Capitolo 5

Soluzioni della dinamica non lineare a temperatura nulla

5.1 I solitoni ed i modelli non lineari di DNA

I solitoni sono onde localizzate nello spazio; essi si propagano a velocità costante senza cambiare la loro forma, sono molto stabili alle perturbazioni, in particolare alle collisioni con onde lineari di piccola ampiezza, ed hanno un elevato tempo di vita. Esempi di solitoni [Pey 96, Dra88] si trovano in idrodinamica: la prima osservazione di un solitone fu fatta da J. Scott-Russel nel 1834 che rimase colpito da un'onda generata da una barca in uno stretto canale che si propagava solitaria, la spiegazione analitica di questa osservazione fu fornita da Korteweg-de Vries nel 1985 che stabilì l'equazione KdV. Un altro esempio molto importante sono i solitoni generati nelle fibre ottiche, in cui l'indice di rifrazione dipende dal campo elettrico: $n(E) = n_0 + \chi_3 |E|^2$. Le equazioni di Maxwell che descrivono il campo elettrico nelle fibre ammettono dunque delle soluzioni solitoniche descritte da una equazione non lineare di Schrödinger; queste soluzioni possono essere usate per trasportare informazioni su distanze molto lunghe a velocità molto elevate. Si possono inoltre creare dei solitoni per esempio in un sistema di spin ferromagnetici o in una catena di pendoli accoppiati; questi sono descritti dall' equazione di sine-Gordon.

Modelli non lineari del DNA

Attraverso lo studio, effettuato tramite NMR, dello scambio di protoni tra il DNA e la soluzione, si è dedotto che il DNA presenta, anche a temperatura ambiente, delle fluttuazioni di apertura e chiusura chiamate breathing (ovvero respirazione) del DNA [Gue87]. Questo ha attirato l'attenzione dei fisici non lineari che, ispirandosi alla teoria dei solitoni, hanno maturato l'idea, suggerita da Prohofsky in [Pro 79], che tali eccitazioni possano essere all'origine della localizzazione dell'energia che conduce la molecola alla formazione di una bolla di denaturazione locale nella iniziazione della trascrizione [Sal 92, Dau 93b, Dau 93c, For 94, Tin 96]. A partire dagli anni 80 sono stati sviluppati una serie di modelli con lo scopo di descrivere queste eccitazioni non lineari per gli stati aperti del DNA [Gae94, Dau 93d]. Il primo modello è stato proposto da Englander *et al.* [Eng 80] esso è simile ad un modello di sine-Gordon per una catena di pendoli accoppiati. In seguito Yomosa ha proposto un modello di rotatore piano in cui si assume che ciascuna base ruoti, nel piano ortogonale all'asse dell'elica, intorno all'asse costituito dallo scheletro zucchero-fosfato; anche per questo modello l'equazione del moto può essere ridotta ad una equazione di sine-Gordon [Yom 83]. Un altro modello di rotatore piano è stato sviluppato da Yakushevich [Yak 89] che considera esplicitamente il legame idrogeno per scrivere il potenziale di interazione. La differenza principale tra questi modelli di rotatori piani ed il modello PB [Pey 89] è che i primi hanno degli stati aperti stabili, mentre nell'ultimo le aperture sono fluttuanti, descritte da soluzioni solitoniche chiamate breathers. Scott, Muto e collaboratori hanno infine elaborato dei modelli non lineari per studiare i movimenti longitudinali della doppia elica [Sco 85].

5.2 Introduzione

In questo capitolo presenteremo brevemente i primi lavori fatti durante la tesi. Essi sono estensivamente descritti negli articoli [Coc 99, Bar 99a], riprodotti a fine tesi, questi verranno più volte richiamati per i dettagli tecnici, e in [Bar 99b, Bar 99c]. Tre direzioni sono state sviluppate in questi lavori:

1) l'elaborazione di un modello elicoidale del DNA in cui l'angolo di twist della molecola è espresso esplicitamente da un grado di libertà microscopico definito su ciascuna coppia di basi;

2) l'elaborazione di un metodo per trovare soluzioni breathers di piccola ampiezza su un reticolo vettoriale non lineare;

3) l'applicazione di tale metodo sulle equazioni del moto del modello, sviluppate attorno alle posizioni di riposo a temperatura nulla. Questo ha permesso di studiare l'accoppiamento tra apertura e torsione su queste soluzioni non-lineari.

