

Chapitre 2

De la double chaîne à la notion de vrille

LORSQUE l'on manipule l'extrémité d'une molécule d'ADN, celle-ci se déforme en fonction des mouvements qu'on lui impose. Elle est également soumise à l'action de la température, et les fluctuations de sa géométrie, que l'on ne contrôle pas directement, sont de nature thermique. Montrons alors comment étudier ces fluctuations : sur la figure 2.1 on a dessiné un objet de section carrée jouant le rôle de molécule allongée. En haut de l'objet de gauche, la face colorée est exposée vers la droite, alors qu'en bas elle est exposée face à nous. Elle tourne d'un quart de tour. Or il n'y a pas de torsion et la rotation n'est due qu'à la géométrie tridimensionnelle de l'objet. Si on tire sur chacune des deux extrémités, la face colorée tourne d'un quart de tour entre le haut et le bas, mais parce que l'objet a une torsion. La géométrie spatiale de l'objet est devenue rectiligne et n'est plus la cause de la rotation de la face colorée. L'angle de rotation est devenu un angle de torsion. Ce phénomène de conversion est une illustration d'un théorème mathématique dû à Călugăreanu que nous redémontrons dans ce chapitre (section 2.3.b). Cet angle caractérise la géométrie d'une configuration, et ce sont ses fluctuations que nous étudions pour caractériser les fluctuations thermiques de la géométrie d'une molécule.

Dans les expériences de micromanipulation de l'ADN présentées au chapitre précédent ce mécanisme de conversion est aussi à l'œuvre mais on ne peut pas observer la forme de la molécule. Seules les mesures de la force, de l'extension et du nombre de

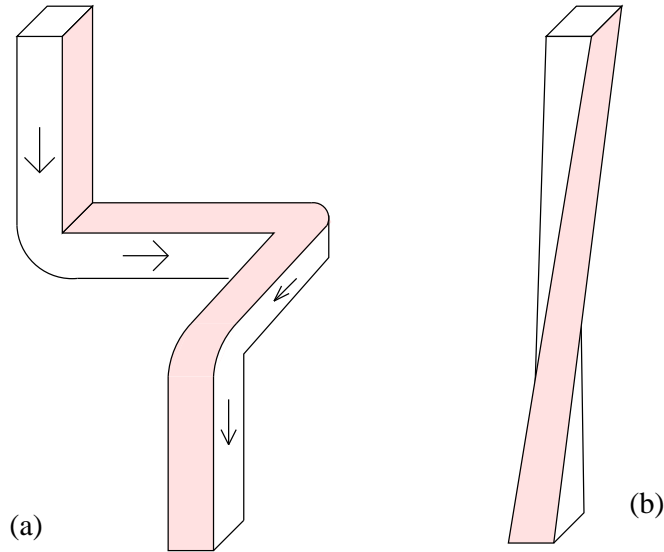


fig. 2.1: On a colorié une face de cet objet tridimensionnel. On constate que la forme induit une rotation de la face coloriée d'un quart de tour.

supertours sont possibles. Pour construire un modèle de l'ADN reliant ces quantités physiques nous décrivons les énergies de flexion et de torsion et les liens mathématiques qui existent entre elles.

Nous présentons les outils adaptés à une description de l'ADN compatible avec le théorème de Călugăreanu. On étudie tout d'abord les relations entre deux chaînes afin de traduire mathématiquement le fait que les deux brins d'ADN sont *enroulés* l'un autour de l'autre. Pour cela, nous devons introduire la notion de diagramme de lien (section 2.1) qui nous permet de mesurer l'*indice de liage* des deux brins. À partir des équations de Frénet–Serret nous abordons la notion de courbure (section 2.2.a) et celle de torsion (section 2.2.b). Alors que l'indice de liage décrit l'enroulement des deux brins à l'échelle globale, la torsion et la courbure décrivent l'échelle locale de la molécule. On montre que la torsion et l'indice de liage sont liés par le théorème de Călugăreanu (équation (I–2.17)) qui fait également intervenir une notion géométrique globale : la vrille, dont nous donnons différentes formulations, en particulier celle de Călugăreanu–White et celle de Fuller (section 2.3). Enfin on étend ces concepts, caractérisant initialement les doubles chaînes fermées, à des chaînes ouvertes dont les extrémités sont parallèles pour couvrir le cadre des expériences de micromanipulation.

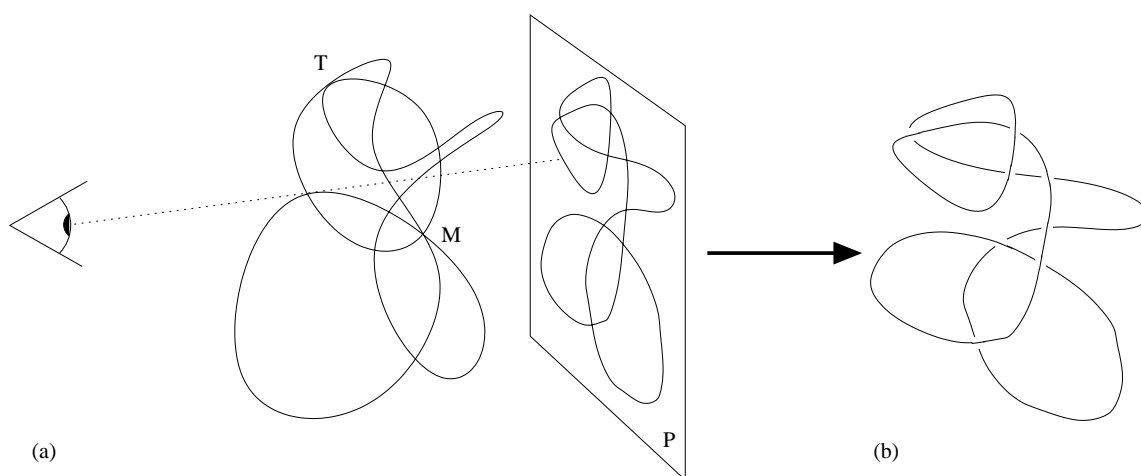


fig. 2.2: (a) *Projection d'une courbe tridimensionnelle sur le plan P. La courbe est également projetée dans le plan de la feuille F. Dans la projection sur F, on observe un point triple (M) et un point de tangence (T), alors que la projection sur P ne contient que des points multiples doubles et aucun point de tangence.* (b) *Résultat de la projection. On obtient un diagramme représentant la courbe. Les positions relatives des portions de courbe sont repérées grâce à la convention de la figure 2.3(a).*

2.1 Outils mathématiques

2.1.a Les diagrammes de lien

Projection plane d'un lien

Pour représenter les courbes de l'espace sur le plan de la feuille, la solution la plus simple consiste à projeter la courbe, selon une direction \hat{u} (voir figure 2.2(a)). On obtient alors comme image une courbe plane. Afin de conserver l'information tridimensionnelle on garde en mémoire les positions relatives des points doubles dans la direction d'observation. Deux difficultés peuvent se présenter : les points multiples, c'est-à-dire les points du plan par lesquels la projection de la courbe passe plusieurs fois ; et les points de tangence, qui sont les points où deux parties de la courbe projetée sont tangentes. Si la courbe est suffisamment régulière, sa projection dans une direction \hat{u} choisie au hasard n'aura que des points multiples *doubles* avec une probabilité de 1. Les points de tangence sont tout autant improbables. Et désormais nous considérerons que les projections n'ont ni point de tangence ni points multiples d'ordre supérieur à deux. Les courbes projetées permettent de construire les diagrammes de lien.

