

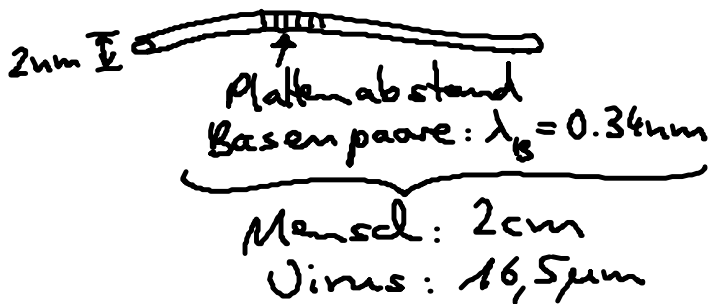
# 9. Polymerelastizität & Kooperative Übergänge in Makromolekülen

Spannungs-  
Dehnungs-Kurve  
von DNS

Kooperatives Verhalten von  
Untereinheiten  
→ scharfe Übergänge  
zw. Zuständen  
Bsp: allosterische Proteine

## 9.1 Polymerelastizität

· Ziel: Kontinuumsmechanische Beschreibung von DNS:



$\hat{=}$  länger, dünner elastischer  
Stab  
Länge:  $\lambda \gg \lambda_B$

### 9.1.1. Kontinuumsbeschreibung

"mikroskopische" Beschreibung

lokal wechselwirkende Bausteine  
(Atome, Moleküle)

$N \gg 1$ , Ausdehnung  $\lambda_B$

Kontinuums-  
beschreibung

$\lambda \gg \lambda_B \rightarrow$  wenige effektive  
Freiheitsgrade:

Feldvariable  
wenige phänomenolog.  
Parameter

Gültigkeit:  $\lambda \gg \lambda_B$

· Bsp: (i) Hydrodynamik: Navier-Stokes-Gl:

$\underline{v}(\underline{r}, t), \rho, \eta$

(ii) Elastizitätstheorie: Verschiebungsfeld  $u(\mathbf{r}, t)$ ,  $\rho$ ,  $\lambda, \mu$   
 ↳ Ingenieure Scherung,  
Kompression

(iii) Membrane:  $\frac{1}{R}$ ,  $3\kappa$

(iv) ideales Gas-Modell für Universum: Teilchen = Galaxien-Cluster

↔ Natur: Hierarchie von Längenskala:  
 ... Quarks, ..., Galaxien

• Vorsicht: (i) nicht-identische Bauteile:

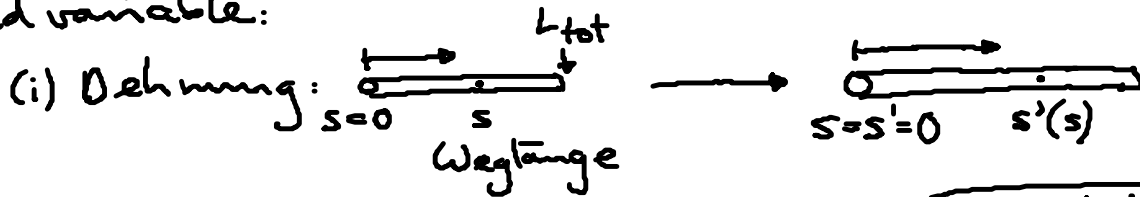
Bsp: Protein, verschiedene AS → Proteinfaltung

(ii) nicht-lokale Ww: Bsp: elektrostatisch

### 3.1.2. Langer, dünner elastischer Stab

• DNS, Gartenschlauch

• Feldvariable:

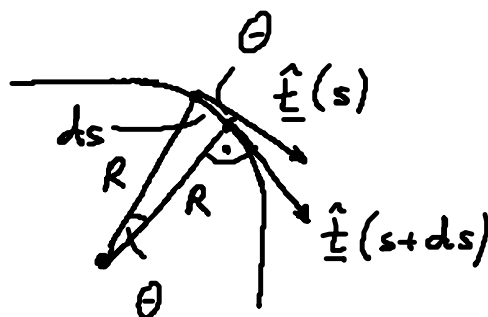


Verschiebung:  $\Delta = s' - s \implies \boxed{u = \frac{d\Delta}{ds}} \quad (9.1)$

