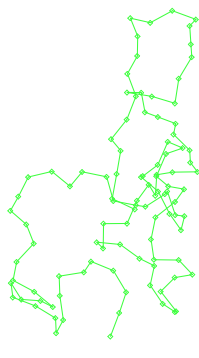


Statistique d'une chaîne unique

○ 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 $R_x = \sum_{i=1}^N a_{ix} \quad \langle a_{ix}^2 \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (a \cos \theta)^2 \sin \theta \cdot d\theta = \frac{a^2}{3}$

$$R_x^2 = N \cdot a^2 / 3, \quad \langle R^2 \rangle = Na^2, \quad P(N, \vec{R}) \, d_3 R = \left[\frac{3}{2\pi Na^2} \right]^{3/2} \exp\left(-\frac{3R^2}{2Na^2}\right) \, d_3 R$$

Modèle de la chaîne librement jointe

Mesure de l'élasticité d'un polymère dans le cas où les maillons sont complètement libres. On applique une force 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).

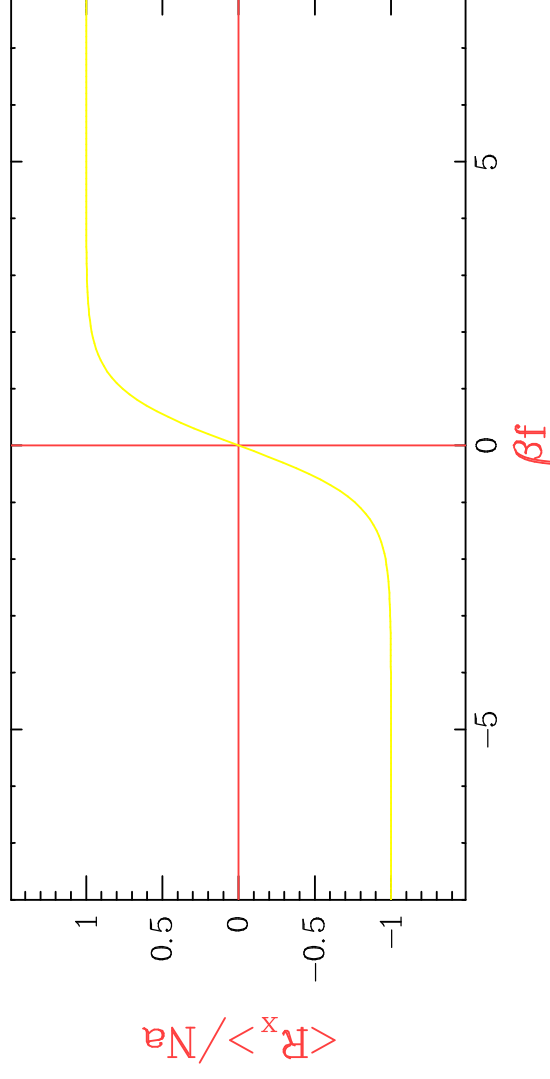
○ Cas 1D

$$Z = Z_0^N = [e^{-\beta f a} + e^{\beta f a}]^N$$

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

$$\langle R_x \rangle = -\frac{\partial F}{\partial f} = Na \frac{e^{\beta f a} - e^{-\beta f a}}{e^{\beta f a} + e^{-\beta f a}} = Na \operatorname{th}(\beta f a)$$

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



○ 3D case

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

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

$$1 = \frac{\langle R_x \rangle}{Na} = - \frac{\partial F}{\partial f} = Na \left[\coth \frac{fb}{k_B T} - \frac{k_B T}{fb} \right]$$