Les croisements

Pour ne perdre aucune information lors de l’opération de projection du lien, on garde en mémoire quel segment est le plus proche de l’observateur en « cachant » le segment le plus éloigné autour du croisement (figure 2.3(a)). On obtient ainsi une représentation imagée des courbes tridimensionnelles appelée **diagramme**, comme par exemple la figure 2.2(b). De même que le brin d’ADN est orienté, on aura parfois besoin d’orienter les différentes courbes. Les résultats resteront qualitativement inchangés si on change d’orientation, mais cela permet de définir l’**indice de croisement** (figure 2.3(b)). Cet indice ne dépend pas du côté de la courbe où l’on se situe pour une direction donnée.

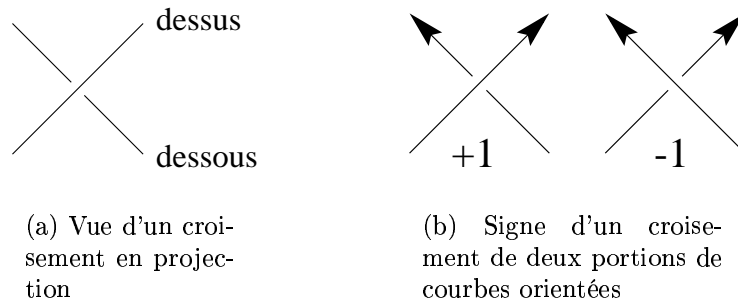


fig. 2.3: Représentation plane des croisements de courbes tridimensionnelles

Remarque Nous avons construit les diagrammes de lien à partir d’une direction de projection arbitraire. Or les résultats ne doivent pas dépendre de cette direction mais seulement de la géométrie des courbes elles-mêmes. Il existe deux façons d’obtenir un objet mathématique à partir des diagrammes :

- (i) faire la moyenne d’une quantité calculée pour chaque diagramme dans toutes les directions de projection ;
- (ii) ou bien trouver des relations entre tous les diagrammes d’un même lien et construire une quantité qui est la même pour chacun d’eux.

La méthode (i) est géométrique, elle sera utilisée pour définir la *vrille*. La seconde est topologique, elle est liée à la notion d’*isotopie* que nous définissons maintenant.

2.1.b L’homotopie et l’isotopie

Définitions

Les propriétés topologiques d’une courbe ne dépendent pas de la position de ses points. Par exemple, le plan du métro n’est pas une carte exacte du réseau

souterrain, seules sont importantes les connexions entre les différentes stations et les correspondances. Si le réseau de tunnels est modifié sans que ni les stations des lignes ni les correspondances ne soient modifiées, le plan est inchangé. On dit que les deux réseaux sont **homotopes**. De même, les propriétés topologiques d'un polymère fermé sont conservées si on le déforme *sans le couper*, elles sont *invariantes* par homotopie dans l'espace.

On obtient deux diagrammes différents représentant un même lien si on déforme ce lien sans qu'à aucun moment deux portions de courbes ne passent par un même point. Cela correspond à l'idée de déformation d'un objet solide sans le casser. La géométrie de l'objet *change* au cours d'un tel processus et par conséquent le diagramme de projection aussi. Deux diagrammes obtenus à partir d'une même courbe avant et après déformation sont dits **isotopes**. L'isotopie est une *relation d'équivalence*.

Si on change la direction de projection cela revient à déformer le lien sans le couper. Deux diagrammes obtenus par la projection selon différentes directions d'un lien seront donc isotopes. Si deux diagrammes sont isotopes, cela signifie qu'ils ont été obtenus avec deux liens homotopes pas nécessairement projetés dans la même direction. Dans le paragraphe suivant nous traduisons concrètement la relation d'isotopie entre diagrammes

Les modifications de Reidemeister

Un diagramme reste dans la même classe d'homotopie si on le déforme sur une portion située entre deux croisements, aussi longtemps qu'on ne crée ni ne supprime aucun croisement. Lorsque de tels croisements interviennent, on quitte la classe d'homotopie. Quelles sont les relations entre classes d'homotopie (diagrammes) qui permettent de rester dans la même classe d'isotopie, c'est-à-dire qui décrivent un même objet? Reidemeister a montré que le nombre de façons de changer les croisements en restant dans la même classe d'isotopie est réduit à trois. Ces modifications sont présentées sur la figure 2.4. Toute déformation, tout changement de direction de projection se traduit par une succession de diagrammes reliés entre eux par des modifications de Reidemeister. Réciproquement deux diagrammes tels qu'il existe une succession de mouvements de Reidemeister permettant de transformer l'un en l'autre sont isotopes.

2.1.c Indice de liage L_k entre deux courbes

L'enroulement des deux brins d'ADN l'un autour de l'autre leur interdit de se séparer sans se casser. Cet attachement est précisé par un nombre, qui sera par exemple intuitivement le nombre de tours que fait chaque brin autour de l'autre. Mais nous devons nous doter d'une mesure non ambiguë. Nous construisons à partir du *diagramme* des deux brins un *indice de liage*, invariant par isotopie. On verra

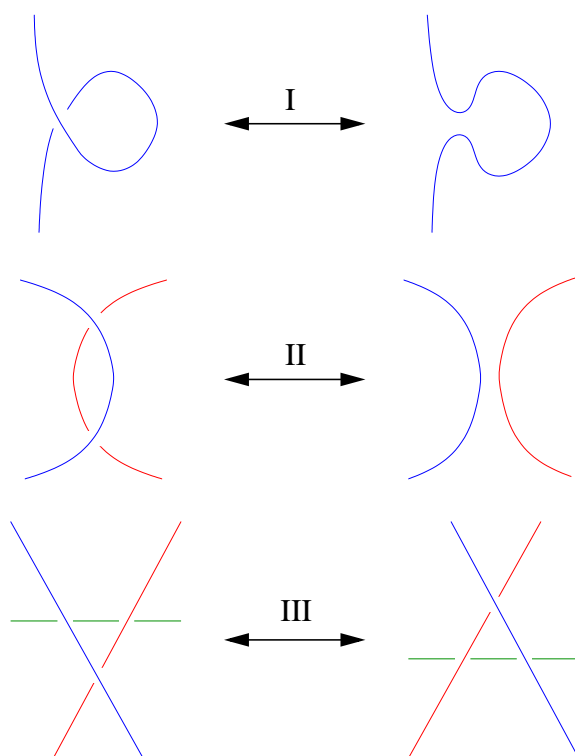


fig. 2.4: Les trois modifications de Reidemeister qui permettent de trouver tous les diagrammes isotopes à un diagramme donné. Les déformations d'un fil (sans le couper), et les changements de direction d'observation se traduisent tous par une succession de ces trois modifications.

ensuite comment cet indice se calcule à l'aide d'une formule analytique qui sera plus aisée à manipuler dans certains cas.

Définition

On définit l'**indice de liage** entre deux courbes comme étant la demi-somme des indices de croisement pour chaque croisement d'une courbe orientée avec l'autre, selon la règle décrite sur la figure 2.3(b). C'est un invariant d'isotopie, car il est inchangé par les modifications de Reidemeister de type II et III définies sur la figure 2.4 (les modifications de type I ne sont pas concernées ici puisqu'elles concernent uniquement un croisement d'une courbe avec elle-même). La figure 2.5(a) présente un exemple de deux courbes avec $Lk = 2$.

