

Le comportement élastique apparaît dans un régime où la distance entre les deux extrémités de la molécule (son extension) est bien plus faible que la longueur de la molécule étirée, $L \simeq 16500 \text{ nm}$. Il ne s'agit donc pas d'élasticité au sens de la physique des solides, mais d'un comportement linéaire qui intervient alors que la molécule est repliée en pelote.

B.2. Élasticité entropique

Le comportement élastique observé à faible force peut être expliqué qualitativement grâce à un modèle très simple de la molécule d'ADN comme une *chaîne librement jointe* (Figure 8). Dans ce modèle, la molécule d'ADN est vue comme une suite de tiges rigides de longueur fixée ℓ , dont les orientations sont aléatoires et complètement indépendantes les unes des autres. Nous supposons que deux parties de la chaîne peuvent se superposer.

Nous appelons *monomères* les tiges rigides, *polymère* l'ensemble de la chaîne.

Dans la version unidimensionnelle (1D) de ce modèle, que nous allons étudier maintenant, les monomères n'ont que deux orientations possibles : dans la direction de la force appliquée, ou dans la direction opposée (Figure 8, droite).

Modèle 1D Considérons un polymère constitué de N monomères de longueur ℓ . Tout étiré, le polymère a une longueur $L = N\ell$. Une extrémité du polymère est fixée à un support qu'on supposera ponctuel, l'autre est soumise à une force d'étirement $\vec{f} = f\vec{e}_z$ orientée dans la direction $\vec{e}_z$ (orientée vers le haut dans le schéma de la Figure 8). Chaque monomère peut pointer, avec une même probabilité, "vers le haut" le long de la direction $+\vec{e}_z$, ou "vers le bas" le long de la direction $-\vec{e}_z$:

$$z_i = \pm \ell \quad \text{pour} \quad i = 1 \dots N.$$

I. FORCE NULLE ET MARCHE ALÉATOIRE

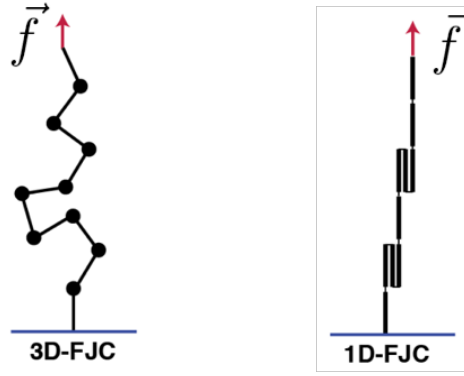


FIGURE 8 – Modèle simple de polymère dans sa version 3D (à gauche) ou 1D (à droite).

36. — Exprimer l'extension globale du polymère, z , pour une configuration donnée (plus ou moins désordonnée).
 — Déterminer la valeur *moyenne* $\langle z \rangle$ de l'extension z , en absence de force, à $f = 0$.
 — Montrer que la variance $\langle z^2 \rangle$, c'est-à-dire la valeur moyenne du carré de z , s'écrit, toujours dans le cas où $f = 0$,

$$\langle z^2 \rangle = \ell L.$$

Solution:

On a par définition $z = \sum_i^N z_i = \ell \sum_i^N (\pm 1)$.

Si $f = 0$, on s'attend à ce que $\langle z \rangle = 0$, puisque les probabilités des contributions positives et négatives sont identiques.

On a par définition $z^2 = \sum_{i,j} z_i \cdot z_j$;

en moyenne, tous les produits $z_i \cdot z_j$ tels que $i \neq j$ s'annulent, car l'orientation des monomères est aléatoire (en l'absence de force).

On trouve donc

$$\langle z^2 \rangle = \left\langle \sum_{i,j} z_i \cdot z_j \right\rangle = \sum_{i,j} \langle z_i \cdot z_j \rangle = \sum_i \langle z_i^2 \rangle = \sum_i \ell^2 = N \ell^2 = \ell L,$$

avec $L = N\ell$, d'où le résultat cherché.

Une analogie existe entre la configuration du polymère et un processus de marche aléatoire qui décrit par exemple le mouvement d'une particule brownienne. Dans une marche aléatoire 1D, soit $x(t)$ la position à un instant t donné. Si la trajectoire est échantillonnée avec un pas temporel δt , la distance moyenne parcourue après N pas de temps est donnée par $\langle x^2 \rangle = 2Dt$, avec $D = \delta x^2 / (2\delta t)$ la coefficient de diffusion et δx la longueur moyenne de chaque pas.

37. Clarifier la similitude entre la formule $\langle x^2 \rangle = 2Dt$ pour une marche aléatoire 1D et l'expression de $\langle z^2 \rangle$ dans le modèle de chaîne librement jointe, en précisant les relations entre les grandeurs N , ℓ , δx , $\langle z^2 \rangle$ et $\langle x^2 \rangle$.

Solution:

La formule pour la marche aléatoire à une dimension, $\langle x^2 \rangle = 2Dt$, décrit la distance quadratique moyenne parcourue en fonction du temps, avec D étant le coefficient de diffusion et t le temps total. En remplaçant $D = \delta x^2 / (2\delta t)$, on obtient

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\delta x^2}{\delta t} t = \delta x^2 N,$$

où on a utilisé la relation $t = N\delta t$.

En comparant avec

$$\langle z^2 \rangle = L\ell = N\ell^2,$$

on voit donc que les deux phénomènes sont identiques si l'on identifie la distance de chaque pas δx dans la marche aléatoire à la longueur ℓ de chaque segment dans la chaîne et $\mathcal{L} = N\delta x$, la longueur totale « curviligne » de la trajectoire de diffusion avec $L = N\ell$, la longueur totale de la chaîne.

Ainsi (la discussion peut prendre différentes formes, mais ces trois points résument ce qu'il faut comprendre) :

N est le nombre de segments dans la chaîne librement jointe, analogue au nombre de pas dans la marche aléatoire ;

ℓ est la longueur de chaque segment dans la chaîne, comparable à la distance de chaque pas δx dans la marche aléatoire ;

$\langle x^2 \rangle = N\delta x^2$ dans la marche aléatoire et $\langle z^2 \rangle = N\ell^2$ dans la chaîne librement jointe sont tous deux des mesures de la dispersion spatiale, mais dans différents contextes.

