

Table des figures

1.1	Les quatre bases de l'ADN	4
1.2	Structure primaire de l'ADN	5
1.3	Structure secondaire de l'ADN B	6
1.4	Deux superstructures courantes de l'ADN.	6
1.5	Micromanipulation de l'ADN	8
1.6	Figures d'interférences	9
1.7	Mesure de la force	9
1.8	Supertour induit par le mouvement de la bille	10
1.9	Courbes force–extension expérimentales	11
2.1	Mise en évidence visuelle de la vrille	14
2.2	Projection sur un plan d'une courbe tridimensionnelle	15
2.3	Représentation plane des croisements	16
2.4	Modifications de Reidemeister	18
2.5	Deux exemples de courbes liées	19
2.6	Deux brins proches l'un de l'autre	24
2.7	Détail d'un croisement d'une courbe double	24
2.8	Transport parallèle dans le plan	27
2.9	Transport parallèle sur la sphère	28
2.10	Sphère du vecteur tangent	29
2.11	Plectonème avec $Wr \neq Wr^F$	31
2.12	Fermeture de la courbe	34
3.1	Chaîne librement jointe	36
3.2	Comparaison des modèles avec l'ADN réel	45
4.1	Construction d'une chaîne	52
4.2	Distribution de vrille pour des chaînes courtes	56
4.3	Répartition des valeurs de m	57
4.4	Chaîne avec un segment retourné	58
4.5	Différence entre deux formulations	59
4.6	Fluctuations en fonction de la longueur	60

4.7	Rapport ρ_4 en fonction de la longueur	62
4.8	Correction due à la fermeture	64
4.9	Construction d'une chaîne sous tension : cas $\mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{t}} > 0$	65
4.10	Construction d'une chaîne sous tension : cas $\mathbf{f} \cdot \hat{\mathbf{t}} < 0$	65
4.11	Largeur de la répartition des valeurs de m en fonction de la force	66
4.12	Fluctuation de la vrille en fonction de la force	67
4.13	Comparaison des fluctuations dans le domaine expérimental	68
4.14	Courbe force–fluctuation en fonction du nombre du nombre de segments retournés	68
4.15	Formules d'approximation de $\langle Wr^2 \rangle$	69
5.1	Les nœuds jusqu'à 5 croisements	74
5.2	Addition de nœuds	75
5.3	Relations chirurgicales	76
5.4	Nœud presque plat	80
5.5	Probabilités de différents nœuds	85
5.6	Découpage en blocs élastiques d'une chaîne sous tension	86
5.7	Proportion de nœuds en fonction de la force	88
6.1	Exemples d'états de polarisation	91
6.2	Sphère de Poincaré	93
6.3	Diffusion de la lumière par une particule	95
6.4	Libre parcours moyen de transport du régime de Rayleigh–Gans	96
6.5	Dispositif expérimental pour la rétrodiffusion multiple	101
6.6	Photographie de rétrodiffusion de Rayleigh	102
6.7	Photographie de la rétrodiffusion avec de grandes particules	102
6.8	Interprétation topologique de la symétrie quatre	103
6.9	Simulation de motif avec un milieu optiquement actif	104
1.1	La force de Coulomb	120
1.2	Répartition des charges sur réseau	122
1.3	Illustration de la méthode d'Ewald	123
1.4	Principe de découpage des méthode multipolaires	125
2.1	Variables locales de l'algorithme	131
2.2	La loi de Gauss	132
2.3	Mouvement d'une particule	133
2.4	Mouvement de fluctuation de \mathbf{D}	133
2.5	Comparaison des facteurs de structures	135
2.6	Temps de corrélations	136

Table des matières

Remerciements	iii
I Étude de la mécanique statistique de l'ADN à l'aide de la notion de vrille	1
1 La molécule d'ADN	3
1.1 Un double polymère: l'ADN	4
1.1.a Structure primaire	4
1.1.b Structure secondaire	5
1.1.c Structure tertiaire	5
1.2 Les expériences de micromanipulation sur molécule unique	7
1.2.a Principe	7
1.2.b Les mesures	8
1.2.c Résultats expérimentaux	11
1.3 Objectifs de la thèse	11
2 De la double chaîne à la notion de vrille	13
2.1 Outils mathématiques	15
2.1.a Les diagrammes de lien	15
2.1.b L'homotopie et l'isotopie	16
2.1.c Indice de liage Lk entre deux courbes	17
2.2 Le trièdre de Frénet	21
2.2.a La courbure	21
2.2.b La torsion	21
2.3 La vrille	22
2.3.a L'indice de vrille d'un diagramme	23
2.3.b Le théorème de Călugăreanu	23
2.3.c Exemple	25
2.4 Les formulations mathématiques de la vrille	26
2.4.a La formule de Tait	26