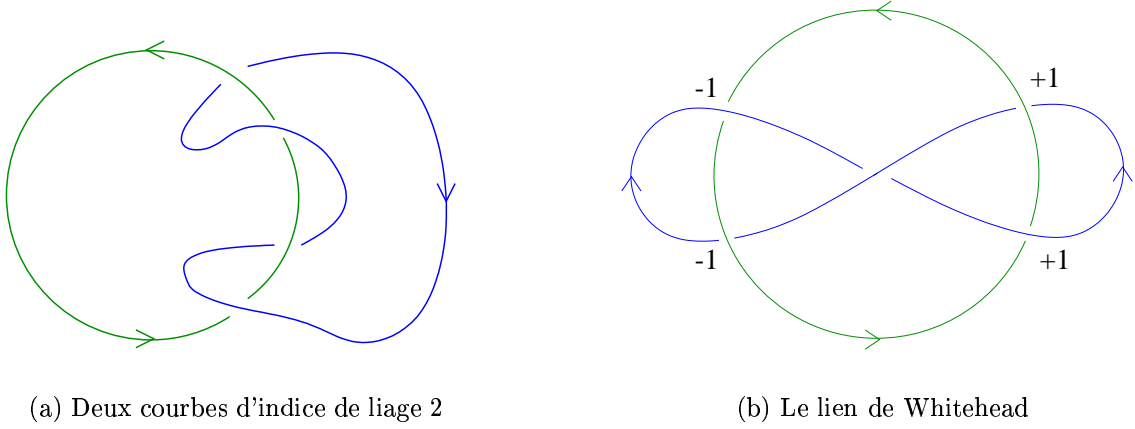


fig. 2.5: Deux exemples de courbes liées. (a) Les indices des quatre croisements sont les mêmes (+1 avec les orientations indiquées). C'est une preuve que les deux courbes ne peuvent pas être séparées si on les déforme sans les couper. (b) Le lien de Whitehead est un exemple de deux courbes liées dont l'indice de liage vaut 0. Pour démontrer que ces courbes ne peuvent pas être séparées, il faut utiliser un autre invariant de lien comme le polynôme de Conway ou de Jones.

Formulation analytique

Pour calculer l'indice de liage de deux courbes $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2$ à partir de leurs équations, Gauss a trouvé une formule intégrale* :

* Pour comprendre l'origine de son expression on considère une courbe comme un conducteur parcouru par un courant et on calcule l'intensité passant à travers une surface délimitée par l'autre courbe. Par exemple supposons que \mathcal{C}_1 soit parcourue par un courant $J \neq 0$, et appelons \mathbf{r}_i les coordonnées d'un point de \mathcal{C}_i ($i=1$ ou 2). Un segment infinitésimal $d\mathbf{r}_1$ de \mathcal{C}_1 a un vecteur densité de courant $J d\mathbf{r}_1$ d'après la loi de Biot et Savart, l'induction créée par ce segment au point \mathbf{r}_2 est

$$d\mathbf{B} = \frac{\mu_0 J}{4\pi} \frac{d\mathbf{r}_1 \times (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3}. \quad (\text{I-2.1})$$

L'intensité qui passe à travers une surface S_2 de bord \mathcal{C}_2 se déduit du théorème d'Ampère

$$I = \iint_{S_2} \mathbf{j} \cdot d^2\mathbf{s} = \frac{1}{\mu_0} \iint_{S_2} \mathbf{rot}_2(\mathbf{B}) \cdot d^2\mathbf{s} = \frac{1}{\mu_0} \oint_{\mathcal{C}_2} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{r}_2 = \frac{1}{\mu_0} \oint_{\mathcal{C}_2} d\mathbf{r}_2 \cdot \left(\int d\mathbf{B} \right) \quad (\text{I-2.2})$$

(l'indice 2 indique que l'on dérive par rapport à \mathbf{r}_2). On doit ensuite intégrer sur \mathbf{r}_1 et on obtient ainsi la formule donnant l'intensité $I(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$ qui traverse \mathcal{C}_2 si \mathcal{C}_1 est parcourue par un courant J :

$$I(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) = \frac{J}{4\pi} \oint_{\mathcal{C}_1} \oint_{\mathcal{C}_2} d\mathbf{r}_1 \times \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3} \cdot d\mathbf{r}_2. \quad (\text{I-2.3})$$

$$Lk(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) = \frac{1}{4\pi} \oint_{\mathcal{C}_1} d\mathbf{r}_1 \cdot \oint_{\mathcal{C}_2} d\mathbf{r}_2 \times \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3}. \quad (\text{I-2.4})$$

Ce nombre est entier. Pour s'en convaincre, on remarque que $d\mathbf{r}_1 \cdot \oint_{\mathcal{C}_2} d\mathbf{r}_2 \times \frac{\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1}{\|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|^3}$ est la variation de l'angle solide sous lequel est vue la courbe \mathcal{C}_2 entre les points \mathbf{r}_1 et $\mathbf{r}_1 + d\mathbf{r}_1$ de la courbe \mathcal{C}_1 . Lorsque l'on parcourt \mathcal{C}_1 , la variation totale est nécessairement un multiple de 4π . On voit de plus grâce à cette interprétation, que la formule (I-2.4) est le nombre de tours que fait \mathcal{C}_2 autour de \mathcal{C}_1 .

Exemple Appliquons cette formule au cas d'une droite $\{(a, 0, z) | z \in \mathbf{R}\}$ orientée dans le sens des z croissants et du cercle $\{R \cos \theta, R \sin \theta, 0 | \theta \in [0, 2\pi]\}$ orienté dans le sens usuel. L'intégrale se calcule en posant $z = \sqrt{R^2 - 2aR \cos \theta + a^2} \operatorname{sh} t$

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{aR \cos \theta - R^2}{(R^2 - 2aR \cos \theta + a^2 + z^2)^{3/2}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{a \cos \theta - R}{R^2 - 2aR \cos \theta + a^2} R d\theta$$

Cette dernière intégrale s'écrit sous une forme complexe $\frac{1}{2\pi} \operatorname{Im} \oint \frac{d(Re^{i\theta})}{Re^{i\theta} - a}$. En vertu du théorème de Cauchy, la valeur de la formule de Gauss est donc 1 si $a < R$ et 0 sinon.

Propriétés

Les propriétés de Lk se déduisent de sa définition et de l'équation (I-2.4).

- (i) $Lk(\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_1) = Lk(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$;
- (ii) $Lk(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$ est inchangé si les deux courbes sont transformées par la même transformation directe : translation, rotation et dilatation de rapport positif. Il est plus généralement invariant par les transformations conformes ;
- (iii) $Lk(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$ est changé en son opposé par les transformations indirectes : réflexions et inversion* ;
- (iv) l'indice de liage de deux courbes non liées est 0, mais deux courbes d'indice de liage nul ne sont pas nécessairement déliées comme le montre la figure 2.5(b).

* On trouve souvent dans la littérature une autre définition de l'indice de liage qui est la valeur absolue de celle que nous avons adoptée. Le but de cette définition est d'avoir un nombre positif et invariant par les transformations indirectes. Dans ce travail l'indice de liage est algébrique dans le but de montrer le théorème de Călugăreanu.

2.2 Le trièdre de Frénet

Les deux brins de l'ADN sont proches l'un de l'autre, si bien qu'à grande distance, on ne voit effectivement qu'une courbe. Ce sont les liaisons hydrogène entre bases qui assurent la cohésion de la molécule (voir chapitre 1). L'énergie de cette liaison se traduit localement par des forces s'opposant à la flexion et à la torsion. Ces deux notions sont exprimées par les équations de Frénet–Serret que l'on rappelle brièvement.

La description de la molécule en tant que courbe unique dans l'espace est paramétrée par son abscisse curviligne s

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &: [0, L] \longrightarrow \mathbf{R}^3 \\ s &\longmapsto \mathbf{r}(s) \end{aligned} \quad \text{et on pose } \hat{\mathbf{t}}(s) \stackrel{\text{déf.}}{=} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial s}. \quad (\text{I-2.5})$$

Comme s désigne l'abscisse curviligne, le vecteur tangent $\hat{\mathbf{t}}(s)$ est toujours de norme unité. Les équations de Frénet–Serret construisent un trièdre direct à partir du vecteur $\hat{\mathbf{t}}$.

