Reptation d'une chaîne hétérogène

P.-G. de Gennes

► To cite this version:

P.-G. de Gennes. Reptation d'une chaîne hétérogène. Journal de Physique Lettres, 1983, 44 (6), pp.225-227. 10.1051/jphyslet:01983004406022500 . jpa-00232184

HAL Id: jpa-00232184

<https://hal.science/jpa-00232184>

Submitted on 1 Jan 1983

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Classification
Physics Abstracts
61.40K

Reptation d'une chaîne hétérogène

P. G. de Gennes

Collège de France, 75231 Paris Cedex 05, France

(Reçu le 24 novembre 1982, accepté le 21 janvier 1983)

Résumé. — On discute les mouvements d'un copolymère statistique, en présence d'obstacles fixes, dans un milieu aléatoire : translation d'ensemble le long du tube ou propagation de défauts. Le temps de reptation trouvé croît exponentiellement avec la longueur de chaîne. Ces considérations seront peut-être utiles pour comprendre certaines réorganisations des protéines globulaires.

Abstract. — We analyse the reptative motions of a statistical copolymer inside a random medium : overall translations and motion of « kinks ». The resulting reptation time increases exponentially with chain length. This discussion may possibly be helpful to understand certain reorganizations inside globular proteins.

1. Choix d'un modèle. — Les mouvements d'un homopolymère linéaire flexible, enchevêtré avec des obstacles fixes, sont à peu près compris [1]. Le cas d'une chaîne hétérogène est beaucoup plus complexe : certaines parties de la chaîne peuvent être piégées dans le milieu ambiant (lui-même aléatoire) et se déplacer difficilement.

Nous étudions ici la situation la plus simple : une chaîne de N monomères (indiqués de $n = 1$ à $n = N$) confinée dans un « tube » étroit (diamètre comparable à la taille des monomères) à l'intérieur d'un gel [2]. A chaque monomère (n) est associé un indice p_n ($p_n = 0$ si le monomère est de type A et $p_n = 1$ s'il est de type B). La moyenne $\langle p_n \rangle = p$ définit la composition de la chaîne. Le potentiel vu par le n -ième monomère a la forme

$$U_n = W_0(i) + W_1(i) p_n. \quad (1)$$

L'indice (i) spécifie la région du gel qui est en contact avec le monomère n . Pour une chaîne confinée dans un tube, il sera commode de définir i par l'abscisse curviligne le long du tube. L'énergie totale de la chaîne sera alors

$$V = \sum_{n=1}^N [W_0(n) + W_1(n) p_n],$$

et si on déplace la chaîne de s monomères dans le tube, V devient

$$V(s) = \sum_n [W_0(n+s) + W_1(n+s) p_n].$$

Dans la suite, on retranchera de ces sommes la contribution moyenne $\langle W_0 \rangle + \langle W_1 \rangle p$ qui donne une énergie constante. On omettra aussi la contribution $(W_1 - \langle W_1 \rangle) p$ qui décrit

l'effet des fluctuations de potentiel sur une chaîne homogène : ces fluctuations peuvent être qualitativement importantes pour une chaîne rigide mais pas pour une chaîne flexible [3]. Finalement

$$V(s) \rightarrow \sum_n \delta W_1(n-s)(p_n - p), \quad (2)$$

avec $\delta W_1 \equiv W_1 - \langle W_1 \rangle$. Nous supposons le potentiel δW_1 localisé

$$\langle \delta W_1(i) \delta W_1(j) \rangle = \delta_{ij} \delta W^2, \quad (3)$$

et aucune corrélation entre δW et p_n . (Tous les effets de ségrégation spatiale dans le milieu sont négligés.)

2. Translations d'ensemble. — Si la chaîne se déplaçait en entier le long du tube, elle serait soumise au potentiel aléatoire $V(s)$:

$$\left. \begin{aligned} \langle V(s) \rangle &= 0 & \delta V^2 &= \langle V^2(s) \rangle = N \delta W^2 p(1-p) \\ \langle V(0) V(s) \rangle &= N \delta W^2 \langle \delta p_0 \delta p_s \rangle \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

où $\delta p_n = p_n - p$. Les fonctions de corrélation $\langle \delta p \delta p \rangle$ sont conditionnées par le mode de synthèse chimique, mais ont une portée assez courte (quelques monomères). D'après (4) on peut se représenter le potentiel $V(s)$ comme une succession de barrières, de hauteur $\delta V \sim N^{1/2}$ et d'espacement donné par la portée des corrélations $\langle \delta p \delta p \rangle$. Mais cette vision est un peu sommaire pour un mouvement à *une dimension* : quelques barrières très hautes contrôlent la migration de la chaîne. Une approximation un peu meilleure, décrite dans la référence [4], donne un temps de migration globale

$$T_1 \cong D^{-1} \int_0^N dn \int_0^n dm \langle \exp[V(n) - V(m)]/kT \rangle, \quad (5)$$

où $D (\sim N^{-1})$ est un coefficient de diffusion sans interactions. Le potentiel $V(n) - V(m)$ a une distribution gaussienne : en calculant alors la moyenne dans (5), on aboutit à une forme exponentielle $T_1 = T_0(N) e^{N\alpha}$

$$\alpha = N^{-1} (\delta V/kT)^2 = \left(\frac{\delta W}{kT} \right)^2 p(1-p). \quad (6)$$

Le préfacteur $T_0(N)$ est ici d'ordre $N^2 D^{-1} \sim N^3$ mais ces préfacteurs sont peu importants pour notre discussion.

