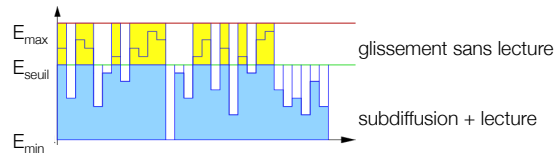


paradoxe mobilité - spécificité

question : la « rugosité » du potentiel semble trop importante : elle freine voire empêche le « sliding » !

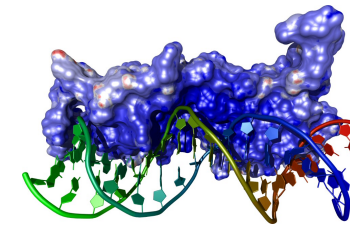
suggestion : et si le « sliding » était composé d'un mode « lecture » et d'un mode « diffusion libre » ? (von Hippel 1996)



et alors ?

1

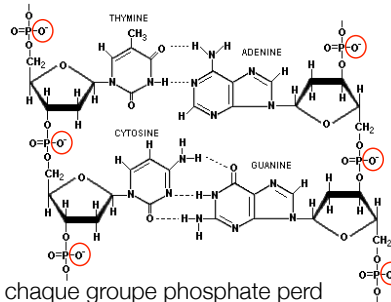
I - électrostatique ADN-protéine



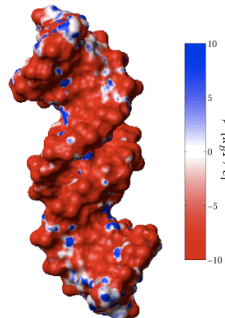
2

l'ADN est un polyélectrolyte

l'ADN = acide désoxyribonucléique est un acide fort :



potentiel électrostatique à la surface de l'ADN



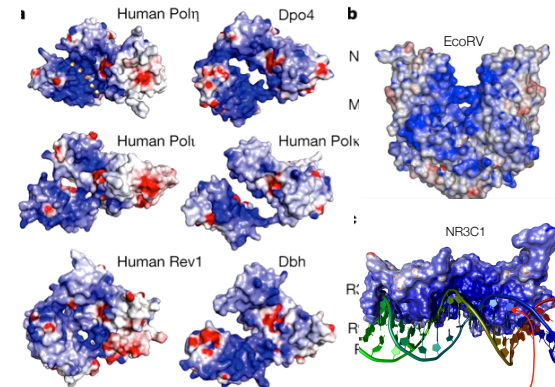
chaque groupe phosphate perd un proton en solution aqueuse (pratiquement à tout pH)

charge $-2e / pb$

3

électrostatique ADN-protéine

les protéines qui se lient à l'ADN sont chargées positivement



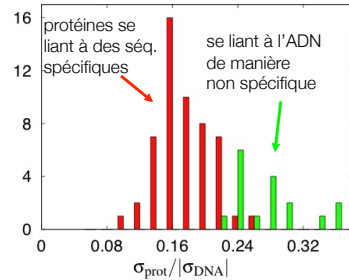
et particulièrement sur le côté qui fait face à l'ADN

4

électrostatique ADN-protéine

les protéines qui se lient à l'ADN sont chargées **positivement**

analyse sur 77 protéines
densité surfacique de charge à
l'interface ADN-protéine

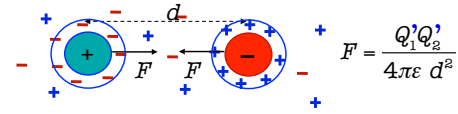


Dahirel et al PRL 2009 à partir des données de Jones et al J Mol Biol 1999

5

charges opposées en solutions

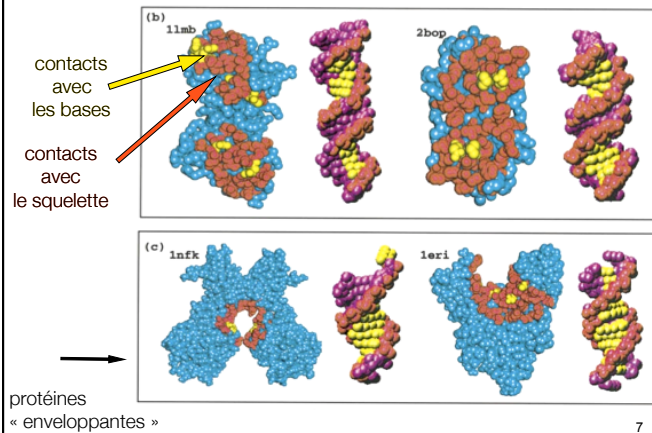
2 charges opposées : attraction



mais peut-on assimiler ADN et protéines à deux sphères ?