2.2.a La courbure

On définit le vecteur normal unitaire $\hat{\mathbf{n}}$ et la **courbure** κ par l'équation

$$\kappa \hat{\mathbf{n}} \stackrel{\text{déf.}}{=} \frac{\partial \hat{\mathbf{t}}}{\partial s} \quad (\text{I-2.6})$$

La force de résistance à la flexion de la molécule d'ADN vient d'une énergie dont l'expression générale est

$$E_{\text{flexion}} = \frac{A}{2} \int \kappa^2 = \frac{A}{2} \int_0^L \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{t}}}{\partial s} \right)^2 ds \quad (\text{I-2.7})$$

Nous avons supposé que le module de flexion A est constant le long de la molécule. Il dépend en réalité de la nature locale de la molécule et est susceptible d'être non uniforme (Nelson, 1998), ce qui se traduit par un module de flexion effectif (Bensimon et coll., 1998).

2.2.b La torsion

Le troisième vecteur du trièdre est la binormale $\hat{\mathbf{b}}$ définie par

$$\hat{\mathbf{b}} \stackrel{\text{déf.}}{=} \hat{\mathbf{t}} \times \hat{\mathbf{n}} \quad (\text{I-2.8})$$

de sorte que le trièdre $(\hat{\mathbf{t}}, \hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{b}})$ est orthonormal direct. De plus la dérivée du vecteur binormal définit la torsion de Frénet

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{b}}}{\partial s} \stackrel{\text{déf.}}{=} -\tau \hat{\mathbf{n}} \quad (\text{I-2.9})$$

En conséquence des équations (I-2.6) et (I-2.9) on a

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial s} = -\kappa \hat{\mathbf{t}} + \tau \hat{\mathbf{b}}. \quad (\text{I-2.10})$$

À petite échelle le comportement mécanique de la molécule soumise à une rotation est le même que celui d'une barre de module de torsion C (Bouchiat et Mézard, 2000) : pour une torsion d'angle θ le couple exercé à l'extrémité est

$$\Gamma = C\theta. \quad (\text{I-2.11})$$

On note $\omega(s)$, la **torsion interne**, c'est-à-dire l'angle de rotation par unité de longueur d'un brin de l'ADN autour de l'axe de la molécule. L'ADN possède une torsion interne spontanée notée ω_0 . Le nombre total de tour de rotation de la molécule en plus de cette rotation spontanée est appelé **torsade*** et on le note Tw . Pour un objet de longueur L

$$Tw \stackrel{\text{déf.}}{=} \frac{1}{2\pi} \int_0^L (\tau(s) + \omega(s) - \omega_0) ds. \quad (\text{I-2.12})$$

L'énergie de torsion est due à la différence locale entre torsion locale et torsion interne spontanée (Marko et Siggia, 1994; Bouchiat et Mézard, 2000)

$$E_{\text{torsion}} = \frac{C}{2} \int (\tau(s) + \omega(s) - \omega_0)^2 ds. \quad (\text{I-2.13})$$

Ici aussi on a supposé que le module de torsion C est constant le long de la molécule.

2.3 La vrille

L'indice de liage est défini globalement alors que la courbure et la torsion sont définies localement. On considère les deux brins comme tendant tous les deux vers une courbe limite, qui sera caractérisée par une nouvelle quantité, que nous nommons la **vrille**†. On en établit plusieurs expressions chacune étant utile à la compréhension d'un aspect de cette quantité qui peut paraître mystérieuse au premier abord.

* « twist » en anglais, on trouve parfois le terme « **indice de torsion** ».

† « writhe » en anglais. Le terme « entortillement » est parfois utilisé.

2.3.a L'indice de vrille d'un diagramme

Les deux brins, d'équations $\mathbf{r}_1(s)$ et $\mathbf{r}_2(s)$, n'ont pas de point d'intersection. On définit leur distance par

$$\delta \stackrel{\text{déf.}}{=} \sup_{s \in [0, L]} \|\mathbf{r}_2(s) - \mathbf{r}_1(s)\| \quad (\text{I-2.14})$$

de sorte que lorsque $\delta \rightarrow 0$ les deux courbes se rapprochent de la courbe limite. Seule la structure tertiaire de l'ADN restera définie, la structure secondaire, décrite par l'enroulement des deux brins, deviendra *sous-jacente*. L'indice de liage des deux brins défini dans la section 2.1.c reste inchangé pour toutes les valeurs de $\delta > 0$.

De la même façon que l'on avait défini l'indice de liage on définit l'**indice de vrille** $Vr(\hat{\mathbf{u}})$ d'une courbe unique comme l'indice de liage de la courbe *avec elle-même*. Il se calcule donc comme la demi-somme des indices de croisement définis par la figure 2.3(b). L'indice de vrille n'est pas invariant par isotopie, car il n'est pas invariant par les modifications de Reidemeister de type I (figure 2.4). Dans la suite, la notation $Vr(\hat{\mathbf{u}})$ désigne l'indice de vrille de la courbe limite vue dans la direction $\hat{\mathbf{u}}$ quand $\delta \rightarrow 0$.

Comme on l'a déjà observé (remarque page 16) pour obtenir un nombre qui ne dépend que de la forme d'un lien, il suffit de calculer un nombre dépendant *a priori* de la direction de projection et d'en faire la moyenne sur l'ensemble de ces directions. Il est ainsi défini sans ambiguïté. On notera $\langle f \rangle$ la moyenne de $f(\hat{\mathbf{u}})$ prise sur toutes les directions $\hat{\mathbf{u}}$ de l'espace

$$\langle f \rangle \stackrel{\text{déf.}}{=} \frac{1}{4\pi} \int_{S^2} f(\hat{\mathbf{u}}) d\hat{\mathbf{u}}. \quad (\text{I-2.15})$$

2.3.b Le théorème de Călugăreanu

Sur la figure 2.6 on a représenté les deux brins tendant vers une courbe unique. Étudions les différents types de croisement :

- P : les croisements d'une courbe avec l'autre qui se situent à des points d'abscisses proches sur les deux courbes. Le total de leur indices, $x_P(\hat{\mathbf{u}})$, est le double du nombre de fois qu'une courbe tourne autour de l'autre, et correspond au double de la torsade (I-2.12). Dans la limite $\delta \rightarrow 0$ il décrit la structure secondaire de la molécule. Ce nombre n'est pas invariant par isotopie.
- L : les croisements d'une courbe avec l'autre n'entrant pas dans la catégorie P . Ces croisements ne disparaissent pas dans le processus de prise de la limite $\delta \rightarrow 0$. On note $x_L(\hat{\mathbf{u}})$ le total des indices de croisements de type L . Ce nombre dépend de la direction de projection $\hat{\mathbf{u}}$.
- V : les croisements d'un courbe avec elle-même. Dans la limite $\delta \rightarrow 0$ ils disparaissent partout sauf aux points qui ont des croisements de type L . Dans cette limite, la demi-somme des indices des croisements de type L est $\frac{1}{2}x_L(\hat{\mathbf{u}}) = Vr(\hat{\mathbf{u}})$.