II. FORCE NON NULLE

38. On applique une force d'étirement f constante. L'extension mesurée de la chaîne se stabilise à $z > 0$. Donner l'expression du travail effectué par la force f pour étirer le polymère de sa longueur initiale jusqu'à z . En déduire une expression pour l'énergie potentielle U du système à l'état étiré.

Solution:

Une force externe f est appliquée et l'extension résultante est z . Comme la longueur initiale était $z = 0$, la force a effectué un travail

$$W = \int_0^z f \cdot dz' = fz.$$

La différence entre les énergies potentielles associées à deux points de l'espace est égale à l'opposé du travail de la force concernée pour aller d'un point à l'autre. On a donc, en fixant $U = 0$ à $z = 0$,

$$U = -fz.$$

Par un raisonnement analogue, on suppose que, en présence de la force extérieure $\vec{f}$, on peut attribuer à chaque monomère une énergie potentielle u_i différente selon qu'il est orienté dans le sens de la force ou dans le sens opposé :

$$u_i = -fz_i.$$

Dans les conditions de l'expérience, la direction des monomères est une variable aléatoire, qui varie en raison des fluctuations thermiques. Le système est classique et on peut donc utiliser la statistique de Boltzmann pour le décrire.

39. — Déterminer la probabilité qu'un monomère soit orienté dans la direction $+\vec{e}_z$ et celle qu'il soit orienté selon $-\vec{e}_z$.
 — En déduire l'orientation moyenne des monomères, $\langle z_i \rangle$. L'exprimer en utilisant une fonction hyperbolique.

Solution:

La distribution de Boltzmann donne

$$p_{\pm} = \frac{e^{-u_{\pm}/k_B T}}{e^{-u_+/k_B T} + e^{-u_-/k_B T}} = \frac{e^{\pm f\ell/k_B T}}{e^{+f\ell/k_B T} + e^{-f\ell/k_B T}}$$

où le numérateur est simplement le facteur de Boltzmann $\exp(-u/k_B T)$ et le dénominateur est le facteur de normalisation Z (somme des deux facteurs de Boltzmann).

En utilisant les probabilités des deux orientations $z_+ = +\ell$ et $z_- = -\ell$:

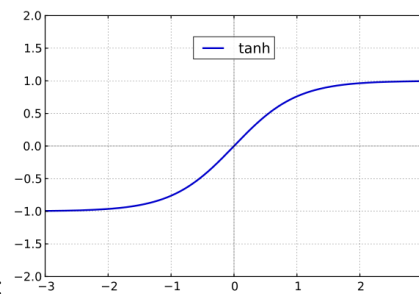
$$\langle z_i \rangle = p_+(+\ell) + p_-(-\ell) = \ell(p_+ - p_-) = \ell \tanh\left(\frac{f\ell}{k_B T}\right)$$

40. Utiliser le résultat précédent pour déterminer $\langle z \rangle$, l'extension moyenne de la chaîne à l'équilibre. Tracer $\langle z \rangle/L$ en fonction de $f\ell/k_B T$.

Solution:

L'extension $\langle z \rangle$ est simplement donnée par l'extension moyenne des monomères multipliée par leur nombre N :

$$\langle z \rangle = \left\langle \sum_i z_i \right\rangle = N \langle z_i \rangle = N \ell \tanh\left(\frac{f\ell}{k_B T}\right) = L \tanh\left(\frac{f\ell}{k_B T}\right)$$



Tracé de $\langle z \rangle/L$ en fonction de $\frac{f\ell}{k_B T}$:

41. — Décrire le comportement de la chaîne dans la limite des grandes forces $f\ell/k_B T \gg 1$. Déterminer dans quelle mesure ce comportement peut être considéré comme réaliste.
 — Déterminer le comportement de la chaîne dans la limite des petites forces $f\ell/k_B T \ll 1$.

Solution:

Dans la limite $f\ell/k_B T \gg 1$, $\tanh\left(\frac{f\ell}{k_B T}\right) \rightarrow 1$ et on obtient

$\langle z \rangle \simeq L$: la molécule atteint son extension maximale.

Ce comportement peut apparaître comme réaliste dans la limite où la force est grande, mais n'est pas trop importante : si la force dépasse une certaine limite, on peut s'attendre à ce que la molécule soit déformée et donc **allongée au-delà de la longueur L** (élasticité propre de la molécule), **voire cassée**, si la force est suffisante.

Le DL de la fonction tangente hyperbolique en $x = 0$ est $\tanh(x) = x + o(x^3)$.

Sans connaître par coeur ce résultat - qu'on peut par ailleurs retrouver à partir du DL de l'exponentielle - on peut examiner le comportement de $\tanh(x)$ pour des valeurs de x proches de 0 en utilisant ses dérivées successives, ce qui confirme l'absence d'un terme quadratique dans le DL de $\tanh(x)$ autour de 0.

Par conséquent, on trouve dans la limite de petites forces $f\ell/k_B T \ll 1$: $\frac{\langle z \rangle}{L} \simeq \frac{f\ell}{k_B T}$.

42. Exprimer la force $\vec{f}_{\text{ADN}}$ que la molécule d'ADN exerce sur l'opérateur en présence d'une faible force extérieure f et en conditions d'équilibre. Commenter l'expression « élasticité entropique » utilisée pour ce régime.

Solution:

Puisque le système est à l'équilibre, la force que la molécule exerce est égale et opposée à la force extérieure $\vec{f}$:

$$\vec{f}_{\text{ADN}} = -\vec{f} = -f\vec{e}_z.$$

On observe dans ce régime que l'extension $\langle z \rangle$ est proportionnelle à la force : le polymère se comporte alors comme une **tige élastique ou un ressort**.

L'**origine** de cette force n'est pas fondamentale mais thermodynamique et précisément, **entropique** : la molécule de polymère est immergée dans un réservoir thermique et a donc tendance à s'enrouler de manière aléatoire, car ces configurations sont favorisées sur le plan entropique. Il y a beaucoup plus de configurations lorsque le système est désordonné que lorsqu'il est étiré. La tendance statistique à revenir à un état d'entropie maximale se traduit ensuite par une force macroscopique, en l'occurrence la force élastique.

43. Dans le régime de force faible, on peut associer une constante élastique effective $k_{\text{ADN}}^{1\text{D}}$ à la chaîne polymère. Déterminer cette constante et en vérifier l'homogénéité.