6

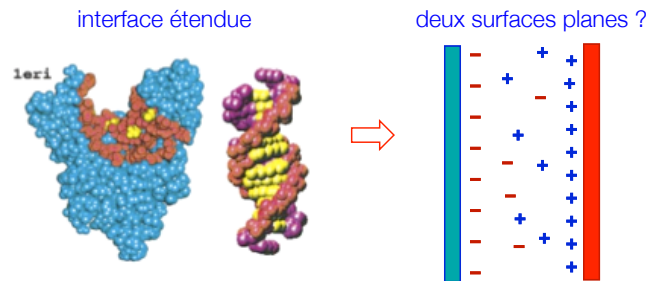
la forme des protéines



Jones et al J Mol Biol 1999

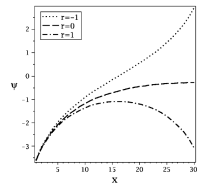
7

la forme des protéines



8

II - électrostatique en solution



potentiel électrostatique entre deux plaques chargées

9

équation de Poisson-Boltzmann (1D)

surfaces opposées en solutions

projex

potentiel el. V : 1. équation de Poisson :
(ρ = densité de charge)

$$\Delta V(x) = \frac{d^2 V(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon}$$

conditions au bords : (σ = densité surfacique)

$$\frac{dV}{dx}(0) = -\frac{\sigma(0)}{\epsilon}$$

$$\frac{dV}{dx}(L) = +\frac{\sigma(L)}{\epsilon}$$

ions : 2. statistique de Boltzmann : $\rho(x) = \sum c_i^0 \exp(-\beta q_i V(x))$

10

équation de Poisson-Boltzmann (1D)

surfaces opposées en solutions

projex

→ équation de Poisson-Boltzmann (1D) :

pour un sel monovalent (+1/-1) :

$$\frac{d^2 V(x)}{dx^2} = \frac{c^0}{\epsilon} \frac{1}{2} \left(e^{\beta V(x)} - e^{-\beta V(x)} \right) = \frac{c^0}{\epsilon} \sinh(\beta q_1 V(x))$$

équation différentielle non linéaire
avec conditions aux bords :

$$\frac{dV}{dx}(0) = -\frac{\sigma(0)}{\epsilon}$$

$$\frac{dV}{dx}(L) = +\frac{\sigma(L)}{\epsilon}$$

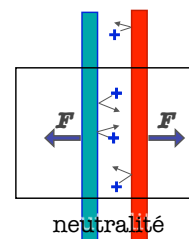
→ intégration numérique

11

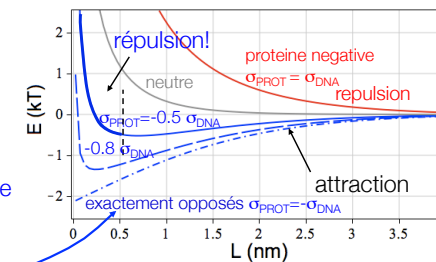
équation de Poisson-Boltzmann (1D)

équation de Poisson-Boltzmann (1D) :

sel monovalent (+1/-1), intégration numérique



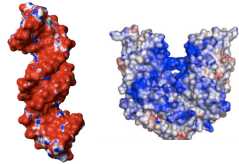
pression osmotique
= chocs des ions



REM : force = -dE/dL

12

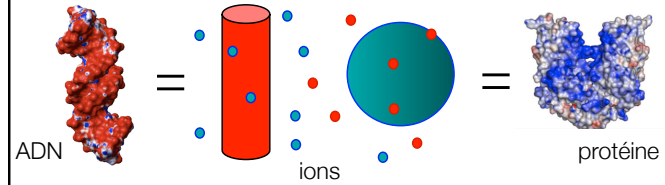
III – application au cas ADN-protéine



13

et pour le système ADN-protéine ?