3. Mouvement d'un défaut. — En réalité, la chaîne ne progresse pas dans le tube par translation d'ensemble, mais plutôt par déplacement de « défauts » localisés (« kinks ») [1]. Quand un tel défaut traverse un monomère donné sur la séquence chimique, il translate ce monomère le long du tube par une distance b égale à sa « longueur stockée ». Ici pour simplifier, nous prendrons $b = a$ (taille du monomère) : donc le passage de 1 défaut d'un bout à l'autre de la séquence chimique décale toute la chaîne de une unité. Si un tel défaut se déplace de n à $n+s$ sur la séquence chimique, il modifie l'énergie de la chaîne par la quantité

$$V_d(s) = \sum_{m=n}^{m=n+s} (\delta W_{m+1} - \delta W_m) (p_m - p). \quad (7)$$

Pour $s \gg 1$, le potentiel V_d est ici encore gaussien, de moyenne nulle, avec

$$\langle V_d^2(s) \rangle = 2 \delta W^2 s [p(1 - p) - \langle \delta p_0 \delta p_1 \rangle]. \quad (8)$$

En revenant à une formule de type (5) on trouve un temps de diffusion pour *un* défaut allant d'un bout à l'autre de la chaîne :

$$\begin{aligned} \tau_1 &= \tau \exp(N\alpha_D) \\ \alpha_D &= \left(\frac{\delta W}{kT} \right)^2 [p(1 - p) - \langle \delta p_0 \delta p_1 \rangle]. \end{aligned} \quad (9)$$

α_D est plus petit que α s'il existe des corrélations positives $\langle \delta p_0 \delta p_1 \rangle$. Le temps global de reptation τ_{rep} pour la chaîne est le temps requis pour faire passer N défauts d'un bout à l'autre. Il dépend de la concentration à l'équilibre des défauts ; mais ces considérations n'influent que sur le préfacteur

$$T_{\text{rep.}}(\delta W) = T_{\text{rep.}}(0) \exp(N\alpha_D). \quad (10)$$

4. Discussion. — Le cas du gel très réticulé, à tube étroit, que nous avons choisi, se prête mal à l'expérimentation. Pour des gels plus lâches, gonflés par un solvant, il faudrait reprendre l'analyse : diviser la chaîne en sous-unités de longueur comparable à celle (N_e) des maillons du gel. Les fluctuations à l'échelle N_e sont très réduites, et les effets décrits plus haut doivent disparaître dès que $N_e \gg 1$. Ceci est probablement le cas pour les copolymères statistiques fondus. Ici chaque chaîne est enfermée dans un « pseudogel » et N_e (distance entre enchevêtrements) est grand (~ 300). Un cas intéressant mais plus complexe serait celui des *réorganisations d'une protéine globulaire* (début de dénaturation, transformations allostériques, ...). Ici, on peut peut-être penser en termes de reptation par « kinks », même si la structure est localement rigide. Le milieu ambiant est en fait la même chaîne polypeptidique, et n'est donc pas totalement fixe. Il y a souvent une certaine ségrégation spatiale entre régions hydrophiles et hydrophobes, qui donnerait des corrélations entre δW et δp . Mais, si on néglige ces complications, on est conduit à une observation intéressante. Supposons que la chaîne soit aspirée à un bout par une *force de succion* constante ϕ . Alors, l'analyse de la référence [4] nous suggère qu'il y a deux régimes : *a*) pour ϕ faible, une sorte de fluage logarithmique (lié au temps exponentiel de l'Eq. (10)); *b*) pour ϕ fort, un glissement rapide. Ces considérations seront peut-être utiles un jour pour comprendre certaines étapes de construction sur un ribosome.

Bibliographie

- [1] DE GENNES, P. G., *J. Chem. Phys.* **55** (1971) 572.
- DE GENNES, P. G. et LÉGER, L., *Ann. Rev. Phys. Chem.* **33** (1982) 49.
- [2] Le cas d'une chaîne homogène, non confinée dans un tube, et soumise à des potentiels aléatoires, a été discuté récemment par G. C. Martinez-Mekler et M. A. Moore, *J. Physique Lett.* **42** (1981) L-413. Ce cas est compliqué, car le potentiel doit avoir deux fonctions distinctes : engendrer un « tube » et moduler le mouvement dans le tube. (Il n'est pas sûr que le tube décrit dans cette référence ait un diamètre indépendant du temps.)
- [3] DE GENNES, P. G., *C.R. Heb. Séan. Acad. Sci* **294B** (1982) 827.
- [4] DE GENNES, P. G., *J. Stat. Phys.* **12** (1975) 463.