Solution:

En exprimant f_{ADN} en fonction de $\langle z \rangle$ on trouve

$$f_{\text{ADN}} \simeq \frac{k_B T}{\ell L} \langle z \rangle.$$

Par analogie avec le comportement d'un ressort ou d'une tige élastique 1D, $f = kx$, on a donc

$$k_{\text{ADN}}^{1\text{D}} = \frac{k_B T}{\ell L} = \frac{k_B T}{N\ell^2}.$$

Les dimensions de k_{ADN} sont celles d'une **énergie ($k_B T$) divisée par une longueur au carré (ℓ^2)**, ce qui correspond bien aux dimensions d'une constante élastique puisque l'énergie potentielle qui y est associée s'écrit, en général, $U_{\text{el}}(x) = \frac{1}{2}kx^2$.

Modèle 3D On peut réaliser un calcul analogue dans le cadre d'un modèle un peu plus réaliste, où les segments ne sont pas contraints le long d'un axe mais peuvent avoir n'importe quelle orientation dans l'espace tridimensionnel. Dans ce cas, l'énergie associée à l'orientation $\vec{r}_i$ d'un monomère en présence d'une force extérieure $\vec{f} = f\vec{e}_z$ s'écrit

$$u_i = -\vec{f} \cdot \vec{r}_i.$$

La longueur moyenne de la molécule dans la direction de la force s'écrit dans cette géométrie

$$\langle z \rangle = \frac{1}{Z} \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^\pi \sin \theta_1 d\theta_1 \dots \int_0^{2\pi} d\phi_N \int_0^\pi \sin \theta_N d\theta_N \sum_i \ell \cos \theta_i \exp \left(\frac{f\ell}{k_B T} \sum_i \cos \theta_i \right). \quad (5)$$

44. Justifier l'Équation 5, en précisant le choix du système de coordonnées effectué.

Solution:

Dans une situation expérimentale réelle, le polymère peut s'orienter dans les trois directions de l'espace. En supposant que la force externe est toujours dirigée dans la direction de l'axe z , il est pertinent d'introduire un système de **coordonnées sphériques** où θ désigne l'angle avec l'axe z (symétrie de rotation autour de $\vec{e}_z$).

Dans l'expression Équation 5, le terme $\exp \left(\frac{f\ell}{k_B T} \sum_i \cos \theta_i \right)$ est le **facteur de Boltzmann** pour un état donné où les segments ont des orientations spécifiques $\{\theta_i\}$ par rapport à la direction de la force appliquée.

Les intégrales $\int_0^{2\pi} d\phi_i \int_0^\pi \sin \theta_i d\theta_i$ permettent de **sommer sur toutes les orientations** possibles. Dans l'intégrale de l'Équation 5 on prend donc la **moyenne statistique** de la grandeur $z = \sum_i \ell \cos \theta_i$ en utilisant le poids de Boltzmann.

La fonction de partition Z **normalise** la probabilité et est définie comme la somme (ou dans le cas continu, l'intégrale) de tous les facteurs de Boltzmann pour tous les états accessibles du système. Pour un segment individuel, cela inclut toutes les orientations possibles dans l'espace 3D.

45. — Écrire explicitement l'expression générale du facteur de normalisation (ou fonction de partition) Z .
— Montrer ensuite que Z peut s'écrire

$$Z = \left(\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \exp \left(\frac{f\ell \cos \theta}{k_B T} \right) \right)^N. \quad (6)$$

Solution:

En raison des commentaires de la question précédente, l'expression de la fonction de partition Z pour le modèle 3D-FJC en présence d'une force externe est donc :

$$Z = \int_0^{2\pi} d\phi_1 \int_0^\pi \sin \theta_1 d\theta_1 \dots \int_0^{2\pi} d\phi_N \int_0^\pi \sin \theta_N d\theta_N \exp \left(\frac{f\ell}{k_B T} \sum_i \cos \theta_i \right).$$

Pour montrer que Z peut s'écrire comme indiqué, considérons qu'un monomère individuel a une fonction de partition Z_1 due à l'intégration sur toutes ses orientations possibles θ et ϕ en coordonnées sphériques :

$$Z_1 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta e^{\left(\frac{f\ell \cos\theta}{k_B T}\right)}$$

Puisque les N monomères sont indépendants, la fonction de partition totale est simplement le **produit** des fonctions de partition des monomères individuels :

$$Z = Z_1^N = \left(\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta e^{\left(\frac{f\ell \cos\theta}{k_B T}\right)} \right)^N$$

On peut montrer, dans le cadre de la physique statistique classique, que l'extension moyenne de la molécule est donnée par

$$\langle z \rangle = k_B T \frac{\partial}{\partial f} \ln(Z). \quad (7)$$

46. Montrer, à partir de l'Équation 6 et de l'Équation 7, que

$$\langle z \rangle = N\ell \left(\coth \left(\frac{f\ell}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{f\ell} \right), \quad (8)$$

où la fonction $\coth(x) - 1/x$ s'appelle également fonction de Langevin.
Ce calcul requiert plusieurs étapes intermédiaires.

Solution:

En utilisant $\ln(x^N) = N \ln(x)$,

on doit calculer $\langle z \rangle = N k_B T \frac{\partial}{\partial f} \ln \left(\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \exp \left(\frac{f\ell \cos\theta}{k_B T} \right) \right)$.

Pour calculer l'intégrale, on pose $x = \cos\theta$ et $dx = -\sin\theta d\theta$ (avec $-\int_1^{-1} = \int_{-1}^1$) :

$$\langle z \rangle = N k_B T \frac{\partial}{\partial f} \ln \left(\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 dx \exp \left(\frac{f\ell x}{k_B T} \right) \right)$$

d'où

$$\begin{aligned} \langle z \rangle &= N k_B T \frac{\partial}{\partial f} \ln \left(2\pi \left[\frac{k_B T}{f\ell} \exp \left(\frac{f\ell x}{k_B T} \right) \right]_{-1}^{+1} \right) \\ \langle z \rangle &= N k_B T \frac{\partial}{\partial f} \ln \left(2\pi \frac{k_B T}{f\ell} \left[\exp \left(\frac{f\ell}{k_B T} \right) - \exp \left(-\frac{f\ell}{k_B T} \right) \right] \right) \\ \langle z \rangle &= N k_B T \frac{\partial}{\partial f} \ln \left(4\pi \frac{k_B T}{f\ell} \sinh \left(\frac{f\ell}{k_B T} \right) \right) \end{aligned}$$

En dérivant par rapport à la force et après avoir regroupé les termes, on a

$$\langle z \rangle = N k_B T \left(-\frac{1}{f} + \frac{\ell}{k_B T} \coth \left(\frac{f\ell}{k_B T} \right) \right) = N\ell \left(\coth \left(\frac{f\ell}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{f\ell} \right)$$

ce qui donne le résultat recherché.

