

CHAPITRE 7. Protéines

Exercices

1. Interactions entre protéines
2. **DVLO Model** En utilisant la relation entre champ et densité pour un gaz parfait et l'équation de Poisson, dérivez le champ électrostatique de hors une protéine avec surface charge σ dans une solution des espèces ayant densité n_j et charge z_j , $j = 1, \dots, N$. Vous devez linéariser l'équation de Poisson.
3. **van der Waals force** Supposez qu'une protéine est modélisée comme une sphère de rayon R composée de N petites particules (e.g. des atomes) distribuées uniformément dans le volume de la protéine. Si chaque paire de petites particules interagit avec la force vdW, $V(r_{12}) = -\epsilon(\frac{\sigma}{r_{12}})^6$:
 - (a) Quelle est la force totale sur une petite particule à une distance $r > R$ du centre d'une protéine?
 - (b) En utilisant ce résultat, quelle est la force vdW entre deux protéines?
4. **Depletion Force** Soit deux grandes particules, sphériques avec rayon R , dans un gaz de petites particules avec rayon a . Si la pression partielle des petites particules est P , calculez la force "depletion" quand les grandes particules sont séparées par une distance r . Supposez que les petites particules simplement exercent une pression uniforme sur chaque grande particule.

Pliage

5. L'action pour le modèle stochastique

$$\frac{d}{dt}x_i = b_i(x) + Q_{ij}^{-1}(x)\eta_j(t)$$

avec $\langle \eta_i(t)\eta_j(t') \rangle = \delta_{ij}\delta(t-t')$, dans l'approximation "weak noise" est simplement

$$S_{eff} = \frac{1}{2} \int_0^T \left(\frac{dx_i}{dt} - b_i \right) D_{ij} \left(\frac{dx_j}{dt} - b_j \right) dt$$

ou $D_{ij} \equiv Q_{il}Q_{jl}$. Prouvez le suivant: si la force déterministe a la forme conservatif (dans l'approximation "over-damped"), $b_i = L_{ij}(x)\frac{\partial V(x)}{\partial x_j}$, et s'il y a une relation *fluctuation-dissipation*, $L_{ij} = \epsilon D_{ij}^{-1}$, la "most likely path" est simplement la solution du

$$\frac{d}{dt}x_i = \pm L_{ij}(x)\frac{\partial V(x)}{\partial x_j}$$

Qu'est-ce qui détermine la signe?