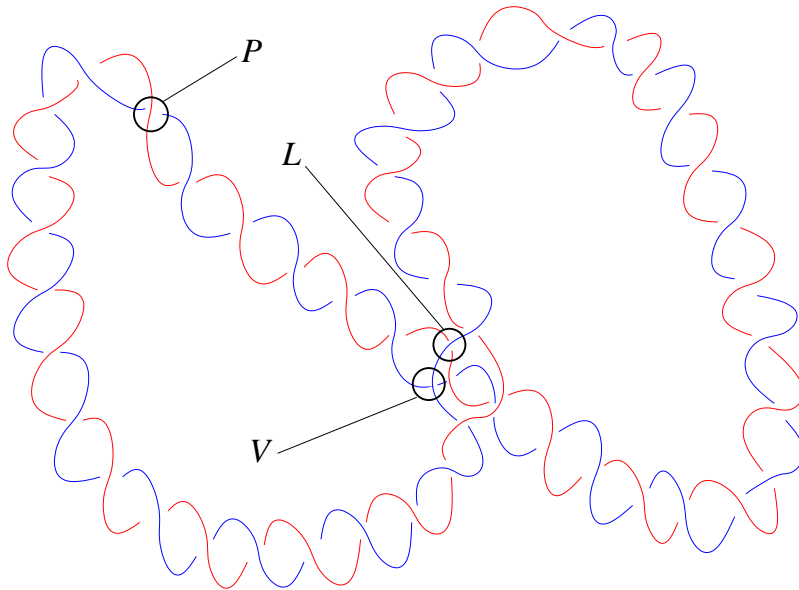


fig. 2.6: On a représenté ici deux courbes ayant des formes globales proches. Les croisements de ce diagramme peuvent se séparer en trois catégories: les croisements d'une courbe avec l'autre à des points d'abscisses proches (P), les croisements d'une courbe avec l'autre à des points d'abscisses éloignées (L) et les croisements d'une courbe avec elle-même (V). L'enroulement d'une courbe autour de l'autre reproduit la structure secondaire de l'ADN (figure 1.3).

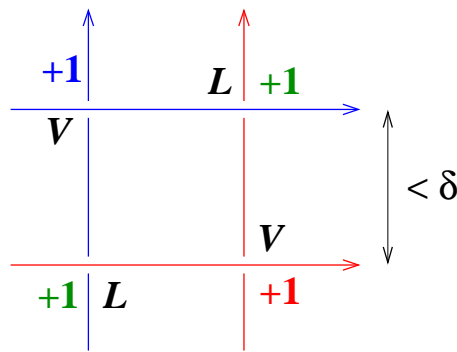


fig. 2.7: Vue en détail d'un croisement d'une courbe double. Les croisements de type L et V sont indiqués. Le total des indices de ces deux types est le même. Il dépend de la direction de projection.

Étudions alors l'indice de liage dans la limite $\delta \rightarrow 0$

$$\begin{array}{rcll}
 Lk \text{ calculé dans la direction } \hat{\mathbf{u}} & Lk & = & \frac{1}{2}x_P(\hat{\mathbf{u}}) + \frac{1}{2}x_L(\hat{\mathbf{u}}) \\
 \delta \rightarrow 0 & \downarrow & & \downarrow \quad \downarrow \\
 & Lk & = & Tw + \frac{1}{2}Vr(\hat{\mathbf{u}}) \quad (\text{I-2.16}) \\
 \text{moyenne sur } \hat{\mathbf{u}} & \langle Lk \rangle = Lk & = & Tw + \langle Vr \rangle
 \end{array}$$

La quantité $\langle Vr \rangle$ est appelée la **vrille** de la courbe limite. Elle est notée Wr dans la suite. Nous venons d'établir un résultat connu sous le nom de théorème de Călugăreanu (Călugăreanu, 1959) :

$$\boxed{Lk = Tw + Wr} \quad (\text{I-2.17})$$

avec

$$Wr \stackrel{\text{déf.}}{=} \langle Vr \rangle . \quad (\text{I-2.18})$$

Sous sa forme originale le théorème de Călugăreanu s'écrit

$$Wr + \frac{1}{2\pi} \oint \tau ds = Wr^t,$$

où Wr^t est un entier ne dépendant que du nœud formé par la courbe (voir la section 5.3.b). C'est White qui l'a adapté à l'ADN en prenant en compte une torsion interne.

2.3.c Exemple

Revenons à la figure 2.1. La figure 2.1(a) représente un objet de section carrée qui n'a pas de torsion ($Tw = 0$), mais dont la face colorée tourne d'un quart de tour entre le haut et le bas de la figure, ce qui signifie que $Lk = \frac{1}{4}$, on en déduit que cet objet possède une vrille de $Wr = \frac{1}{4}$. Sur la figure 2.1(b) en revanche, la vrille est nulle car l'objet est rectiligne ($Wr = 0$), mais on a toujours $Lk = \frac{1}{4}$ car la face colorée tourne entre le haut et le bas du même angle que sur la figure (a). On voit également que $Tw = \frac{1}{4}$ car la barre possède une torsion et tourne d'un quart de tour. Cette analyse se résume dans les égalités suivantes

$$Lk = Tw + Wr \quad (\text{I-2.17})$$

$$\frac{1}{4} = 0 + \frac{1}{4} \quad (\text{fig. 2.1(a)})$$

$$\frac{1}{4} = \frac{1}{4} + 0 \quad (\text{fig. 2.1(b)})$$

Le théorème de Călugăreanu nous apprend que la torsion d'un objet, à laquelle est associée une énergie de torsion (I-2.13) se transforme en vrille par déformation

de la structure tertiaire. Cette vrille est associée à une énergie de courbure que nous avons déjà évoquée et qui sera introduite dans les modèles de l'ADN. Les fluctuations thermiques de la géométrie de la molécule, liées aux énergie de torsion et de courbure, s'étudient grâce aux fluctuations de la vrille. On intégrera la notion de vrille dans un modèle de polymère, appelé modèle du ver, au chapitre suivant.

2.4 Les formulations mathématiques de la vrille

Voyons maintenant comment les expressions mathématiques permettant de calculer la vrille se déduisent de la démonstration du théorème de Călugăreanu. Nous donnons ici trois expressions : la formule de Tait qui découle directement de notre construction, la formule de Călugăreanu et la formule de Fuller construite à partir d'un point de vue intrinsèque à la molécule. Nous utiliserons, qualitativement ou quantitativement, ces trois formules, en choisissant la plus adaptée au contexte.

2.4.a La formule de Tait

On utilise tout d'abord la définition la définition (I-2.18). Il s'agit simplement de

$$W_{\vec{r}} = \langle V_{\vec{r}} \rangle = \int_{S^2} V_{\vec{r}}(\hat{\mathbf{u}}) d\hat{\mathbf{u}}, \quad (\text{I-2.19})$$

que l'on connaît aussi sous le nom de formule de Tait*.

2.4.b La formule de Călugăreanu

Il est aussi possible d'utiliser la formule analytique de l'indice de liage (I-2.4). D'après la définition de l'indice de vrille, il faut calculer l'indice de liage de la courbe limite \mathcal{C} avec elle-même.

$$W_{\vec{r}}(\mathcal{C}) = Lk(\mathcal{C}, \mathcal{C}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{r} \cdot \oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{r}' \times \frac{\mathbf{r}' - \mathbf{r}}{\|\mathbf{r}' - \mathbf{r}\|^3}. \quad (\text{I-2.20})$$

La formule ci-dessus est appelée formule de Călugăreanu du nom du mathématicien qui a le premier compris que la formule de Gauss (I-2.4) est également pertinente avec une courbe unique (Călugăreanu, 1959). White a généralisé cette formule pour des objets de dimension quelconque, vérifiant une relation de type (I-2.17) (White, 1969). Historiquement c'est Edwards qui a le premier utilisé cette formule en physique des polymères (Edwards, 1968), dans le but de déterminer s'ils étaient noués ou non.

* Signalons l'existence d'une formule similaire pour la courbure totale : si $K(\hat{\mathbf{u}})$ est la courbure totale de la projection plane orthogonalement au vecteur $\hat{\mathbf{u}}$ de la courbe \mathcal{C} alors $\oint_{\mathcal{C}} \kappa ds = \langle K(\hat{\mathbf{u}}) \rangle$ (Fáry, 1948).