2.4.b	La formule de Călugăreanu	26
2.4.c	La formule de Fuller	27
2.4.d	Le cas particulier d'un plectonème	31
2.5	Extension de la notion de vrille à une chaîne ouverte	32
2.5.a	Domaine de validité de la formule de Fuller sans modulo	32
2.5.b	Fermeture de la chaîne	32
2.5.c	Calcul de l'intégrale de Călugăreanu	33
3	Modèles pour l'ADN	35
3.1	Un modèle simple : le modèle de Kuhn	36
3.2	Le modèle d'Edwards	37
3.3	Un modèle discret de polymère semi-flexible	38
3.4	Le modèle du ver	39
3.4.a	Construction du modèle	39
3.4.b	Longueur de persistance	39
3.4.c	Distribution de probabilité de la vrille	40
3.4.d	Modèle du ver sous tension	41
3.4.e	Résultats du modèle du ver	42
3.5	Quel modèle pour l'ADN ?	44
3.6	Le modèle de la tige élastique	45
3.6.a	Motivation expérimentale	45
3.6.b	Énergie du modèle de la tige	46
3.6.c	Le supertour	47
3.6.d	Résolution par analogie quantique	48
3.6.e	Calcul de la vrille à grande force	49
3.6.f	Pathologie du modèle	49
3.6.g	Traitement numérique du problème	50
4	Simulations numériques	51
4.1	Méthode numérique	52
4.1.a	Chaîne semi-flexible discrète	52
4.1.b	Calcul de la vrille	53
4.1.c	Choix de l'algorithme	54
4.1.d	Limitations de l'algorithme	54
4.2	Chaînes sans tension	55
4.2.a	Vérifications de résultats simples	55
4.2.b	Formulation de la vrille	56
4.2.c	Comportement des fluctuations en fonction de la longueur	59
4.2.d	Contribution de la fermeture	63
4.3	Chaînes sous tension	63
4.3.a	Adaptation de l'algorithme	64

4.3.b	Convergence vers le modèle de Mézard et Bouchiat	66
4.3.c	Interprétation de l'épaulement	69
4.4	Conclusion	70
I–A	<i>Comment on “Elasticity of a supercoiled DNA molecule”</i>	71
5	La vrille des chaînes nouées	73
5.1	Introduction à la théorie des nœuds	74
5.1.a	Les nœuds	74
5.1.b	Les opérations sur les nœuds	74
5.1.c	Les nœuds ouverts	76
5.2	Invariants	76
5.2.a	Le polynôme de Conway	77
5.2.b	Le polynôme de Jones	78
5.3	Topologie d'une chaîne	80
5.3.a	Identification des nœuds	80
5.3.b	La vrille topologique	80
5.3.c	Pertinence du concept de vrille topologique	81
5.4	Calcul de la correction topologique	84
5.4.a	Probabilité de formation d'un nœud	84
5.4.b	Calcul de la correction topologique	86
5.4.c	Correction topologique en fonction de la force	86
5.5	Conclusion	88
6	Diffusion multiple de la lumière polarisée	89
6.1	La lumière polarisée	90
6.1.a	Origine électromagnétique de la polarisation	90
6.1.b	Vecteurs de Jones	91
6.1.c	Les paramètres de Stokes	92
6.2	Caractéristiques de la diffusion multiple	93
6.2.a	Longueurs caractéristiques	94
6.2.b	Les différents régimes de diffusion multiple	94
6.3	Transport de la polarisation et vrille	97
6.3.a	Le transport de la polarisation par diffusion multiple	97
6.3.b	Phase géométrique	97
6.4	Dépolarisation de la lumière transmise	98
6.4.a	Calcul du champ émergent	98
6.4.b	Représentation sur la sphère de Poincaré	99
6.4.c	Longueur de transport de la polarisation	100
6.5	Motifs de lumière polarisée rétrodiffusée	100
6.5.a	Dispositif expérimental	100

6.5.b	Modèle simple pour l'interprétation des expériences	101
6.6	Conclusion et perspectives	103
I–B	<i>Writhing photons and Berry phases in polarized multiple scattering</i>	107
I–C	<i>Geometric phases and polarization patterns in multiple light scattering</i>	113
II	Simulations locales d'interactions coulombiennes	117
1	Simulations de systèmes chargés	119
1.1	Rappels d'électrostatique	120
1.1.a	La loi de Coulomb	120
1.2	La notion de complexité numérique	121
1.2.a	Définition	121
1.2.b	Exemple	121
1.3	Quelques algorithmes usuels	122
1.3.a	Les trames	122
1.3.b	Les sommes d'Ewald	123
1.3.c	Les méthodes de multipôles	124
1.4	Les nouveaux défis	125
2	Algorithmes locaux pour l'électrostatique	127
2.1	Méthode naïve	128
2.2	Introduction d'un champ transverse	129
2.2.a	Solution générale de l'équation de Gauss	129
2.2.b	Énergie électrostatique	129
2.3	Exemple de réalisation sur réseau cubique	131
2.3.a	Discrétisation sur réseau cubique	131
2.3.b	Mouvements de Monte–Carlo	133
2.3.c	Résultats	134
2.4	Discussion	135
II–A	<i>Local simulation algorithms for Coulomb interactions</i>	137
	Références bibliographiques	143
	Index	149