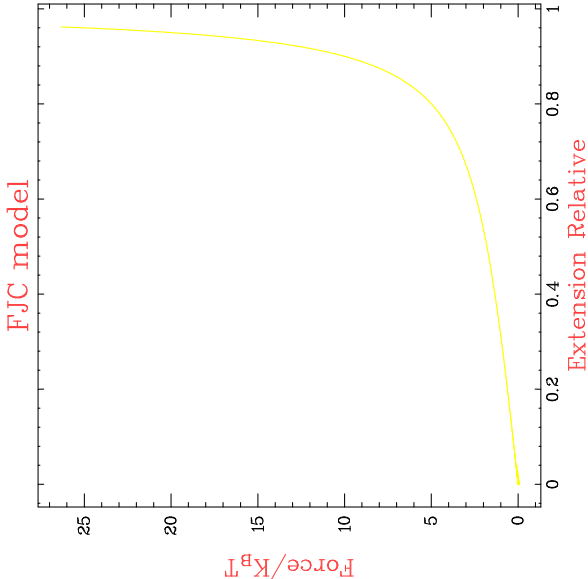
○ persistence length ξ

Kratky–Porod model

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

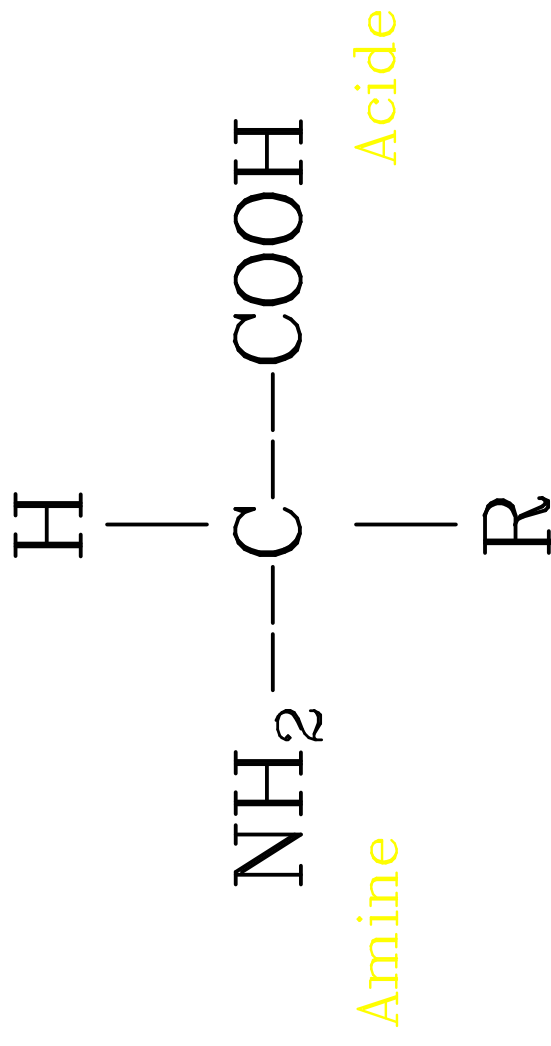
$$\langle \vec{t}_i . \vec{t}_{i-1} \rangle = e^{-a|i-i|/\xi}$$

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



Protéines = Macromolécules

Monomères = acides aminés

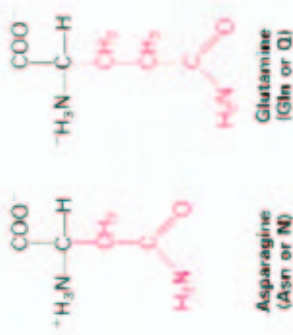
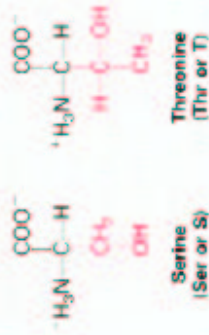


R = résidu, chaîne latérale

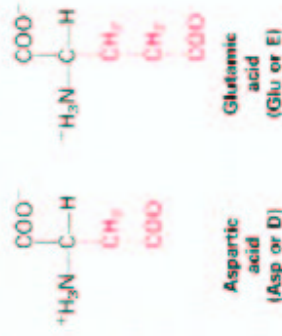
Les 20 acides aminés

Les propriétés des résidus sont très différentes, leur encombrement également.

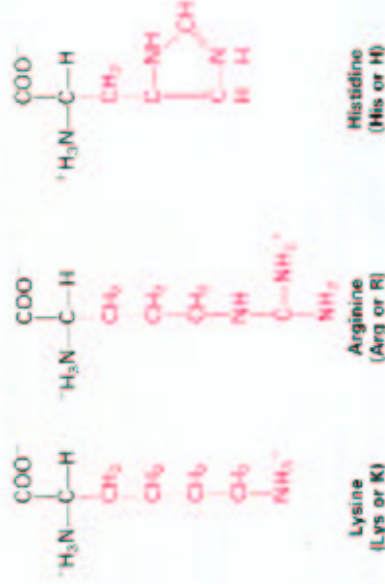
Polar amino acids with uncharged R groups