Remarque : on peut également écrire explicitement le sinus cardinal en terme des exponentielles et dériver, ce qui donne (formule équivalente à la précédente) :

$$\langle z \rangle = Nk_B T f \left(-\frac{1}{f^2} + \frac{\ell}{f k_B T} \frac{\exp\left(\frac{f\ell}{k_B T}\right) + \exp\left(-\frac{f\ell}{k_B T}\right)}{\exp\left(\frac{f\ell}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{f\ell}{k_B T}\right)} \right).$$

47. Comparer les limites de faible et grande force de l'expression Équation 8 avec ceux de la version 1D du modèle (question 41 notamment). Montrer que la constante élastique associée au régime élastique dans le modèle 3D est

$$k_{\text{ADN}}^{3\text{D}} = \frac{3k_B T}{L\ell}. \quad (9)$$

On donne le développement limité suivant, valable pour $\epsilon \ll 1$: $\coth \epsilon = \frac{1}{\epsilon} + \frac{\epsilon}{3} + O(\epsilon^3)$.

Solution:

À grande force, on retrouve facilement la limite $\langle z \rangle \rightarrow L$, comme pour le cas 1D.

À faible force, en utilisant le DL ci-dessus, on trouve $\frac{\langle z \rangle}{L} \simeq \frac{f\ell}{3k_B T}$, ce qui donne un comportement élastique également, comme dans le modèle 1D.

Le comportement d'élasticité entropique se retrouve donc par les deux modèles, avec toutefois une constante élastique effective

$$k_{\text{ADN}}^{3\text{D}} = \frac{3k_B T}{L\ell} = 3k_{\text{ADN}}^{1\text{D}}.$$

B.3. Élasticité entropique : thermodynamique

Dans la partie précédente, nous avons déterminé le comportement élastique de la molécule d'ADN en la modélisant comme un polymère. Son élasticité vient de la tendance du système à rester dans un état désordonné, plutôt qu'à s'allonger dans un état moins probable. Nous allons maintenant faire un lien plus direct avec le concept d'entropie.

Cas extrêmes Pour commencer, faisons un simple décompte du nombre d'états dans deux conditions extrêmes et dans un cas simple, pour évaluer l'entropie correspondante. Considérons un polymère 1D, constitué de N monomères pouvant s'orienter dans deux sens opposés : $z_i = \pm\ell$.

48. — Dans le cas de force nulle les orientations sont aléatoires. Déterminer le nombre de configurations différentes correspondant à cet état.
- Dans le cas d'une force suffisamment élevée, tous les monomères s'orientent dans le sens de la force. Déterminer le nombre de configurations différentes correspondant à cet état.
- En utilisant la définition statistique de l'entropie, donner l'entropie pour chacun de deux états considérés aux deux conditions précédentes, $S_{f=0}$ et $S_{f \gg f_0}$, où $f_0 = k_B T / \ell$.

— Faire l'application numérique pour $N = 100$.

Solution:

Dans le cas de force nulle, pour chaque monomère nous avons deux états possibles, donc au total (les probabilités se multipliant) 2^N configurations.

Dans le cas d'une force suffisamment élevée, on aura **une seule** configuration, car il n'y a pas de choix possible.

La définition statistique d'entropie est $S = k_B \ln \Omega$, avec Ω le nombre de configurations, ou *microétats*, correspondants à un état macroscopique du système.

On a ainsi

$$S_{f \gg f_0} = k_B \ln 1 = 0 ;$$

$$S_{f=0} = k_B \ln 2^N = N k_B \ln 2.$$

Pour $N = 100$ on a donc

$$S_{f=0} \simeq 100 \times 1,38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \times 0,693 = 95,65 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \sim 10^{-21} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}.$$

Cas général Dans le cas général, mais pour des forces suffisamment faibles, on peut montrer que l'entropie de la chaîne dans une conformation d'extension z s'écrit

$$S = S_0 - k_B \frac{3z^2}{2N\ell^2}, \quad (10)$$

où S_0 est une constante.

49. — Expliquer pourquoi l'énergie *interne* U du système est toujours nulle, en vous appuyant sur la définition du modèle utilisé. Nous ne considérons pas ici la contribution de l'énergie cinétique.
- Dédurre l'expression de l'énergie libre F du système.
- Justifier la relation suivante entre la force f et l'extension z : $f = \frac{\partial F}{\partial z}$.
- En déduire une relation force-extension valable pour des forces suffisamment faibles.
- Comparer avec les résultats trouvés dans la sous-section B.2.

Solution:

Les monomères **n'interagissent pas** les uns avec les autres. Par conséquent, l'énergie interne est nulle.

Par définition $F = U - TS$. On a $U = 0$, donc $F = -TS = -TS_0 + k_B T \frac{3z^2}{2N\ell^2}$.

La relation $f = \frac{\partial F}{\partial z}$ traduit le fait qu'un **travail élémentaire** $f dz$ de la force f détermine une **variation d' F d'énergie libre**. En effet, cette énergie est emmagasinée sous forme d'une variation d'entropie, d'où l'utilisation de l'énergie libre plutôt que d'une énergie interne.

En utilisant l'expression de l'énergie libre $F = -TS_0 + k_B T \frac{3z^2}{2N\ell^2}$ déterminée à la question précédente on trouve

$$f = \frac{\partial F}{\partial z} = k_B T \frac{3z}{N\ell^2} = \frac{3k_B T}{L\ell} z.$$

On retrouve ainsi la constante élastique $k_{\text{ADN}}^{3\text{D}}$ déterminée à la question 47.

C. Modélisation de l'ADN comme une longue tige flexible

Dans la section B la molécule d'ADN a été modélisée comme une suite de N segments rigides de longueur ℓ , ou monomères, dont les orientations sont aléatoires et complètement indépendantes les uns des autres. La constante élastique effective $k_{\text{ADN}}^{3\text{D}}$ (Équation 9, question 47) dépend de ces deux paramètres.