5.2.1 Presentazione del modello a bastoncini elastici

Il modello iniziale, vedi la lagrangiana nella formula (2) di [Bar 99a], aveva la stessa descrizione geometrica della doppia elica del DNA del modello finale presentato nel capitolo 2. Come quest'ultimo, si serviva infatti di due lunghezze definite tra una coppia di basi e la successiva: la distanza fosfato-fosfato lungo lo scheletro molecolare e la distanza assiale tra il centro di una coppia di basi e quello della coppia di basi successiva. La struttura elicoidale deriva nei due casi dal fatto che la distanza lungo lo scheletro è maggiore di quella lungo l'asse: una coppia di basi è costretta a ruotare, rispetto alla precedente, di un angolo di twist. Nel modello iniziale le fluttuazioni della doppia elica erano, tuttavia, incluse attraverso la condizione di bastoncini elastici: la distanza fosfato-fosfato fluttuava quadraticamente intorno alla posizione di riposo $L = 7$Å, mentre la distanza tra i piani era fissa ad $H = 3.4$ Å. Viceversa nel modello finale la distanza fosfato-fosfato è fissa al valore di $L = 6.95$Å mentre la distanza assiale oscilla intorno al valore di riposo $H = 3$Å questo

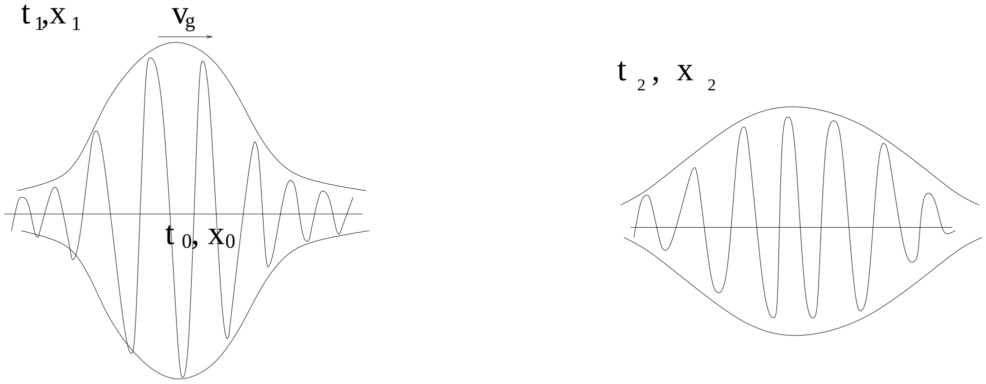

Figura 5.1: Rappresentazione schematica di un pacchetto d'onda: su scale di tempo e spazio x_0, t_0 si vedono le oscillazioni dell'onda portatrice, su scale di tempo e spazio x_1, t_1 il pacchetto d'onda si muove con la velocità di gruppo v_g, mentre su scale di tempo e spazio x_2, t_2 esso viene disperso ed appiattito dalla dispersione della velocità di gruppo, espressa nel coefficiente P vedi equazioni (5.16, 5.27,5.28).

riproduce meglio la natura delle interazioni idrofobiche ed elettrostatiche che regolano le fluttuazioni della distanza assiale rispetto a quella dei legami chimici che regolano le fluttuazioni molto minori della distanza tra le basi lungo il filamento.

Inoltre nel modello iniziale non era presente il termine di impilamento mentre esso è essenziale nella denaturazione, infatti, come abbiamo visto, esso produce l'effetto cooperativo che dà alla transizione di denaturazione le caratteristiche di una transizione di fase del primo ordine.

Infine nel modello iniziale era presente un termine nella derivata prima dell'angolo di twist (espressa nel discreto) che imponeva in modo continuo la chiralità della molecola, questo termine è stato eliminato nella versione successiva del modello perchè la costante di forza G_0 relativa ad esso non può essere legata a misure sperimentali. La chiralità della molecola è stata invece imposta direttamente dalla condizione che l'angolo di twist sia sempre positivo.

5.3 Introduzione alla ricerca di soluzioni breather di piccola ampiezza

Consideriamo il caso generale di un modello reticolare in cui delle particelle di massa m sono accoppiate armonicamente e interagiscono anche con un potenziale di substrato non lineare $V(r)$. Si possono trovare analiticamente soluzioni di piccola ampiezza della dinamica non lineare del modello. Detta R la posizione di riposo del potenziale V, l'ampiezza dell'oscillazione intorno ad essa può essere caratterizzata da un parametro $\epsilon \ll 1$: $r - R = y = \epsilon z$; ϵ diventa dunque il parametro di espansione del potenziale non lineare che si