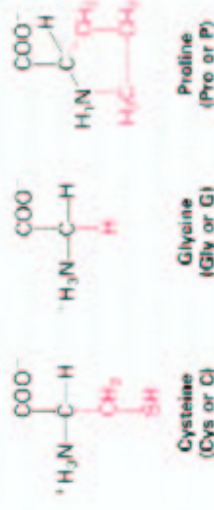
Acidic amino acids



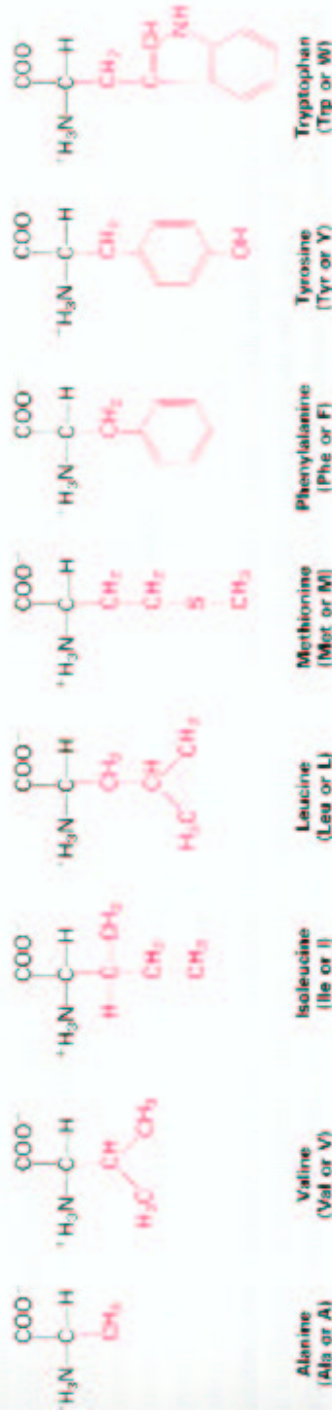
Basic amino acids



SPECIAL AMINO ACIDS



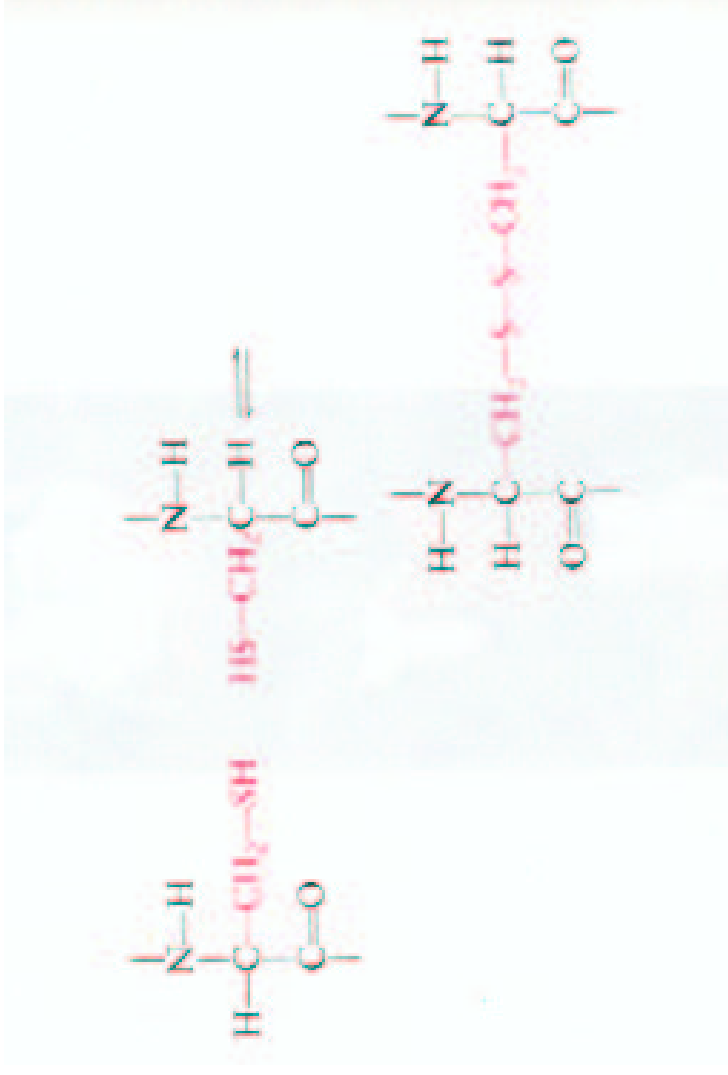
HYDROPHOBIC AMINO ACIDS



Les acides aminés présentent des interactions entre eux

Une seule interaction covalente possible : entre deux cystéines par les atomes de soufre

L'acide performique $\text{H}-\text{CO}-\text{OOH}$ clive les ponts disulfure. On peut aussi utiliser le β -mercaptoéthanol $\text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{SH}$.