Pour l'évaluer de manière quantitative, il faut cependant établir la valeur de la longueur ℓ du monomère.

C.1. Ajustement avec le « modèle du ver »

Pour commencer, on peut donner une estimation de ℓ à partir des données expérimentales. Les données force-extension de la Figure 7 peuvent être ajustées par un modèle plus réaliste basé sur la représentation de la molécule d'ADN comme une corde souple, appelé le « modèle du ver ». Dans ce modèle, la force f et l'extension z sont liées par la relation

$$f = \frac{2k_B T}{\ell} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \left(1 - \frac{z}{L} \right)^{-2} \right) \quad (11)$$

où L et ℓ sont les mêmes paramètres que précédemment.

50. Par un développement limité à l'ordre 1, montrer que pour des faibles valeurs de $\frac{z}{L}$ le comportement du « modèle du ver » est élastique, de constante élastique $k_{\text{ADN}}^{3\text{D}}$ (Équation 9).

Solution:

On écrit

$$\left(1 - \frac{z}{L} \right)^{-2} = \left(1 + 2\frac{z}{L} \right) + O(z^2),$$

d'où

$$f = \frac{2k_B T}{\ell} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \frac{z}{L} \right) = \frac{3k_B T}{\ell L} z$$

qui correspond à l'Équation 9, avec constante élastique $k_{\text{ADN}}^{3\text{D}} = \frac{3k_B T}{\ell L}$.

51. Un ajustement des données de la Figure 7 par le module de l'Équation 11 permet d'obtenir l'estimation $k_{\text{ADN}}^{3\text{D}} \simeq (7,70 \pm 0,40) \times 10^{-6} \text{ pN} \cdot \text{nm}^{-1}$.
- Déduire une estimation du paramètre ℓ .
 - Attribuer une incertitude à cette estimation.
 - En comparant avec la Figure 1, estimer grossièrement le nombre n_ℓ de paires de bases qui constituent un segment d'ADN de longueur ℓ .

Solution:

À partir de l'expression $k_{\text{ADN}}^{3\text{D}} = \frac{3k_B T}{\ell L}$,

et en utilisant $L = 16,5 \text{ } \mu\text{m} = 16500 \text{ nm}$ et $k_B T \sim 4,11 \times 10^{-21} \text{ J} = 4,11 \text{ pN} \cdot \text{nm}$, on a

$$\ell = \frac{3k_B T}{L k_{\text{ADN}}^{3\text{D}}} \simeq \frac{3 \cdot 4,11 \text{ pN} \cdot \text{nm}}{16,5 \times 10^3 \text{ nm} \cdot 7,7 \times 10^{-6} \text{ pN} \cdot \text{nm}^{-1}} = 97,76 \text{ nm}.$$

L'incertitude type relative sur ℓ est la même que sur $k_{\text{ADN}}^{3\text{D}}$:

$$\frac{\Delta \ell}{\ell} = \frac{\Delta k_{\text{ADN}}^{3\text{D}}}{k_{\text{ADN}}^{3\text{D}}} = \frac{0,4}{7,7} = 0,052 \simeq 5\%$$

d'où l'on obtient $\Delta \ell = \pm 5,1 \text{ nm}$ et/ou $\ell = (97,8 \pm 5,1) \text{ nm}$. et/ou $\ell = (98 \pm 5) \text{ nm}$.

Une paire de base mesure $0,34 \text{ nm}$. On a donc $n_\ell \simeq \frac{100 \text{ nm}}{0,34 \text{ nm}} \sim 300$ paires de bases.

C.2. L'ADN comme une tige élastique : traction

Une approche possible pour justifier la valeur de ℓ est d'évaluer la rigidité mécanique de l'ADN lorsqu'il est soumis à une flexion. Pour ce faire, on modélise l'ADN comme une tige élastique de section cylindrique de rayon r et module de Young Y .

52. Préciser l'unité usuelle du module de Young Y (définition en préambule). Justifier qu'il peut être assimilé à l'énergie par unité de volume qui assure la cohésion d'un matériau et en donner une interprétation microscopique.

Solution:

On a $\sigma = Y\varepsilon$, avec $\varepsilon = (L - L_0)/L_0$ l'allongement relatif, ou déformation (adimensionnel), et $\sigma = f/A$ est la contrainte (en unité de pression, ou Pa dans le S.I.).

Y s'exprime donc en **unité de pression**, Pa (ou $\text{N} \cdot \text{m}^{-2}$).

Par analyse dimensionnelle, une pression est une force par unité de surface, donc aussi une **énergie par unité de volume**, ce qui est cohérent avec l'affirmation donnée.

Physiquement, le module élastique caractérise la rigidité d'un matériau, donc la résistance à la déformation élastique. L'origine microscopique de cette résistance est liée aux **forces intermoléculaires ou interatomiques**, qui maintiennent les molécules ou atomes ensemble à des distances données et qui contrent donc leur éloignement sous l'action d'une contrainte extérieure. Ces forces interatomiques dérivant de l'énergie de cohésion, on a un lien entre cette énergie et Y .

53. Les métaux et les verres cristallins sont maintenus ensemble par des liaisons covalentes dont l'énergie est de l'ordre de l'eV, à une densité de l'ordre d'une liaison par angström cube. Trouver le module d'Young typique d'un cristal à liaisons covalentes et comparer avec les valeurs données dans le Tableau 1.

Solution:

Nous pouvons estimer le module typique d'un cristal à liaison covalente comme l'énergie de cohésion par unité de volume dans le solide, c'est-à-dire :

$$Y \sim E_{\text{par liaison}} \cdot \rho,$$

où ρ est le nombre de liaisons par unité de volume, de l'ordre de $1/(1 \text{ \AA})^3 = 10^{30} \text{ m}^{-3}$.

On convertit en S.I. $1 \text{ eV} = e \times V \simeq 10^{-19} \text{ CV} = 10^{-19} \text{ J}$. On a donc

$$Y \sim E_{\text{par liaison}} \cdot \rho \sim 10^{-19}/10^{-30} \text{ J} \cdot \text{m}^{-3} = 10^{11} \text{ Pa} = 100 \text{ GPa},$$

qui se compare par exemple à ce qui est donné pour le cuivre, l'acier...

