

Master en Sciences Physiques  
Nanophysique PHYS-F-475

CHAPITRE 9. Protéines

Exercices

1. **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  $\sigma$  dans une solution des espèces ayant densité  $n_j$  et charge  $z_j$ ,  $j = 1, \dots, N$ . Vous devez linéariser l'équation de Poisson.
2. **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?
3. **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 exercent simplement une pression uniforme sur chaque grande particule. (Hint: Calculate the partition function and free energy.)
4. **MLP** 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 le signe?