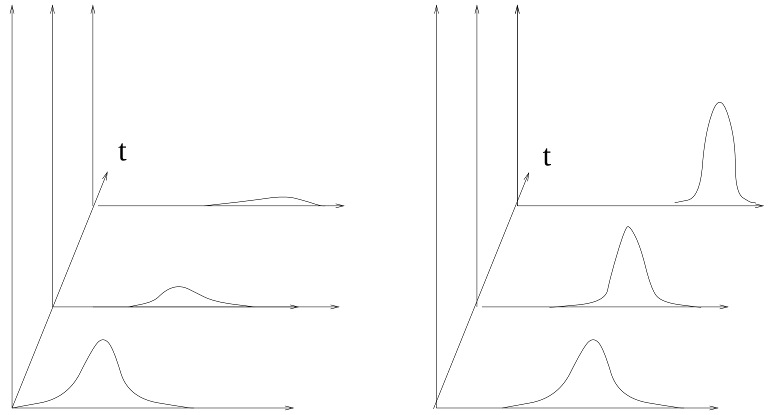

Figura 5.2: Rappresentazione schematica dell'evoluzione temporale di una eccitazione localizzata in presenza di effetti dispersivi (a sinistra) e non lineari (a destra), il bilanciamento di questi due effetti rende stabile una soluzione localizzata, da [Pey96].

scrive: $V(y) = b\,y + c\,y^2 + C\,y^3$. Le soluzioni breather di piccola ampiezza sono soluzioni localizzate costituite da un' oscillazione veloce chiamata onda portatrice, modulata da un inviluppo che varia lentamente. La loro proprietà principale è di mantenere la forma su tempi lunghi muovendosi lungo il reticolo o anche restando ferme. Un breather è in pratica un pacchetto d'onda costruito dalla sovrapposizione di onde piane i cui numeri d'onda sono situati in un piccolo intervallo. Questa caratteristica, detta di debole dispersione, che determina la variazione lenta dell'inviluppo, può essere espressa attraverso un parametro $\epsilon' \ll 1$. Per mezzo di tale parametro si possono definire differenti scale di spazio e di tempo indipendenti: a tempi corti, t_0, e distanze brevi, x_0, si vedono le oscillazioni dell' onda portatrice, su scale di tempo e spazio successive $t_1 = \epsilon' t$, $x_1 = \epsilon' x$ l'inviluppo si muove con la velocità di gruppo v_g , mentre su scale ancora successive la dispersione della velocità di gruppo tende ad appiattire e disperdere il pacchetto d'onda (vedi figura 5.1). Fissando $\epsilon' = \epsilon$ si può creare un equilibrio tra l'effetto di dispersione e quello di non linearità che permette di mantenere in modo stabile la forma dell'inviluppo ed ottenere così una soluzione localizzata stabile (vedi figure 5.2). Il metodo classico di ricerca delle soluzioni breather di piccola ampiezza si chiama Multiple Scale Expantion (MSE) [Rem 85]. Per mostrare come funziona e per paragonarlo al metodo da noi introdotto, che si basa sullo sviluppo delle relazioni di dispersione, useremo un caso semplice (il modello PB). In seguito mostreremo come è possibile generalizzare il metodo da noi introdotto per la ricerca di soluzioni in reticoli vettoriali.

5.3.1 La Multiple Scale Expantion (MSE) nel modello PB

L' Hamiltoniana del modello PB si legge [Pey 89]:

$$H = \sum_n \left\{ D(e^{-a(r_n - R)} - 1)^2 + E(r_n - r_{n-1})^2 \right\}. \tag{5.1}$$

Riscalando le variabili, per renderle adimensionali, $r' = ar$, $K = E/D$, $t' = \sqrt{Da^2/m}t$ (vedi [Bar 99a]) e sviluppando intorno alla posizione di equilibrio di H a temperatura nulla ($\{r_n = R\}$), $y_n = r'_n - aR$ si ottiene l'equazione del moto non lineare

$$\ddot{y_n} = -K\,(2y_n - y_{n-1} - y_{n+1}) - y_n + c\; y_n^2 + C\; y_n^3 \tag{5.2}$$

con $c = 3/2$, $C = -7/6$. Nella MSE semidiscreta [Rem 85] le derivate temporali si scrivono come sviluppo sulle differenti scale di tempo nel modo seguente:

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t_0} + \epsilon\frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2\frac{\partial}{\partial t_2} \tag{5.3}$$

dunque

$$\frac{\partial^2}{\partial t'^2} = \frac{\partial^2}{\partial t_0^2} + 2\epsilon\frac{\partial}{\partial t_0}\frac{\partial}{\partial t_1} + \epsilon^2\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} \tag{5.4}$$

Inoltre lo spazio sarà descritto da una variabile discreta n al livello delle oscillazioni dell'onda portatrice e da variabili continue sulle scale spaziali maggiori $x = x_1/\epsilon = x_2/\epsilon^2$. Le derivate spaziali nel continuo si scrivono analogamente alle (5.3,5.4). Si cerca una soluzione del tipo:

$$y_n = \epsilon\left[e^{i(q_0\,n_0-\omega_0 t)}A(x_1,t_1,t_2) + c.c.\right] + \epsilon^2\left[e^{2i(q_0\,n_0-\omega_0 t)}\gamma(x_1,t_1,t_2) + c.c. + \mu(x_1,t_1,t_2)\right] \tag{5.5}$$