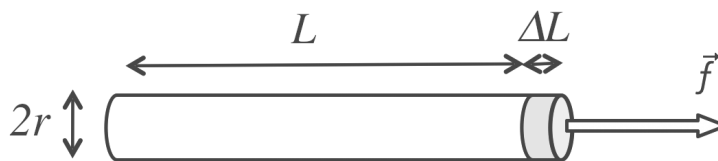


FIGURE 9 – Modèle de tige élastique de longueur L , rayon r , soumis à une force $\vec{f}$ qui induit un allongement ΔL .

Pour étudier la rigidité en flexion d'une tige élastique, il faut d'abord étudier son comportement lorsqu'elle est soumise à une force de traction (ou à une compression). On considère donc un cylindre solide de longueur L et rayon r et de module de Young Y . Soumis à une force de traction f , le cylindre s'allonge d'une longueur ΔL (voir Figure 9).

54. — Déterminer l'énergie E_{etirem} associée à l'étirement ΔL du cylindre en fonction des données du problème.
 — En déduire une expression de l'énergie d'étirement par unité de volume e_{etirem} , sous la forme

$$e_{\text{etirem}} = \alpha \left(\frac{\Delta L}{L} \right)^2,$$

Matériau	Y ($\times 10^9$ unité S.I.)
Caoutchouc (faible contrainte)	0,01 – 0,1
Plastiques	0,2 – 5
Bois	10
Os cortical humain	14
Verre	50-90
Aluminium	69
Cuivre	117
Acier	200
Tungstène	400
Diamant	1050 – 1200

Tableau 1 – Module de Young de certains matériaux. Source : Wikipédia.

avec α une constante que l'on précisera.

Solution:

On connaît la relation entre la force et l'allongement par la loi de Hooke, $\sigma = \frac{f}{\pi r^2} = Y \frac{\Delta L}{L}$.

On peut en déduire l'énergie d'étirement du cylindre s'écrit comme le travail de la force f entre les valeurs 0 et ΔL de l'étirement

$$E_{\text{etirement}} = \int_0^{\Delta L} f \, dx = \int_0^{\Delta L} \pi r^2 Y \frac{x}{L} dx = \pi r^2 Y \frac{\Delta L^2}{2L}.$$

Par unité de volume :

$$e_{\text{etirement}} = \frac{E_{\text{etirement}}}{V} = \frac{\pi r^2 Y \Delta L^2}{\pi r^2 L \cdot 2L} = \frac{1}{2} Y \left(\frac{\Delta L}{L} \right)^2.$$

On a donc $\alpha = \frac{1}{2}Y$.

C.3. Flexion et longueur de persistance

C.3.1. Énergie de courbure

On considère une tige élastique de longueur L courbée par l'action de forces de flexion de manière à former un arc de cercle, de centre O et rayon R . Lorsque la tige est courbée, ses différents éléments de volume se retrouvent plus ou moins étirés. L'énergie de courbure peut être calculée en intégrant l'énergie d'étirement sur le volume, en tenant compte du degré d'étirement de chaque élément. La Figure 10 est une aide pour ce calcul.

Après avoir fixé un point P le long de l'axe de la tige élastique, on choisit un repère cartésien centré en P , dont l'axe z est orienté selon la direction $\vec{OP}$ (Figure 10) et l'axe x est orthogonal à la direction locale de l'axe de la tige.

55. Déterminer la largeur $w(z)$ de la tige à la hauteur z .

En déduire le volume $dv(z)$ de la tranche de tige comprise entre les hauteurs z et $z + dz$. Pour cette question, on néglige toute variation de la longueur L avec z .

Solution:

La section étant circulaire, on a $x^2 + z^2 = r^2$ d'où $w(z) = 2x = 2(r^2 - z^2)^{1/2}$, pour tout z compris entre $-r$ et r . On déduit pour le volume

$$dv(z) = w(z) \cdot L \cdot dz = 2L \, dz \, (r^2 - z^2)^{1/2}.$$

56. Déterminer la longueur $L(z)$ de la tranche de tige de hauteur z et en déduire l'allongement $\Delta L(z)$ correspondant.

Solution:

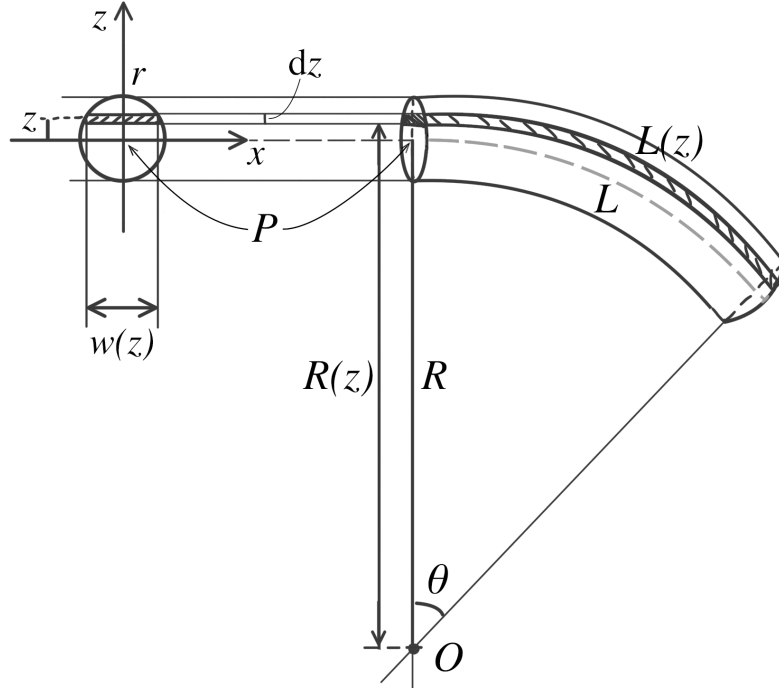


FIGURE 10 – Tige élastique de longueur L courbée. La courbure est uniforme, le rayon de courbure est noté R . À gauche, on a une vue en coupe de la section de la tige, à droite une vue de côté.