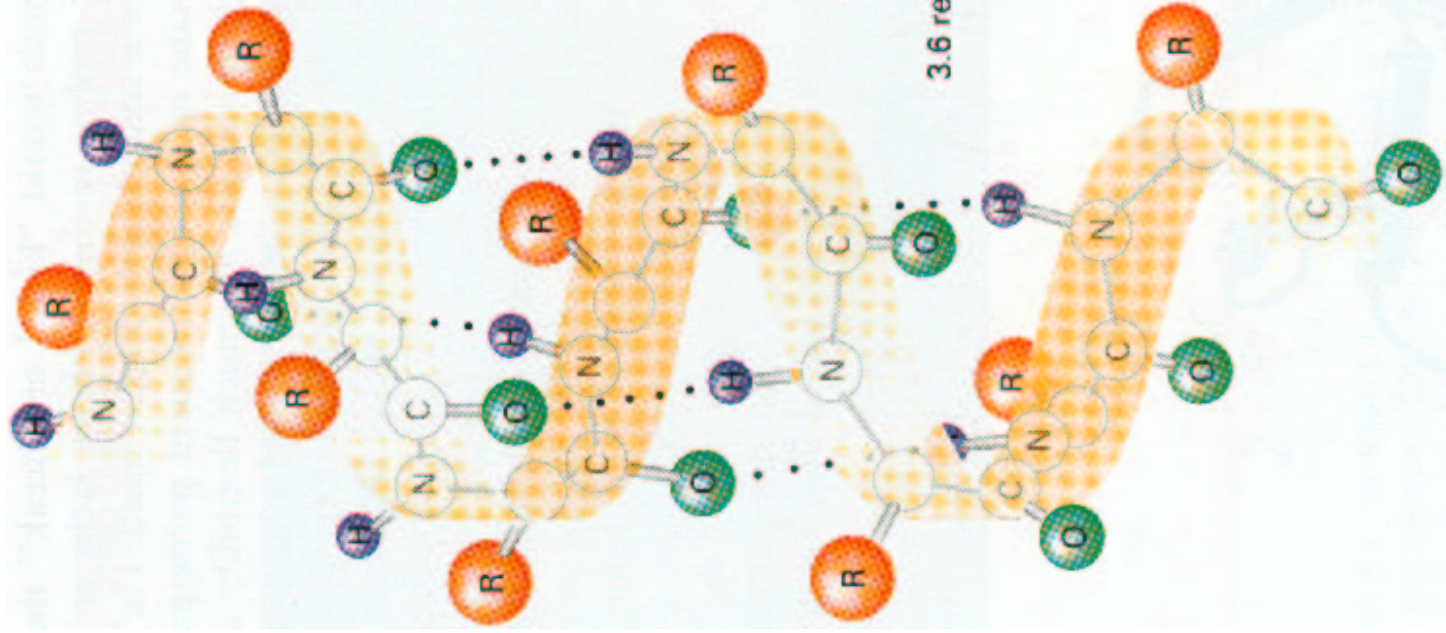
Toutes les autres interactions sont des liaisons faibles : électrostatiques (NH_3^+ et OH^-), hydrophobique (cycles aromatiques), polaire, de Van der Waals.

Hélice α

Structure primaire : agencement des acides aminés sur la chaîne polymérique : NH_2 Ala Asn Lys Gly Phe LeuGla Ser Leu COOH .