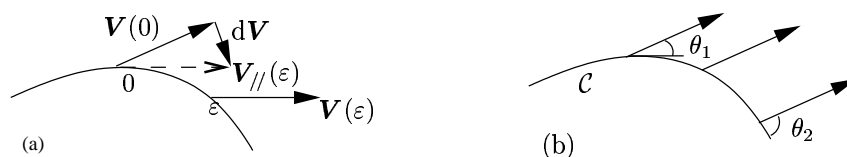


fig. 2.8: (a) *Définition du transport parallèle.* La variation $d\mathbf{V} = \mathbf{V}(0) - \mathbf{V}(\varepsilon)$ est calculée dans le plan. La translation qui transforme $\mathbf{V}(\varepsilon)$ en $\mathbf{V}_{//}(\varepsilon)$ est faite depuis l'extérieur de la courbe. Le vecteur \mathbf{V} est transporté parallèlement si $d\mathbf{V}/\varepsilon \rightarrow 0$ lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. (b) *Vecteur \mathbf{V} transporté parallèlement.* Ici la courbure de la trajectoire implique une rotation du vecteur \mathbf{V} par rapport à la tangente à \mathcal{C} . L'angle de rotation $\theta_2 - \theta_1$ est la courbure de l'arc. Le transport parallèle sur le plan est trivial car il n'y a pas de courbure. Le transport parallèle sur la sphère n'est plus trivial (voir figure 2.9).

Plus tard il a été montré que cette formule ne peut pas indiquer si une courbe est nouée (en effet elle n'est pas invariante par isotopie [définie section 2.1.b], alors que la notion de nœud l'est) et qu'il fallait utiliser d'autres objets invariants par isotopie pour détecter les nœuds (Vologodskii et coll., 1974) (voir le chapitre 5).

2.4.c La formule de Fuller

Une approche du théorème de Călugăreanu a été proposée par Fuller. Elle fait appel à la notion de transport parallèle. Nous l'illustrons ici en nous plaçant du point de vue intrinsèque, c'est-à-dire que nous imaginons être un marcheur microscopique se déplaçant le long de la molécule d'ADN. Nous utilisons la théorie de Riemann qui permet de décrire les objets courbés d'un point de vue *intrinsèque*, avec des outils locaux.

Le point de vue intrinsèque

Imaginons que nous nous avançons sur la courbe médiane \mathcal{C} située entre les deux brins d'ADN, et que nous souhaitons mesurer la vrille de la molécule dans une conformation fixée. Pour cela on mesure la torsade telle qu'on la voit « de l'intérieur ».

Calcul de la torsade et transport parallèle

Pour calculer la torsade, on parcourt la molécule une fois en déplaçant un vecteur. Lorsque l'on revient au point de départ, le vecteur a tourné d'un certain angle θ . Pour en déduire la torsade il faut ajouter le terme $\Omega = \int (\omega - \omega_0) ds$ décrivant la rotation interne de la double hélice. Précisons comment le déplacement du vecteur \mathbf{V} doit se faire. Au point de départ, $\mathbf{V} = \mathbf{V}_i$. On doit le faire évoluer le long de la courbe (le

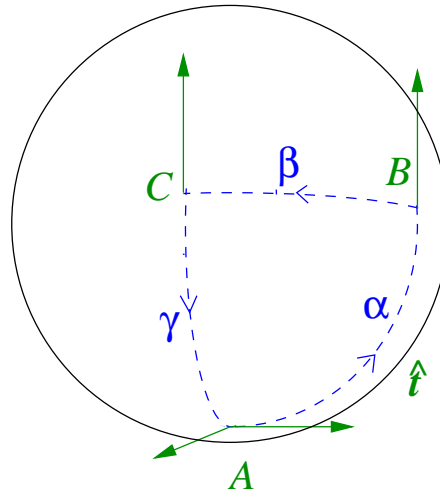


fig. 2.9: *Transport parallèle sur la sphère du vecteur tangent. Le vecteur est transporté sur le chemin ABCA les long des arcs α , β et γ . À chaque instant, il est parallèle à lui-même. Cependant lorsqu'il revient au point A, il a tourné de $\pi/2$. Cet angle est la courbure totale de la surface de périmètre ABC.*

transporter) de sorte qu'il pointe, du point de vue intrinsèque, toujours dans la même direction. On effectue ainsi un transport parallèle. Le transport parallèle est illustré sur les figures 2.8 et 2.9 (voir aussi (Misner et coll., 1973)). Le transport parallèle de \mathbf{V} est nécessairement une rotation dans le plan $(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{b}})$. On déduit des équations de Frénet et de la définition de la dérivation covariante de Levi-Civita,

$$D\mathbf{V} \stackrel{\text{déf.}}{=} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial s} - \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial s} \cdot \hat{\mathbf{t}} \right) \hat{\mathbf{t}}, \quad (\text{I-2.21})$$

l'expression de la rotation du vecteur \mathbf{V} dans le repère $(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{b}})$, due au transport parallèle (c'est-à-dire la solution de l'équation $D\mathbf{V} = 0$)*

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial s} = \tau(s) \hat{\mathbf{t}} \times \mathbf{V}. \quad (\text{I-2.22})$$

Lorsque l'on revient au point de départ après avoir parcouru \mathcal{T} une seule fois, le vecteur final \mathbf{V}_f fait un angle θ avec \mathbf{V}_i . C'est un angle dans le plan, il ne se mesure

* plus explicitement, on a $D\mathbf{V} = 0$, $D\hat{\mathbf{n}} = \tau\hat{\mathbf{b}}$ et $D\hat{\mathbf{b}} = -\tau\hat{\mathbf{n}}$. Alors

$$\begin{cases} D(\mathbf{V} \cdot \hat{\mathbf{n}}) = \mathbf{V} \cdot D\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{V} \cdot \tau\hat{\mathbf{b}} = \tau \mathbf{V} \cdot \hat{\mathbf{b}} \\ D(\mathbf{V} \cdot \hat{\mathbf{b}}) = \mathbf{V} \cdot D\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{V} \cdot (-\tau\hat{\mathbf{n}}) = -\tau \mathbf{V} \cdot \hat{\mathbf{n}}. \end{cases}$$

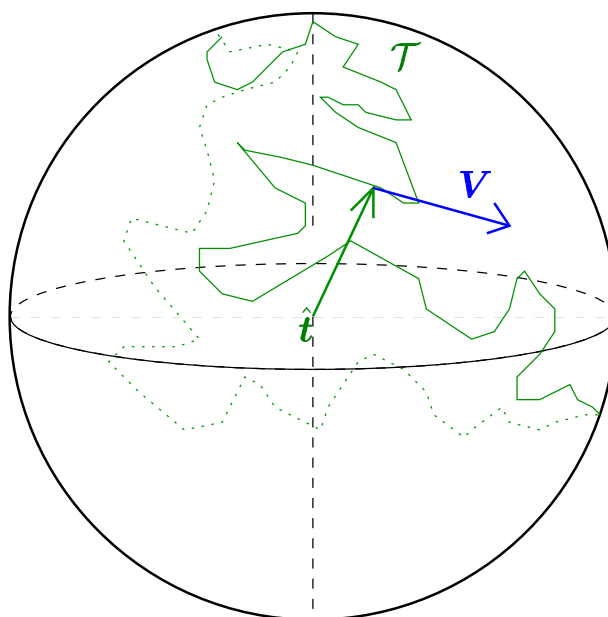


fig. 2.10: La sphère \mathcal{S}^2 parcourue par \hat{t} (courbe \mathcal{T}). Le vecteur \hat{n} est tangent à la courbe, le vecteur \mathbf{V} est transporté parallèlement le long de la courbe.

que modulo 2π . Il faut ajouter Ω que l'on mesure en comptant combien de fois un brin tourne autour de \mathcal{C} et en retirant $L\omega_0$. La torsade recherchée est la somme $\theta + \Omega$ mais elle n'est définie que modulo 2π . La vrille mesurée se déduit du théorème de Călugăreanu, exprimé modulo 1,

$$W_r^F \stackrel{\text{déf.}}{\equiv} -\frac{\theta + \Omega}{2\pi} \pmod{1} \equiv \underbrace{-\frac{1}{2\pi} \oint (\tau(s) + \omega(s) - \omega_0) ds}_{-Tw} \pmod{1}. \quad (\text{I-2.23})$$

