TD1 : Statistique d'une chaîne de polymère (correction)

1°/ Si p est la probabilité de faire un pas à droite, alors $q = 1 - p$ est la probabilité de faire un pas à gauche. On a alors :

$$P = C_N^{N^+} p^{N^+} q^{N-N^+}.$$

Dans le cas d'une marche aléatoire non biaisée (ce que nous considérons ici), o a $p = q = 1/2$. Ainsi

$$P = \frac{N!}{N^+!\,(N-N^+)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{N^+}\left(\frac{1}{2}\right)^{N-N^+} = \frac{N!}{N^+!N^-!}\left(\frac{1}{2}\right).$$

La loi statistique correspondant à cette expression est la loi binômiale ou normale.

2°/

$$\begin{aligned}
\ln P &= \ln N! - \ln N^+! - \ln N^-! - N\ln 2\\
&\approx N\ln N - N + \frac{1}{2}\left[\ln(2\pi) + \ln N\right] - N^+\ln N^+ - N^+ + \frac{1}{2}\left[\ln(2\pi) + \ln N^+\right]\\
&- N^-\ln N^- - N^- + \frac{1}{2}\left[\ln(2\pi) + \ln N^-\right] - N\ln 2
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \ln P \approx \left(N + \frac{1}{2}\right)\ln N - \left(N^+ + \frac{1}{2}\right)\ln N^+ - \left(N^- + \frac{1}{2}\right)\ln N^- - N\ln 2 - \frac{1}{2}\ln(2\pi).$$

3°/ On a $N = N^+ + N^-$ et $m = \dfrac{N^+ - N^-}{2}$, soit

$$\begin{cases} N^+ + N^- = N \\ N^+ - N^- = 2m \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} N^+ = \dfrac{N+2m}{2} \\ N^- = \dfrac{N-2m}{2} \end{cases}$$

4°/ D'après 3°/ on a $N^+ = \dfrac{N}{2}\left(1 + \dfrac{2m}{N}\right)$ et $N^- = \dfrac{N}{2}\left(1 - \dfrac{2m}{N}\right)$. Donc lorsque $\dfrac{m}{M} \to 0$, on a bien

$$\begin{cases} \ln N^+ \approx \ln N - \ln 2 + \dfrac{2m}{N} - \dfrac{2m^2}{N^2} \\ \ln N^- \approx \ln N - \ln 2 - \dfrac{2m}{N} - \dfrac{2m^2}{N^2} \end{cases}$$

où on a utilisé $\ln(1+\epsilon) \approx \epsilon - \dfrac{\epsilon^2}{2}$ et $\ln(1-\epsilon) \approx -\epsilon - \dfrac{\epsilon^2}{2}$ lorsque $\epsilon \to 0$.

5°/ On injecte les expressions obtenues en 4°/ dans celle obtenue en 2°/ et on a ainsi

$$\begin{aligned}
\ln P &\approx \left(N + \frac{1}{2}\right)\ln N - \left(\frac{N+2m}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\ln N - \ln 2 + \frac{2m}{N} - \frac{2m^2}{N^2}\right)\\
&- \left(\frac{N-2m}{2} + \frac{1}{2}\right)\left(\ln N - \ln 2 - \frac{2m}{N} - \frac{2m^2}{N^2}\right) - N\ln 2 - \frac{1}{2}\ln(2\pi)\\
&\approx -\ln N + \ln 2 - 4\frac{m^2}{N} + 2\frac{m^2}{N} + 2\frac{m^2}{N^2} - \frac{1}{2}\ln(2\pi)\\
&\approx \frac{1}{2}\ln\left(\frac{2}{\pi N}\right) - \frac{2m^2}{N} \text{ en remarquant que } \frac{m^2}{N^2} \ll \frac{m^2}{N} \text{ si } N \gg 1.
\end{aligned}$$