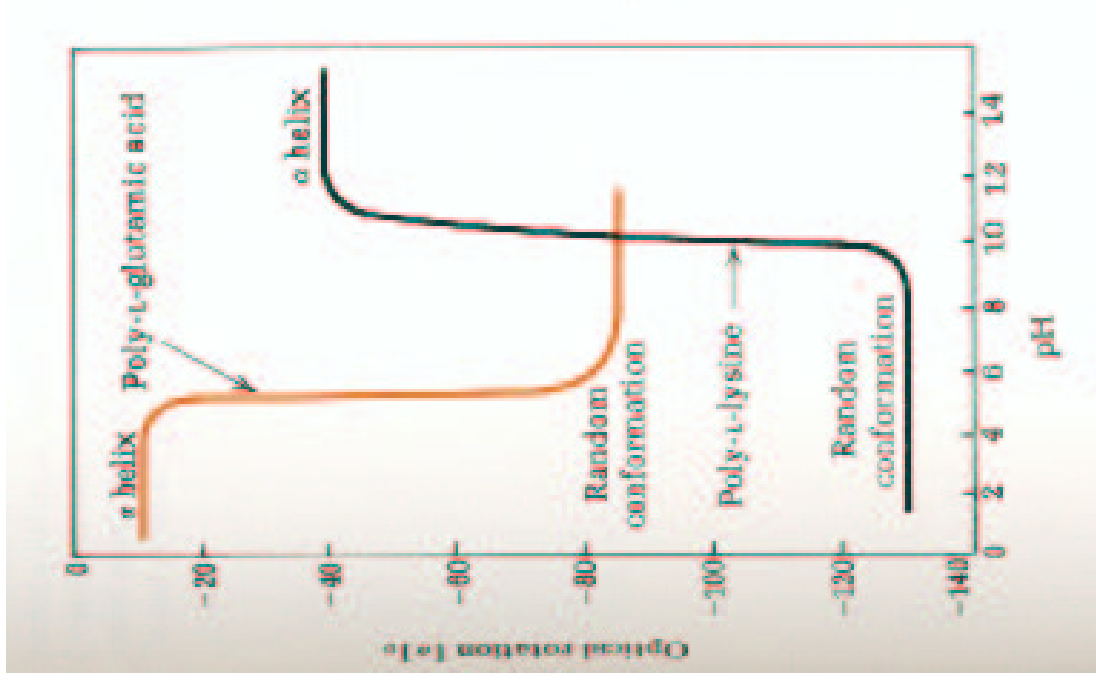
Structure secondaire : structuration du polymère liée aux interactions faibles entre résidus.

L'hélice α correspond à une structure en forme de batonnet stabilisé principalement par les liaisons hydrogènes entre NH et CO des résidus R_n et $\text{R}_{n-(3,4)}$. Chaque résidu est traduit de 1,5 Angstroms le long de l'axe. Il y-a 3,6 résidus par tours. Le pas de l'hélice α est de 5.4 Angstroms. En principe on peut avoir des hélices droites ou gauche, en pratique on ne trouve que des hélices α droites dans les protéines.