Représentation sur la sphère

On représente géométriquement le transport parallèle du vecteur \mathbf{V} le long de \mathcal{C} de la façon suivante: comme le vecteur tangent \hat{t} est de norme unité, il pointe sur la sphère unité \mathcal{S}^2 , la fonction $s \mapsto \hat{t}(s)$ étant un chemin continu \mathcal{T} sur \mathcal{S}^2 . Le vecteur $\mathbf{V}(s)$ étant orthogonal à \hat{t} , c'est un vecteur de l'espace tangent au point $\hat{t}(s)$ (voir figure 2.10). Le théorème de Gauss–Bonnet nous donne alors une autre expression de l'angle comme étant l'opposé de l'aire algébrique $\mathcal{A}(\mathcal{T})$ de bord \mathcal{T} sur \mathcal{S}^2 . L'aire algébrique sur une sphère est définie modulo 4π de la même façon qu'un angle

plan est défini modulo 2π . On réécrit (I–2.23)

$$W_r^F \equiv \frac{1}{2\pi} \mathcal{A}(\mathcal{T}) \pmod{1}. \quad (\text{I–2.23}')$$

L'indice de rétractabilité

L'approche intrinsèque a négligé une partie des informations géométriques. La déformation d'une courbe qui la ferait se croiser provoquant ainsi un saut de 2 pour Lk (et par conséquent pour W_r) ne se traduit par aucun saut dans la formule (I–2.23'). Cependant on peut modifier cette équation pour l'écrire modulo 2 car $\frac{1}{2\pi} \mathcal{A}(\mathcal{T})$ est défini modulo 2. Il nous reste à trouver quel est l'entier $\nu(\mathcal{C}) = 0$ ou 1 tel que

$$\boxed{W_r \equiv \nu(\mathcal{C}) + \frac{1}{2\pi} \mathcal{A}(\mathcal{T}) \pmod{2}.} \quad (\text{I–2.24})$$

Nous appelons l'équation (I–2.24) la formule de Fuller. Le nombre $\nu(\mathcal{C})$ vaut 1 pour un cercle car la vrille du cercle est nulle et $\mathcal{A}(\mathcal{T}) = 2\pi$ et on en déduit qu'il vaut 1 pour toute courbe fermée. Si la courbe est ouverte, avec deux extrémités tendant vers l'infini selon des directions *parallèles*, on utilise encore la formule (I–2.24) puisque la courbe \mathcal{T} sur la sphère unité est fermée. Une droite qui vérifie ces conditions a une vrille nulle avec $\mathcal{A}(\mathcal{T}) = 0$; dans ce cas l'indice $\nu(\mathcal{C})$ vaut 0. On voit alors que si l'on peut déformer continuellement la courbe en un point $\nu = 1$, sinon $\nu = 0$, c'est pourquoi ν est appelé **indice de rétractabilité**

$$\nu(\mathcal{C}) \stackrel{\text{déf.}}{=} \begin{cases} 1 & \text{si la courbe } \mathcal{C} \text{ est rétractable;} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{I–2.25})$$

Formule de différence de vrille

Fuller a également étudié la différence de vrille entre deux courbes déformables l'une en l'autre. Il a obtenu l'expression suivante (Fuller, 1978)

$$W_{r_1} - W_{r_0} = \frac{1}{2\pi} \int \frac{\hat{\mathbf{t}}_0 \times \hat{\mathbf{t}}_1}{1 + \hat{\mathbf{t}}_0 \cdot \hat{\mathbf{t}}_1} \cdot \frac{\partial(\hat{\mathbf{t}}_0 + \hat{\mathbf{t}}_1)}{\partial s}. \quad (\text{I–2.26})$$

Cette formule est celle de l'aire balayée par le plus petit arc de grand cercle allant du point $\hat{\mathbf{t}}_0$ à $\hat{\mathbf{t}}_1$ sur la sphère du vecteur tangent. Elle n'est valable que si les courbes ne se croisent pas au cours de la déformation et si dans l'ensemble des valeurs prises par le vecteur tangent à abscisse fixée il n'existe pas deux vecteurs opposés. Dans le cas contraire, la formule (I–2.26) doit être écrite modulo 2. Nous verrons que

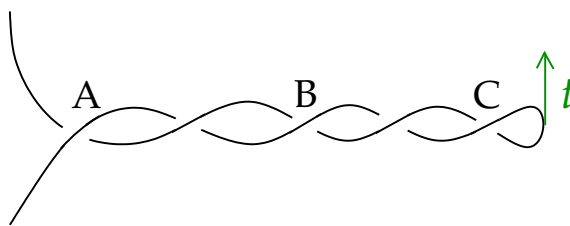


fig. 2.11: Pour déformer ce plectonème en une ligne droite, on peut faire passer la courbe à travers elle-même aux trois points A, B et C, mais cela fait changer de secteur de détermination de Wr^F à chaque fois, et on en déduit que pour ce plectonème $Wr^F = Wr - 3 \times 2$. Si on dévisse la boucle en tournant son extrémité, le vecteur tangent au point extrême de la boucle prend la valeur $-\hat{e}_z$ trois fois.

cette condition restreint le champ d'application de cette formule. Une méthode pour calculer la vrille d'un objet obtenu par déformation d'un objet simple consiste à utiliser la formule (I-2.26) en connaissant la vrille de la courbe 0. Dans le cas où la courbe de référence est un cercle paramétré sur $[0, 2\pi]$

$$Wr = 1 + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\cos \theta + \dot{\theta} \sin(\varphi + s) + \dot{\varphi} \sin \theta \cos \theta \cos(\varphi - s)}{1 + \sin \theta \cos(\varphi + s)} ds, \quad (\text{I-2.27})$$

où $\theta(s)$ et $\phi(s)$ sont les coordonnées sphériques du vecteur tangents $\hat{t}(s)$ et ' désigne la dérivée par rapport à s . La formule de Fuller dans le cas où la courbe de référence est une droite de \mathbf{R}^3 s'écrit (Fain et coll., 1997)

$$Wr = \frac{1}{2\pi} \int_0^L \dot{\varphi} (1 - \cos \theta) ds. \quad (\text{I-2.28})$$

Cette fois-ci la courbe n'est pas fermée mais elle se prolonge indéfiniment dans une direction donnée. On dira d'une telle courbe qu'elle est **ouverte**. La droite infinie, qui joue le rôle de référence, a une vrille nulle ($Wr_0 = 0$). Remarquons que cette formule est celle de l'aire sur la sphère du vecteur tangent délimitée par le chemin que parcourt $\hat{t}(s)$ lorsque s parcourt la courbe.

2.4.d Le cas particulier d'un plectonème

Montrons maintenant qu'il existe des configurations telles que l'on a $Wr \neq Wr^F$. L'exemple typique d'une telle conformation est le plectonème (voir figure 2.11). Pour dérouler un plectonème en une ligne droite, c'est-à-dire la configuration de référence pour la formule de Fuller, on doit soit faire passer la courbe à travers elle-même, soit faire prendre la valeur $-\hat{e}_z$ au vecteur en un point. Ce faisant, on change le nombre

entier m tel que $W_r^F = W_r + 2m$. Par exemple lorsque la courbe de la figure 2.11 se traverse au point A à partir de la configuration représentée, la valeur de la vrille donnée par l'équation (I–2.28) ne change pas, alors que le signe du croisement passe de -1 à $+1$, d'après la formule de Tait W_r est augmentée de 2. Comme il y a trois croisements de ce type, on a $m = 3$.