... Dehnungsvariable  
Skalar

Konturlänge:  $\int_0^{L_{tot}} ds (1 + u(s))$

(ii) Biegung:



$\theta = |d\hat{t}| = \frac{ds}{R}$   
 $\underline{r}(s), \hat{t} = \frac{d\underline{r}}{ds}$   
 $\hat{t}(s+ds) \cdot \hat{t}(s) = \cos \theta$

Biegevariable:  
(Vektor)

$$\beta(s) = \frac{d\hat{t}}{ds} \quad (9.2)$$

(1)  $\beta \perp \hat{t}$ , da  $|\hat{t}| = 1$

(2)  $|\beta| = \frac{1}{R}$

(iii) Verdrehung:



Verdrehungsdichte:

$$\omega(s) = \frac{d\phi}{ds} \quad (9.3)$$

Pseudoskalar!

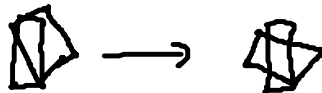
( $\omega \rightarrow -\omega$ , bei Inversion,  
Spiegelung)

• Bedeutung in DNS:

(i) ... Abstand Basenpaare  $> 0.34 \text{ nm}$

(ii)  Basenpaar

(iii) Ganghöhe:  $10,5 \text{ Basenpaare} \times 0.34 \text{ nm}$  (???)



• elastische Energie (Skalar!).  $E = \int ds e(\beta, u, \omega)$

$$e = \frac{1}{2} k_B T [A \beta^2 + B u^2 + C \omega^2 + 2D u \omega] \quad (9.4)$$

(i) quadratisch in  $|\beta|, u, \omega \ll 1$ , Hook'sches Gesetz!

(ii)  $A k_B T$  ... Biegesteifigkeit,  $A$  ... Biege-Persistenz-Länge

$C k_B T$  ... Verdrehungsteifigkeit,  $C$  ... Verdrehungs- "

$B k_B T$  ... Dehnungsteifigkeit

$D k_B T$  ... Verdrehungs-Dehnungs-Kopplung

(iii)  $e \dots$  Skalar  $\rightarrow \cancel{\beta u}, \cancel{\beta \omega}$

(iv)  $e \dots$  invariant unter Symmetrioperationen von Stab

(1) unchiraler Stab:  $D=0$ , da  $u\omega \xrightarrow{\text{Inversion}} -u\omega$

(2) DNS: chiral,  $D \neq 0$ , beobachtet!

(v) Terme höherer Ordnung: (1) viel kleiner:  $\lambda \gg \lambda_B$   
(z.B.  $u^3, \frac{du}{ds}$ ) (2)  $= 0$ , wegen Symmetrie  $\propto |\beta|^2$

(vi) (9.4) nicht anwendbar auf Einstrang-DNS:  $A \approx 0.34 \mu\text{m}$

(v)  $\lambda \gg$  Ganghöhe (ansonsten anisotrope Biegung)

(vi) DNS geladen! Gültigkeit:  $\lambda \gg \lambda_D^{-1}$ , Renormierung  
von  $A k_B T$   
Debye-Länge

• Polymer mit freidrehbare Monomere:  $C = D = 0$

DNS: falls Verdrehung frei  $\rightarrow \omega = 0$

$\beta k_B T \gg$  Biegekraft

$$\Rightarrow \boxed{E = \frac{1}{2} k_B T \int_0^{L_{\text{tot}}} ds A \beta^2} \quad (9.5)$$

... einfaches elastisches Stab Modell

(Kratky-Porod-Modell  
wurmartiges Ketten- " )

engl. wormlike chain model