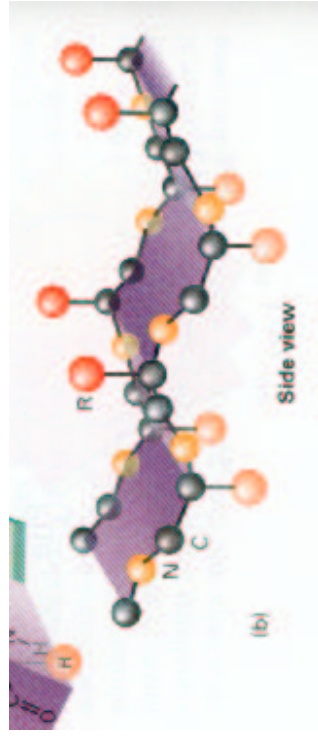
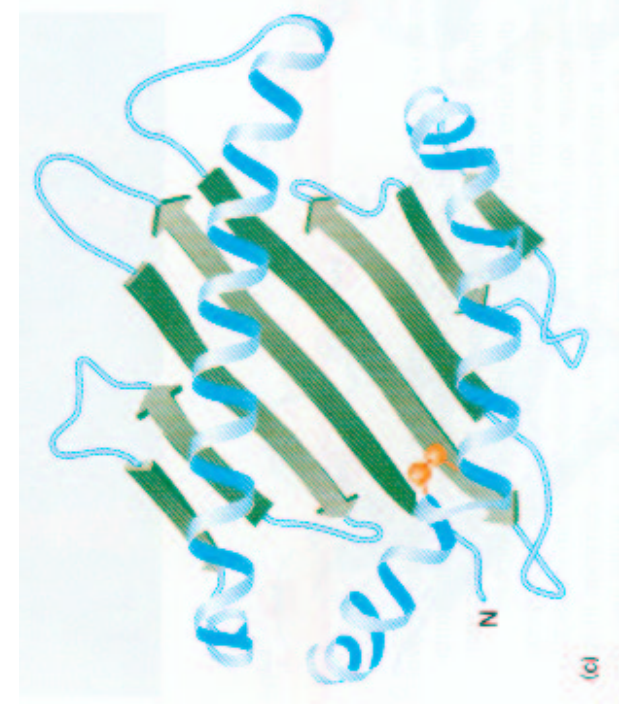
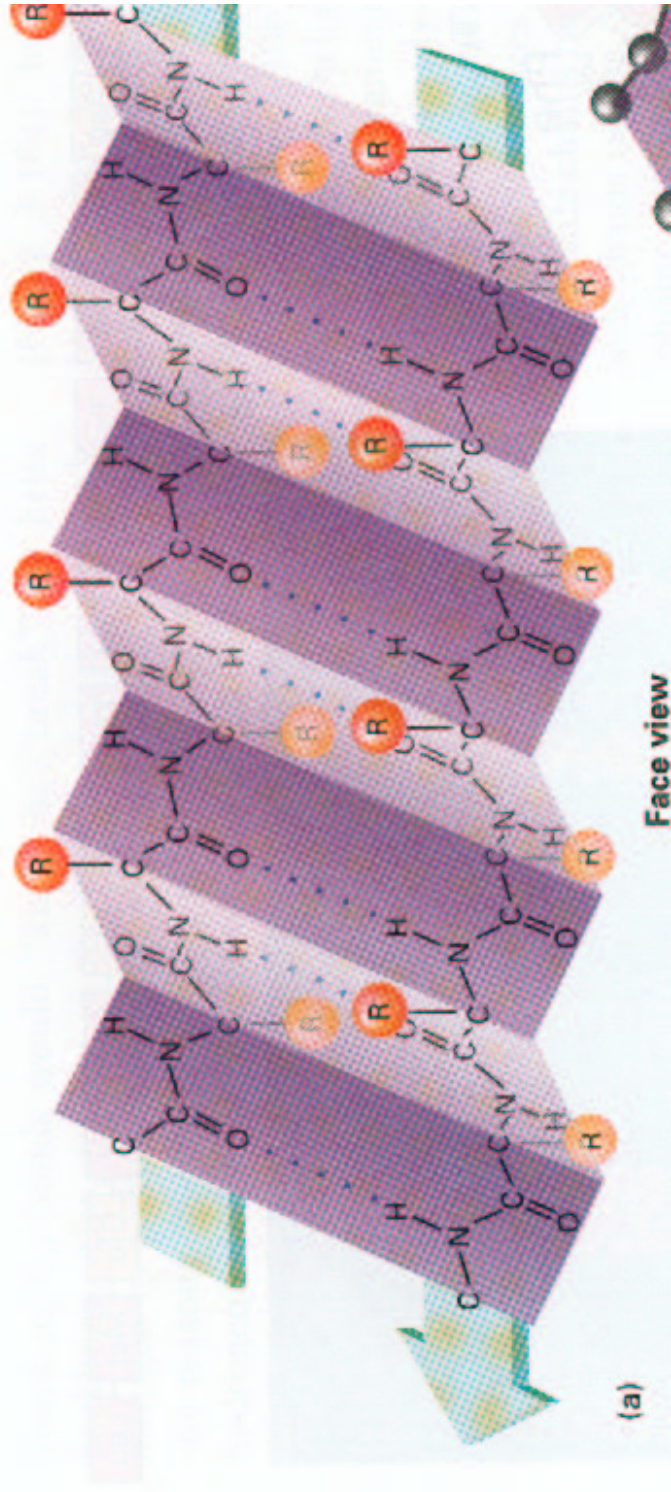
Transition hélice pelote

La charge dépend du pH : la réaction $\text{NH}_2 + \text{H}^+ \rightarrow \text{NH}_3^+$ confère une charge positive à bas pH, tandis que le groupe NH_2 est neutre à pH basique. Pour le groupe COOH c'est l'inverse.



Feuillet β

Chaîne presque étirée, distance axiale est de 3,5 Angstroms. Ils sont stabilisé par des liaisons hydrogènes CO – NH de résidus très distants. Les brins peuvent être parallèles ou anti-parallèles.



Modèle de protéine sur un réseau cubique

○ Seulement des liaisons hydrophobes et hydrophiles, polymère sur un réseau cubique.

Quelques % des séquences forment un globule.