→ simulations Monte Carlo + Résolution PB



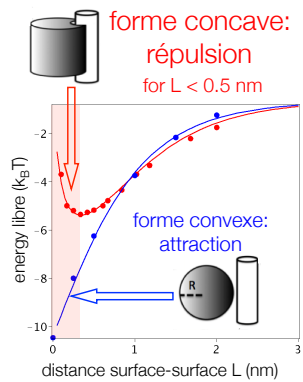
Monte Carlo :

- on fixe la position du cylindre et de la sphère et leur distance L
- on échantillonne les configurations des ions avec MC
- on en déduit l'énergie libre moyenne (...)
- la variation de cette énergie avec L donne la force

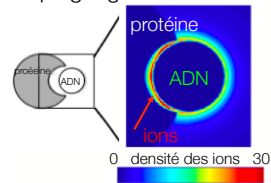
14

Monte Carlo 2

(pour surfaces courbes : approximation de Derjaguin)



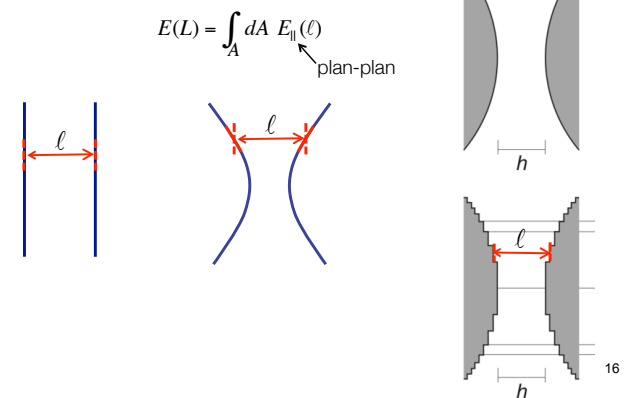
- origine osmotique : piégeage des ions



15

(approximation de Derjaguin)

pour prendre en compte les effets de la courbure des surfaces :



16

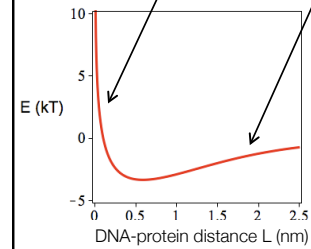
IV – conséquences sur la diffusion



17

conséquences sur la diffusion 1D

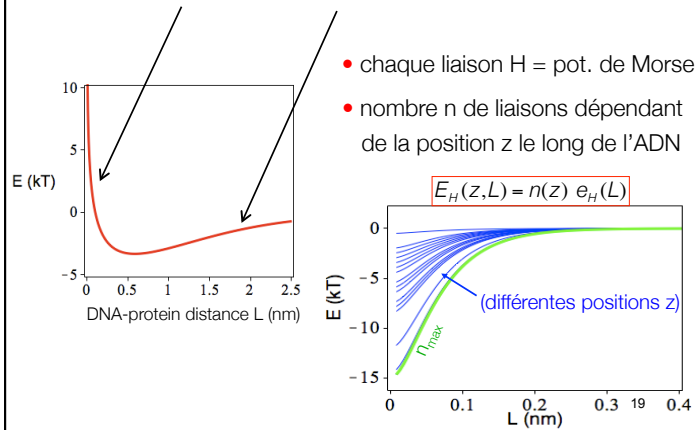
répulsion osmotique + électrostatique + liaisons hydrogène



