

Les protéines

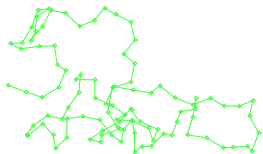
Timothée Lionnet et Vincent Croquette
<http://pimprenelle.lps.ens.fr/biolps/>

1^{er} avril 2010

Outline

Statistique d'une chaîne unique

Les monomères peuvent tourner les uns par rapport aux autres d'un angle ψ . Souvent autour d'une liaison C-C (protéine). En réalité, la rotation peut se faire sur un cône ($\theta = 109.5^\circ$), et la rotation n'est pas complètement libre. Si $U(\psi)$ ne présente pas de forts minimum la rotation est activée thermiquement. Dès que le polymère est long, le nombre de configuration est gigantesque.



Chaîne librement jointe : N maillons de longueur a

Configuration moyenne : Marche aléatoire à 1D $\sqrt{R^2} = a/\sqrt{N}$

à 3D $|\vec{R}|$ avec $\vec{R} = \sum_{i=1}^N \vec{a}_i$ ou $R_x = \sum_{i=1}^N a_{ix}$ $\langle a_{ix}^2 \rangle =$

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (a \cos\theta)^2 \sin\theta \, d\theta = \frac{a^2}{3} \quad R_x^2 = N \cdot a^2/3, \quad \langle R^2 \rangle = Na^2,$$

$$P(N, \vec{R}) d_3R = \left[\frac{3}{2\pi Na^2} \right]^{3/2} \exp\left(-\frac{3R^2}{2Na^2}\right) d_3R$$

Le modèle de la chaîne librement jointe

Mesure de l'élasticité d'un polymère dans le cas où les maillons sont complètement libre. On applique une force \vec{f} aux deux extrémités et on mesure l'allongement de la chaîne $\langle R_x \rangle$.

$f = 0$, $\langle R_x \rangle = 0$, $f \rightarrow \infty$, $\langle R_x \rangle = Na$. Analogie avec un paramagnétique : $\vec{f} \rightarrow \vec{H}$, $\langle R_x \rangle \rightarrow M$ (aimantation)

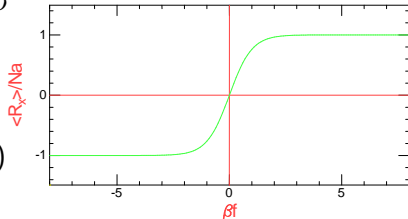
$$\text{A 1D : } Z = Z_0^N = [e^{-\beta f \cdot a} + e^{\beta f \cdot a}]^N$$

$$F = -k_B T \log(Z) = -\frac{N}{\beta} \log[e^{-\beta f \cdot a} + e^{\beta f \cdot a}]$$

$$\langle R_x \rangle = -\frac{\partial F}{\partial f}$$

$$= N \cdot a \frac{e^{\beta f \cdot a} - e^{-\beta f \cdot a}}{e^{\beta f \cdot a} + e^{-\beta f \cdot a}} = N \cdot a \operatorname{th}(\beta a \cdot f)$$

$$f \text{ petit : } \frac{\langle R_x \rangle}{Na} = \frac{af}{k_B T}$$



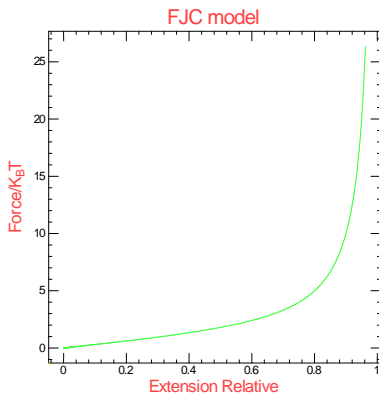
Le modèle de la chaîne à trois dimensions

$$Z = \left[\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \cdot \sin \theta \cdot e^{-\beta a \cdot f \cdot \cos \theta} \right]^N$$

$$Z = \left[\frac{2\pi k_B T}{f \cdot a} \sinh \frac{f \cdot a}{k_B T} \right]^N$$

$$l = \frac{\langle R_x \rangle}{Na} =$$

$$-\frac{\partial F}{\partial f} = Na \left[\coth \frac{f \cdot a}{k_B T} - \frac{k_B T}{f \cdot a} \right]$$



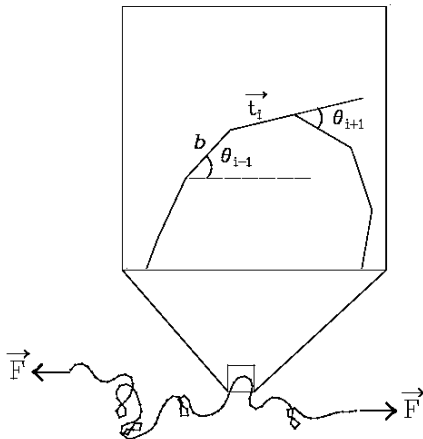
Le modèle de la chaîne à longuer de persistance

- ▶ Kratky-Porod model

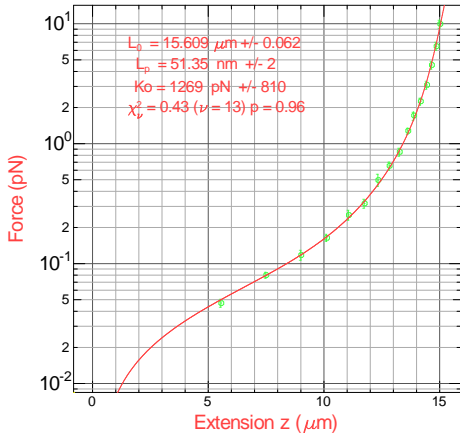
$$E_{KP} = -\frac{B}{b} \sum_{i=2}^N \vec{t}_i \cdot \vec{t}_{i-1} = -\frac{B}{b} \sum_{i=2}^N \cos \theta_i$$

$$\langle \vec{t}_i \cdot \vec{t}_{i-1} \rangle = e^{-b|i-i|/\xi}$$

$$\langle R^2 \rangle = \left[b \cdot \sum_{i=1}^N \vec{t}_i \right]^2 = 2N \cdot b \xi = 2l_0 \xi$$



Le modèle du ver (Worm Like Chain)



$$F = \frac{k_B T}{\xi_T} \times$$

$$\left[x - \frac{1}{4} + \frac{1}{4(1-x)^2} + \sum_{i=2}^{i < 8} a_i x^i \right]$$

where $x = l/l_0$ with

$$a_2 = -0.5164228, a_3 = -2.737418,$$

$$a_4 = 16.07497, a_5 = -38.87607,$$

$$a_6 = 39.49944, a_7 = -14.17718.$$

C. Bustamante, J.F. Marko, E.D. Siggia and S. Smith. 1994. "Entropic elasticity of λ -phage DNA." *Science*, 265 : 1599–1600.

C. Bouchiat, M.D. Wang, S. M. Block, J.-F. Allemand, T.R. Strick and V. Croquette. "Estimating the persistence length of a worm-like chain molecule from force-extension measurements." *Biophys. J.*,

76 :409–413, 1999.