

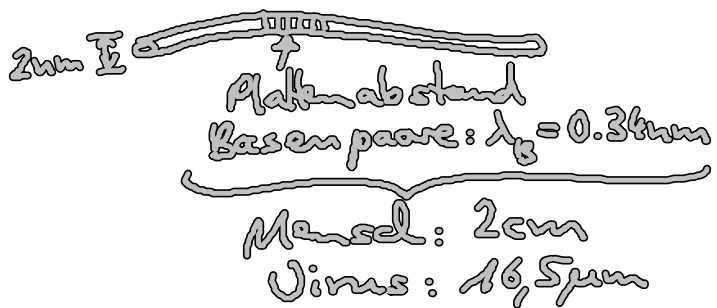
9. Polymerelastizität & Kooperative Übergänge in Makromolekülen

Spannungs-
Dehnungs-Kurve
von DWS

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

9.1 Polymerelastizität

• Ziel: Kontinuumsmechanische Beschreibung von DWS:



≙ langer, dünner elastischer
Stab
Länge: $\lambda \gg \lambda_B$

9.1.1. Kontinuumsbeschreibung

"mikroskopische" Beschreibung

lokal wechselwirkende Bausteine
(Atome, Moleküle)

$N \gg 1$, Ausdehnung λ_B

Kontinuums-
beschreibung

$\lambda \gg \lambda_B$ → 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) Elektrizitätslehre: Verschiebungsfeld $\underline{u}(\underline{r}, t)$, ϵ , λ , μ
 ↳ Ingenieure Scherung
Kompression

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

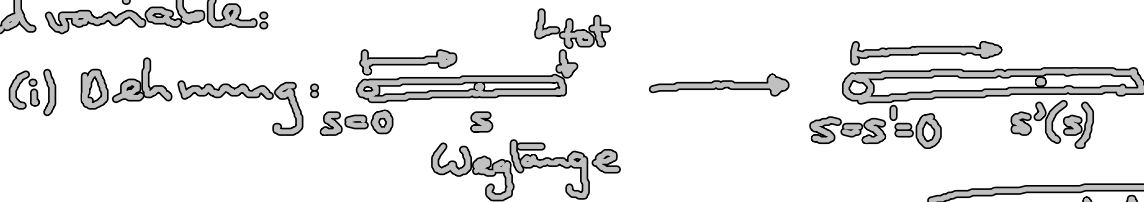
(iv) ideales Gas-Modell für Universum: Teilchen = Galaxien-Cluster

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

- Unzielt: (i) nicht-ideale Bauteile:
 Bsp: Protein, verschiedene AS → Proteinfaltung
- (ii) nicht-lokale Ww: Bsp: elektrostatisch

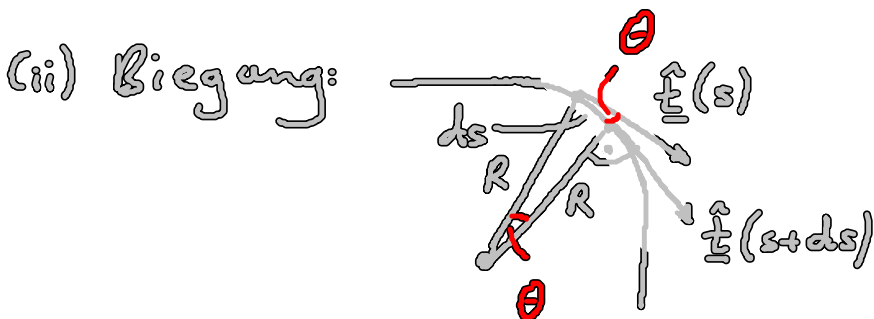
3.1.2. Langer, dünner elastischer Stab

- DNS, Gartenschlauch
- Feldvariable:



Verschiebung: $\Delta = s' - s \Rightarrow \boxed{u = \frac{d\Delta}{ds}} \quad (3.1)$

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



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

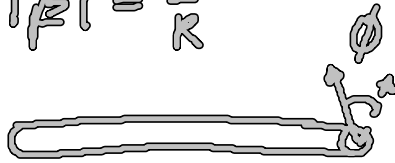
Biegevariable:
(Vektor)

$$\beta(s) = \frac{d\hat{t}}{ds} \quad (3.2)$$

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

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

(iii) Verdrehung:



Verdrehungsdichte:

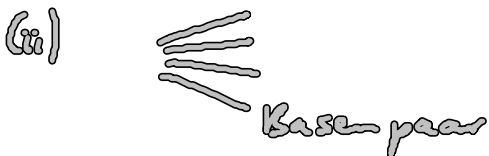
$$\omega(s) = \frac{d\phi}{ds} \quad (3.3)$$

Pseudoskalar!

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

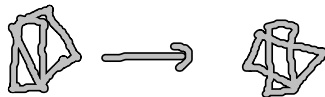
• Bedeutung in DNA:

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



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

(???)



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

$$e = \frac{1}{2} k_B T [A \beta^2 + B u^2 + C \omega^2 + 2D u \omega] \quad (3.4)$$

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

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

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

$B k_B T$.. Dehnungsteifigkeit

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

(iii) e... Skalar $\rightarrow \beta^2, \beta^2$

(iv) e... 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 $\beta |\beta|^2$

(vi) (3.4) nicht anwendbar auf Einstang-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 frei drehbare Monomere: $C=0=0$

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

$k_B T \gg$ Biegekräft

$$\Rightarrow E = \frac{1}{2} k_B T \int_0^{L_{tot}} ds A \beta^2 \quad (3.5)$$

... einfaches elastisches Stab Modell
(Kratky-Porod-Modell
wurmartiges Ketten-
engl. wormlike chain model)