La proportionnalité entre les deux secteurs circulaires permet d'écrire $\frac{R}{L(0)} = \frac{R+z}{L(z)}$, avec $L(0) = L$, d'où

$$L(z) = \frac{R+z}{R} L(0) = \left(1 + \frac{z}{R}\right) L$$

et par conséquent

$$\Delta L(z) = \frac{z}{R} L.$$

57. En intégrant $e_{\text{etirement}}$ sur tout le système, montrer que l'énergie de courbure de la tige s'écrit

$$E_{\text{flexion}} = \frac{1}{2} B \frac{1}{R^2} L, \quad (12)$$

Avec B une constante que l'on exprimera sous la forme $B = \kappa Y$.

Certains éléments de calcul sont donnés en préambule.

Solution:

$$E_{\text{flexion}} = \int_V e_{\text{etirement}} dv = \int_{-r}^{+r} \frac{Y}{2} \left(\frac{\Delta L}{L}\right)^2 2L (r^2 - z^2)^{1/2} dz = \int_{-r}^{+r} \frac{Y}{2} \left(\frac{z}{R}\right)^2 2L (r^2 - z^2)^{1/2} dz$$

Un peu d'arithmétique et le changement de variable $x = z/r$ conduisent à

$$E_{\text{flexion}} = \frac{Y r^4}{R^2} L \int_{-1}^{+1} x^2 (1 - x^2)^{1/2} dx.$$

L'intégrale est donnée en préambule.

Elle peut être calculée en prenant $x = \sin \theta$, d'où

$$dx = \cos \theta d\theta,$$

$$\sqrt{1-x^2} = \cos \theta,$$

et où $x = \pm 1$ donne $\theta = \pm \pi/2$:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} dx x^2 (1-x^2)^{1/2} &= \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \sin^2 \theta \cos^2 \theta = \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \frac{1}{4} \sin^2(2\theta) = \\ &= \frac{1}{4} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} d\theta \frac{1 - \cos(4\theta)}{2} = \frac{1}{8} \left[\theta - \frac{\sin(4\theta)}{4} \right]_{-\pi/2}^{+\pi/2} \\ &= \frac{1}{8} \left[\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} - \frac{1}{4} (\sin(2\pi) - \sin(-2\pi)) \right] = \frac{\pi}{8} \end{aligned}$$

Avec ces résultats, nous obtenons l'expression attendue

$$E_{\text{flexion}} = \frac{\pi Y r^4}{8 R^2} L = \frac{1}{2} \frac{\pi Y r^4}{4 R^2} L = \frac{1}{2} B \frac{1}{R^2} L,$$

avec $B = \frac{\pi r^4}{4} Y = \kappa Y$.

58. En s'appuyant sur les données de la Figure 1 montrer que, pour l'ADN, la constante κ vaut $0,78 \times 10^{-36}$ S.I.

Solution:

La Figure 1 permet d'estimer le rayon de l'ADN $r = 1$ nm, d'où

$$\kappa = \frac{\pi r^4}{4} = \frac{\pi}{4} (1 \text{ nm})^4 = 0,78 \times 10^{-36} \text{ m}^4.$$

59. Discuter la dépendance de la rigidité d'une tige élastique de son diamètre. Par exemple, quelle serait la rigidité de l'ADN si son diamètre devait doubler ?

Solution:

La rigidité en flexion, quantifiée par la constante B , est **proportionnelle à la puissance 4 de son rayon** (ou diamètre), et en dépend donc très fortement. Si le diamètre de la molécule d'ADN était double (tout en imaginant une structure moléculaire équivalente), la molécule aurait une **rigidité** $2^4 = 16$ **fois supérieure**.

60. Dédurre de l'Équation 12 une expression pour l'énergie de courbure par unité de longueur, e_{flexion} , en fonction de R . L'exprimer ensuite en fonction de l'angle du secteur circulaire θ (voir Figure 10).

Solution:

Par unité de longueur, $e_{\text{flexion}} = \frac{E_{\text{flexion}}}{L} = \frac{1}{2} B \frac{1}{R^2} = \frac{1}{2} B \left(\frac{\theta}{L} \right)^2$ car, par définition, $\theta = L/R$.

C.3.2. Fluctuations thermiques

61. Évaluer l'amplitude angulaire $\sqrt{\langle \theta^2 \rangle}$ des fluctuations spontanées d'une tige élastique dues à un mouvement thermique en utilisant le théorème d'équipartition. Déterminer l'expression de la longueur caractéristique $L = L_P$ pour laquelle ces fluctuations sont de l'ordre de 1 rad^2 à température ambiante.

La longueur L_P s'appelle longueur de persistance.

Solution:

Le théorème d'équipartition affirme que chaque degré de liberté quadratique dans l'énergie a une valeur moyenne de $\frac{1}{2}k_B T$:

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{B}{R^2} L \right\rangle = \left\langle \frac{BL}{2} \left(\frac{\theta}{L} \right)^2 \right\rangle \simeq \frac{k_B T}{2}.$$

Ceci implique que $\langle \theta^2 \rangle \simeq \frac{k_B T L}{B}$: donc $\langle \theta^2 \rangle \simeq 1 \text{ rad}^2$ si

$$L \simeq L_P = \frac{B}{k_B T} = \frac{\pi Y r^4}{4 k_B T}$$

Dérivation alternative plus compliquée :

$$\langle \theta^2 \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2 \exp \left(-\frac{\frac{1}{2} BL (\theta/L)^2}{k_B T} \right) d\theta}{\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{\frac{1}{2} BL (\theta/L)^2}{k_B T} \right) d\theta}.$$

Limites d'intégration approchées justifiées par la décroissance rapide de l'exponentielle.

C.4. Retour sur le « modèle du ver » et comparaison avec le modèle de chaîne librement jointe

À partir de ces résultats, on peut modéliser une molécule d'ADN comme un long fil élastique de section cylindrique et longueur de persistance L_P . C'est le « modèle du ver ». La position le long du fil est indiquée par une variable curviligne s . Pour chaque position s , les informations géométriques de la chaîne linéaire sont entièrement décrites grâce au repère de Frenet, dans lequel trois vecteurs unitaires orthogonaux forment un trièdre mobile, à savoir

$\vec{t}$ le vecteur tangent,

$\vec{n}$ le vecteur normal,

$\vec{b}$ le vecteur binormal.