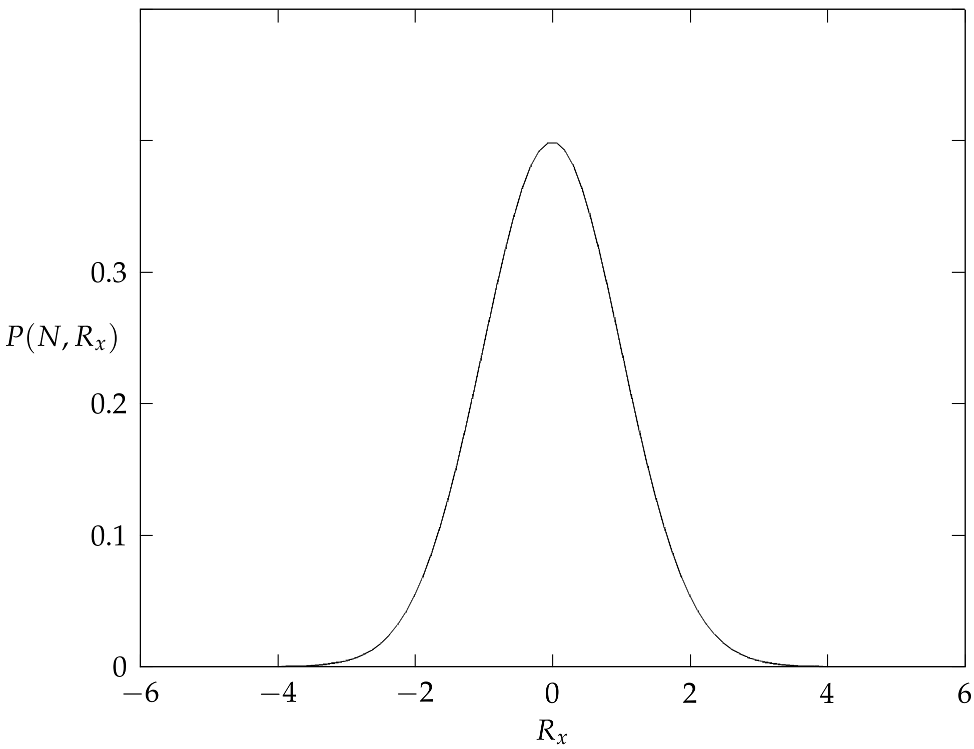
On obtient finalement

$$P(N,m) \approx \left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{2m^2}{N}\right).$$

6°/ On a $m = \frac{\sqrt{3}}{2a} R_x$, donc $dm = \frac{\sqrt{3}}{2a} dR_x$. Ainsi

$$\begin{aligned}\mathcal{P} = P(N, R_x) dR_x &\approx \left(\frac{2}{\pi N}\right)^{1/2} \frac{\sqrt{3}}{2a} \exp\left(-\frac{3R_x^2}{2Na}\right) dR_x \\ &\approx \left(\frac{3}{2\pi Na^2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{3R_x^2}{2Na^2}\right) dR_x.\end{aligned}$$

7°/



D'après les rappels de statistique en annexe, on en déduit que $P_{max}(N, R_x) = P(N, 0) = \left(\frac{3}{2\pi Na^2}\right)^{1/2}$ et que $\sigma = \left(\frac{Na^2}{3}\right)^{1/2}$.

8°/

$$\begin{aligned}< R_x > &= \int_{-\infty}^{+\infty} R_x P(N, R_x) dRx \\ &= \left(\frac{3}{2\pi Na^2}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} R_x \exp\left(-\frac{3R_x^2}{2Na^2}\right) dR_x \\ &= \left(\frac{3}{2\pi Na^2}\right)^{1/2} \times \frac{1}{2} \times \left(-\frac{2Na^2}{3}\right) \left[\exp\left(-\frac{3R_x^2}{2Na^2}\right)\right]_{-\infty}^{+\infty} \\ &= 0 = \tilde{R}_x.\end{aligned}$$

9°/ On aura exactement le même résultat dans les deux autres directions de l'espace, donc

$$< \overrightarrow{R} >= \overrightarrow{0}.$$

10°/D'après le théorème du transfert, on a

$$
\begin{aligned}
< R^2 > &= \int_0^{+\infty} R^2 P(N,R) dR \\
&= \left(\frac{3}{2\pi N a^2}\right)^{3/2} 4\pi \int_0^{+\infty} R^4 \exp\left(-\frac{3R^2}{2Na^2}\right) dR \\
&= \left(\frac{3}{2\pi N a^2}\right)^{3/2} 4\pi \frac{3}{8}\frac{4N^2a^4}{9}\left(\frac{\pi 2Na^2}{3}\right)^{1/2} = \left[\left(\frac{3}{2\pi N a^2}\right)^3 \times \frac{2\pi N a^2}{3}\right]^{1/2} \frac{2\pi N^2 a^4}{3} \\
&= \left[\left(\frac{3}{2\pi N a^2}\right)^3 \times \frac{2\pi N a^2}{3}\frac{4\pi^2 N^4 a^8}{9}\right]^{1/2} = \left[\left(Na^2\right)^2\right]^{1/2}
\end{aligned}
$$

et donc $< R^2 >= Na^2$.

11°/ Le polymère complètement étiré conduirait à $< R^2 >_{et}= N^2a^2$ et donc $< R^2 >= \dfrac{< R^2 >_{et}}{N}$.