18

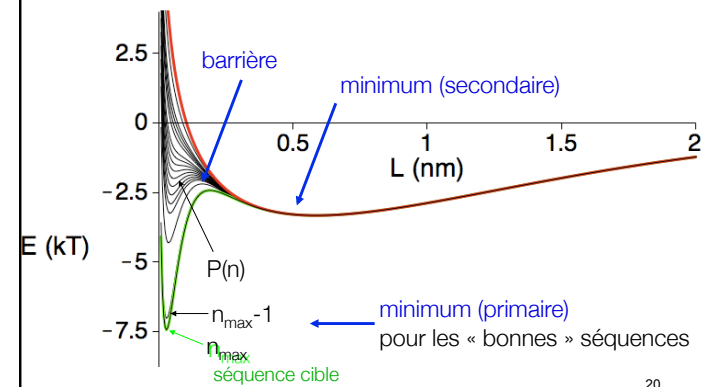
conséquences sur la diffusion 1D

répulsion osmotique + électrostatique + liaisons hydrogène

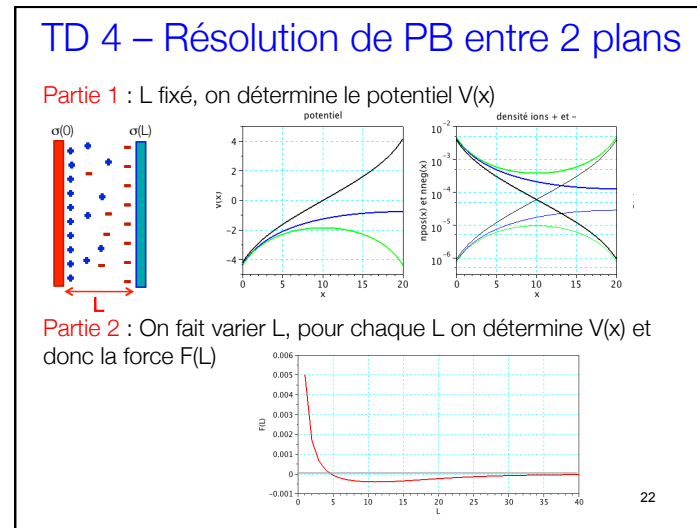
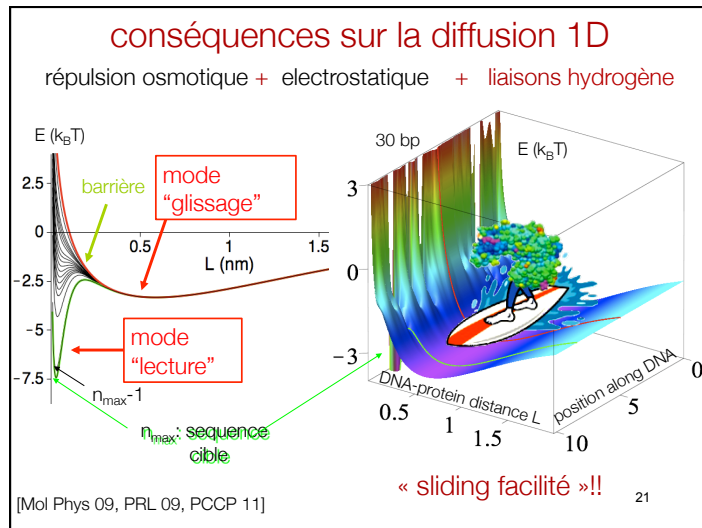


vers un modèle plus complet

répulsion osmotique + électrostatique + liaisons H



20



TD 4 – Résolution de PB entre 2 plans

Méthode : fonction `bvodeS`

- D'abord un exemple : fichier **exemple-bvodeS.sce** sur page web

équation différentielle : $y''(x) = -w^2 y(x) - k y'(x)$

$V = [y(x) \quad y'(x)]$ ← la fonction et sa dérivée

déterminé par $V = \text{bvodeS}(x, m, n, a, b, f_{\text{sub}}, g_{\text{sub}}, zeta);$

où

$zeta = [a \quad b]$ (positions des CB) $x = \text{linspace}(a, b, N);$ intervalle	fonction $\text{rhs} = f_{\text{sub}}(x, V, w)$ $\text{rhs} = -w * w * V(1) - k * V(2);$ endfunction membre de droite de l'ED	fonction $g = g_{\text{sub}}(i, V)$ $g = [V(1) - 1 \quad V(2) - 2]$ $g = g(i)$ endfunction conditions au bord $f(y, y', a) = 0 \quad f(y, y', b) = 0$
---	--	--

23