On peut alors calculer la *fonction de corrélation* du vecteur tangent, définie par la moyenne $\langle \vec{t}(s) \cdot \vec{t}(s') \rangle$ et qui a, dans ce modèle, la forme

$$\langle \vec{t}(s) \cdot \vec{t}(s') \rangle = \exp[-|s' - s|/L_P].$$

62. Tracer la fonction de corrélation du vecteur tangent en faisant apparaître toute grandeur utile à sa caractérisation.

Solution:

Tracé : Exponentielle décroissante en fonction de $s' - s$, on fait apparaître L_P comme longueur caractéristique de la décroissance exponentielle.

63. On définit le vecteur « bout-à-bout » $\vec{R}(L)$ qui relie un point du fil, dont la position est donnée par la variable curviligne s , à un autre point qui se trouve en s' tel que la distance curviligne entre les deux points est $L = |s' - s|$.

Justifier la relation suivante :

$$\vec{R}(L) = \int_s^{s+L} \vec{t}(u) du$$

Solution:

Dans cette expression, $\vec{t}(u)du$ est le vecteur infinitésimal qui représente la contribution à la « trajectoire » du fil élastique au point u .

En sommant (via l'intégrale) toutes ces contributions, on obtient donc le « déplacement » entre la première et la dernière position, s et $s + L$.

64. La moyenne du module carré de $\vec{R}(L)$ peut s'écrire

$$\langle R^2(L) \rangle = \int_0^L ds \int_0^L ds' \langle \vec{t}(s) \cdot \vec{t}(s') \rangle.$$

Montrer que cette grandeur est donnée par

$$\langle R^2(L) \rangle = 2LL_P \left[1 - \frac{L_P}{L} (1 - e^{-L/L_P}) \right].$$

Certains éléments de calcul sont donnés en préambule.

Solution:

$$\langle R^2(L) \rangle = \int_0^L ds \int_0^L ds' \langle \vec{t}(s) \cdot \vec{t}(s') \rangle = \int_0^L ds \int_0^L ds' e^{-\frac{|s-s'|}{L_P}}.$$

Grâce à la symétrie de la fonction à intégrer par rapport à s et s' on peut réécrire la double intégrale comme donné en préambule et précisé ci de suite.

On écrit l'intégrale comme deux fois l'intégrale sur la moitié du domaine d'intégration, puis faire un changement de variable :

$$= 2 \int_0^L ds \int_0^s ds' e^{-\frac{s-s'}{L_P}} = 2 \int_0^L ds \int_s^0 (-ds'') e^{-\frac{s''}{L_P}} = 2 \int_0^L ds \int_0^s ds'' e^{-\frac{s''}{L_P}};$$

Le domaine d'intégration est un triangle dans l'espace (s, s'') dont les sommets sont les points $(0, 0)$, $(L, 0)$ et (L, L) , qu'on peut donc récrire comme

$$\langle R^2(L) \rangle = 2 \int_0^L ds'' \int_{s''}^L ds e^{-\frac{s''}{L_P}}$$

On peut donc finalement intégrer :

$$\langle R^2(L) \rangle = 2 \int_0^L ds'' (L - s'') e^{-\frac{s''}{L_P}} = 2LL_P \left[1 - \frac{L_P}{L} \left(1 - e^{-\frac{L}{L_P}} \right) \right].$$

65. Discuter les limites $L \ll L_p$ et $L \gg L_p$ pour ce modèle.

Solution:

Pour $L \ll L_p$, on s'attend à ce que le polymère soit très rigide. En considérant l'expansion de l'exponentielle jusqu'au second ordre, on trouve

$$2LL_P \left[1 - \frac{L_P}{L} \left(1 - 1 + \frac{L}{L_P} - \frac{L^2}{2L_P^2} \right) \right] = 2LL_P \left[1 - 1 + \frac{L}{2L_P} \right] = L^2,$$

et donc $\langle R^2(L) \rangle \simeq L^2$ dans cette limite.

Ceci est attendu, puisque dans cette limite le polymère se comporte simplement **comme une tige rigide** de longueur L .

Dans la limite opposée $L \gg L_p$, on trouve $\langle R^2(L) \rangle \simeq 2L_P L$.

En comparant avec la question 36, on peut déduire que le comportement de $\langle R^2(L) \rangle$ est équivalent à celui du modèle de chaîne librement jointe, constitué de N segments articulés de même longueur ℓ (à force nulle), pourvu que L soit suffisamment grand.

66. — Déterminer la longueur ℓ des segments du modèle de chaîne librement jointe pour que les deux résultats coïncident.
- Donner une interprétation de ce résultat faisant le lien entre les propriétés mécaniques du modèle de tige élastique et les hypothèses sous-jacentes au modèle en segments rigides.
 - À partir des données expérimentales on estime $\ell \simeq 100$ nm. Déterminer le module d'élasticité en flexion B et le module de Young Y de l'ADN. À quel type de matériaux peut-on comparer la rigidité de l'ADN ?

Solution:

On compare le résultat $\langle R^2(L) \rangle \simeq 2L_P L \propto L$, à celui obtenu plus haut pour le modèle discret (analogue à une marche aléatoire) $\langle z^2(N) \rangle = \ell L$: il faut donc choisir des segments de longueur $\ell = 2L_p$ pour que les deux **distances moyennes**, $\langle R^2(L) \rangle$ et $\langle z^2(N) \rangle$, soient **identiques**.

Ceci se comprend car L_P donne une mesure de la rigidité de la tige : ce n'est que si la longueur des segments rigides (monomères) est **suffisamment grande** que leurs **orientations** peuvent être considérées comme **indépendantes**.

Si $\ell \simeq 100$ nm, alors $L_p \simeq 50$ nm. De plus, on a $k_B T \simeq 4 \times 10^{-21}$ S.I. et le rayon de l'ADN $r \simeq 1$ nm. Par conséquent, on trouve

$$B = k_B T \cdot L_p \simeq 2 \times 10^{-28} \text{ J} \cdot \text{m}$$

et, puisque $B = \frac{\pi r^4}{4} Y = \kappa Y$, avec $\kappa = 0,78 \times 10^{-36} \text{ m}^4$,

$$Y = \frac{B}{\kappa} = \frac{2 \times 10^{-28} \text{ J} \cdot \text{m}}{0,78 \times 10^{-36} \text{ m}^4} = 2,5 \times 10^8 \text{ Pa}.$$

En comparant à ceux d'autres matériaux, données dans la Table 1 : on est **proche des plastiques**.