De même si on dévisse la boucle, le vecteur tangent à l'extrémité du plectonème tourne dans un plan parallèle à \hat{e}_z et prend exactement trois fois la valeur $-\hat{e}_z$. On retrouve le fait que $m = 3$.

2.5 Extension de la notion de vrille à une chaîne ouverte

Les expériences de micromanipulation que nous allons étudier placent l'ADN dans une géométrie très spécifique. La molécule est *ouverte* et ses extrémités sont parallèles. La formule de Fuller (I–2.24) permet de généraliser le concept de vrille à des chaînes infinies *ouvertes* tendant vers l'infini dans la même direction aux deux extrémités. Il faut adapter les outils déjà construits pour les chaînes fermées à des chaînes ouvertes. Le théorème de Fuller l'est déjà (équation (I–2.28)), nous verrons dans quelles conditions il est applicable. Puis nous montrerons comment la formule de Călugăreanu se généralise à une chaîne ouverte.

2.5.a Domaine de validité de la formule de Fuller sans modulo

La formule de Fuller n'est *a priori* applicable que modulo 2. Cependant, il existe des configurations identifiables telles que la formule soit valable dans \mathbf{R} . Ces configurations sont celles pour lesquelles on est sûr que la déformation de la chaîne en une ligne droite est faisable sans la couper ou avoir un vecteur tangent égal à $-\hat{e}_z$ au cours de la déformation. Remarquons que si on a en tout point $\hat{t} \cdot \hat{e}_z > 0$, alors ces conditions sont vérifiées.

En effet sous cette hypothèse, pour z fixé il n'existe qu'un point de la courbe de cote z . On déforme alors cette courbe sans risquer de la couper en déplaçant les points de sorte que ce soit toujours le cas. $\hat{t} \cdot \hat{e}_z$ restant positif tout au long de cette déformation la valeur $-\hat{e}_z$ n'est jamais atteinte. Ainsi lorsque le vecteur tangent reste confiné dans l'hémisphère $\theta < \pi/2$, la formule de Fuller est valable dans \mathbf{R} .

2.5.b Fermeture de la chaîne

Pour nous ramener au cas de la chaîne fermée nous devons refermer la courbe en ajoutant de nouvelles portions. Aucune configuration réalisable par la molécule pendant une expérience ne doit intersecter la partie ajoutée, pour éviter de modifier le supertour de $\pm 4\pi$ (voir paragraphe 1.2.b).

TAB. 2.1: Les différents termes de l'intégrale de Călugăreanu pour une chaîne refermée. Le tableau est symétrique, il y a 10 termes distincts.

	\mathcal{C}	\mathcal{X}	\mathcal{X}'	\mathcal{K}
\mathcal{C}	$Wr(\mathcal{C})$	w	w'	0
\mathcal{X}	w	0	0	0
\mathcal{X}'	w'	0	0	0
\mathcal{K}	0	0	0	0

On prolonge la courbe selon la direction de la force, z , à une grande distance. On la referme à l'aide d'un arc de cercle, comme sur la figure 2.12. On note \mathcal{C} la courbe réelle que forme la molécule, \mathcal{X} et \mathcal{X}' les deux segments de droite prolongeant la courbe et \mathcal{K} l'arc de cercle contenu dans le même plan que \mathcal{X} et \mathcal{X}' et refermant la courbe. Aucune configuration ne peut couper cette courbe. Le passage de la bille sous la molécule, illustré sur la figure 1.8, est donc interdit, car la ligne verticale passant par le centre de la bille ne peut pas couper la molécule.

2.5.c Calcul de l'intégrale de Călugăreanu

Nous examinons les différents termes de la double intégrale (I-2.20) qui est l'expression *la plus générale* de la vrille car elle ne suppose aucune contrainte sur la courbe, contrairement à la formule de Fuller, certes plus simple, mais qui ne s'applique qu'à un sous-ensemble de toutes les chaînes. Les différents termes à calculer viennent des contributions où s et s' sont dans chacune des parties de la courbe. Comme l'intégrale est symétrique en s et s' il y a 10 termes différents à calculer. Les termes faisant intervenir deux des trois parties \mathcal{K} , \mathcal{X} et \mathcal{X}' sont nuls car ces portions de courbe sont dans un même plan, par construction. Lors des mouvements de la molécule, les segments \mathcal{X} et \mathcal{X}' sont amenés à bouger par translation, et l'arc de cercle \mathcal{K} à tourner et se déformer. Le tableau 2.1 montre que ces mouvements n'ont pas de conséquences. Il reste trois termes à calculer en plus de $Wr(\mathcal{C})$: le terme croisé entre \mathcal{C} et \mathcal{K} est nul car c'est leur indice de liage : en choisissant \mathcal{K} suffisamment loin de \mathcal{C} on a $Lk(\mathcal{C}, \mathcal{K}) = 0$ d'où le résultat. Les deux termes que nous avons notés w et w' correspondent aux indices de liage $Lk(\mathcal{C}, \mathcal{X})$ et $Lk(\mathcal{C}, \mathcal{X}')$ respectivement. L'intégrale de Călugăreanu–White calculée sur la totalité de la courbe fermée $\mathcal{C} \cup \mathcal{X} \cup \mathcal{K} \cup \mathcal{X}'$ est

$$Wr(\mathcal{C}) + 2w + 2w'. \quad (\text{I-2.29})$$

Notre calcul numérique de la vrille utilisera cette expression.

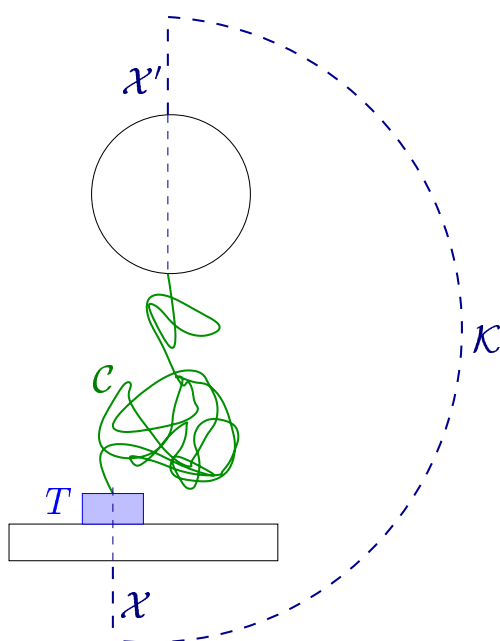


fig. 2.12: Pour se ramener à une courbe fermée, on commence par s'éloigner de la courbe qui nous intéresse, \mathcal{C} , afin de ne pas créer de croisements supplémentaires qui risqueraient de modifier considérablement le résultat. Ces sont les segments \mathcal{X} et \mathcal{X}' qui jouent ce rôle. Ensuite on referme la courbe par un arc de cercle \mathcal{K} que l'on place dans le même plan que \mathcal{X} et \mathcal{X}' . T est un absorbeur de torsade. Toute la torsade de la configuration y est emmagasinée.

L'angle de vrille

Dans la suite nous nous restreindrons à des expériences sans supertour, pour lesquelles $\chi = 0$, ce qui nous place dans un secteur d'indice de liage nul $Lk = 0$. La configuration de référence correspond à une chaîne \mathcal{C} rectiligne, pour laquelle $Wr = 0$ et $Tw = 0$. La fermeture imaginaire du paragraphe précédent est complétée par un absorbeur de torsade T (voir la figure 2.12). Toute la torsade est contenue dans T , et l'angle de torsion emmagasiné est $2\pi Tw = 2\pi(Lk - Wr) = -2\pi Wr$. L'angle de rotation mesuré expérimentalement est l'angle de vrille $\chi_C = -2\pi Wr$. On revient ainsi à une interprétation angulaire de la vrille comme sur la figure 2.1.