

Réponse force-extension des chaînes macromoléculaires à unités bistables

Manon Benedito¹, Stefano Giordano¹

¹ Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, ISEN, Univ. Valenciennes, UMR 8520 - IEMN, LIA LICs, F-59000 Lille, France

Nous nous intéressons ici à la modélisation de la traction des polymères et à leur réponse force-extension. Les polymères sont représentés par des chaînes macromoléculaires, composées d'unités bistables (potentiellement pluristables) et donc capables d'adopter deux (ou plusieurs) conformations. Le premier état correspond à la conformation « native » de l'unité. L'unité est dite « pliée ». A cet état sont associées différentes variables telles que la longueur, la raideur, l'énergie mais aussi le spin, variable discrète statistique qui permet de savoir dans quel état se trouve l'unité. Le second état correspond à une conformation métastable et est aussi associé à une longueur (supérieure), une raideur, une énergie (supérieure) et une valeur du spin. L'unité est dite « dépliée ». Nous utilisons cette variable de spin afin d'approximer l'énergie potentielle bistable par deux courbes quadratiques, le spin permettant de savoir dans quel puits de potentiel se trouve l'unité.

Afin de rendre le modèle le plus proche de la réalité possible, les caractéristiques associées aux unités peuvent être améliorées. En effet, dans un premier temps, en donnant un caractère élastique à l'unité, nous avons considéré l'effet de l'extensibilité sur la réponse force-extension. Nous avons pu notamment observer la modification des pics de force due à l'élasticité des unités [1].

Dans un second temps, nous nous sommes intéressés aux interactions entre les unités, grâce au modèle d'Ising. Des comportements complexes ont pu être observés en raison de ces interactions, comme c'est le cas pour la contraction des muscles [2]. Le paramètre λ d'Ising qualifie l'interaction en fonction de son effet sur les unités voisines. En effet, si λ est positif, nous considérons que l'état d'une unité donnée (plié ou déplié) entraîne le même comportement chez les unités voisines. En revanche, si λ est négatif, l'état d'une unité donnée entraîne la transition contraire chez les unités voisines [3].

Puis, nous avons porté intérêt à l'aspect hétérogène des unités. En effet, lors des simulations de traction des macromolécules, il n'est pas possible d'obtenir de séquence de dépliage des unités homogènes, qui ont des probabilités égales de se déplier. En revanche, si l'on considère un caractère hétérogène, alors nous pouvons savoir dans quel ordre les unités se déplient et quelle influence peut par exemple avoir l'hétérogénéité énergétique.

Références

- [1] “Thermodynamics of small systems with conformational transitions: The case of two-state freely jointed chains with extensible units”, M. Benedito, S. Giordano, *J. Chem. Phys.* (2018), **149**, 054901
- [2] “Physics of muscle contraction”, M. Caruel, L. Truskinovsky, *Rep. Prog. Phys.* (2018), **81**, 036602
- [3] “Isotensional and isometric force-extension response of chains with bistable units and Ising interactions”, M. Benedito, S. Giordano, *Phys. Rev. E* (2018), **98**, 052146 (Editor's suggestion)

Mots-clés : polymères – mécanique statistique – milieux hétérogènes ou composites.