Dove oltre al pacchetto d'onda principale con onda portatrice $e^{i(q_0\,n_0-\omega_0 t)}$ si hanno dei termini di ordine ϵ^2, di seconda armonica e non oscillante, generati dalla non linearità dell'equazione del moto (5.2). Per trovare $A(x_1,t_1,t_2)$, $\gamma(x_1,t_1,t_2)$, $\mu(x_1,t_1,t_2)$ si mette la (5.5) nella (5.2) sviluppando le derivate temporali e quelle spaziali si ottengono passando dal discreto al continuo. Analizzando progressivamente i diversi ordini in ϵ e uguagliando separatamente i termini di prima armonica, seconda armonica e non oscillante, si trova la soluzione dell' equazione del moto iterativamente.

All'ordine ϵ si ottengono le relazioni di dispersione per l'onda portatrice,

$$\omega^2 = 1 + 2\,K(1-\cos q) \tag{5.6}$$

Agli ordini successivi si passa al continuo scrivendo:

$$\begin{aligned} A_{n+1} &= A(x) + A'(x) + \frac{1}{2}A''(x) + \ldots \\ A_{n-1} &= A(x) - A'(x) + \frac{1}{2}A''(x) + \ldots \end{aligned} \tag{5.7}$$

Quindi si sviluppa il termine

$$y_{n-1} - y_{n+1} = 2\,\epsilon A(x)\cos q - 2i\epsilon^2\,\sin q\,(\frac{\partial}{\partial x_1} + \epsilon\frac{\partial}{\partial x_2})A(x) + \epsilon^3\,\cos q\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\,A(x) + \ldots \tag{5.8}$$

All'ordine ϵ^2 si ottengono

- un'equazione per la prima armonica:

$$(-2i\omega\frac{\partial}{\partial t_1} - 2iK\,\epsilon\sin q\frac{\partial}{\partial x_1})A(x) = 0 \tag{5.9}$$

da cui si ottiene

$$A(x_1, t_1) = A(x_1 - v_g\, t_1) \tag{5.10}$$

con la velocità di gruppo data da

$$v_g = K\sin q/\omega, \tag{5.11}$$

- un'equazione per il termine non oscillante

$$\mu = 2c\,|A|^2 \tag{5.12}$$

- ed una per la frequenza 2ω

$$(1 + 2e\,(1 - \cos 2q) - 4\omega^2)\gamma = c\,A^2 \tag{5.13}$$

Infine all'ordine ϵ^3 si ottiene per la frequenza principale:

$$(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} - 2\,i\,\omega\frac{\partial}{\partial t_2})\,A = 2c\,A^*\,\gamma + 2c\mu A + 3CA|A| + K\,\cos q\,\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}A - 2\,i\,K\,\sin q\frac{\partial}{\partial x_2}A \tag{5.14}$$

Questa equazione si semplifica passando alle variabili

$$\begin{aligned} s_i &= x_i - v_g\,t_i \\ \tau &= t_i \end{aligned} \tag{5.15}$$

con $i = 1, 2$ e diventa una equazione non lineare di Schrödinger

$$i\frac{\partial}{\partial \tau_2}\,A + P\frac{\partial^2}{\partial s_1^2}\,A + Q|A|^2A = 0 \tag{5.16}$$

infatti $(2i\omega v_g + 2i\,K\sin q)\frac{\partial A}{\partial s_2} = 0$, inoltre si è definito

$$\begin{aligned} P &= -\frac{1}{2\omega}\,(v_g^2 - K\,\cos(q)\,) \\ Q &= \frac{1}{2\omega}\left(4c^2 + 2c^2\,\frac{1}{1 + 2e(1 - \cos(2q)) - 4\omega^2} + 3C\right) \end{aligned} \tag{5.17}$$

Se $PQ > 0$ nell'equazione (5.16) si verifica il bilanciamento tra nonlinearità e dispersione che porta una soluzione per l'inviluppo [Has 75] di tipo breather di piccola ampiezza:

$$A(s,\tau) = \mathcal{A}\ \mathrm{sech}\left[\frac{1}{L_e}(s - u_e\tau)\right]\,\exp\left[i\frac{u_e}{2P}(s - u_c\tau)\right] \tag{5.18}$$

dove

$$\mathcal{A} = \sqrt{\frac{u_e^2 - 2u_e u_c}{2PQ}} \tag{5.19}$$

$$L_e = \frac{2P}{\sqrt{u_e^2 - 2u_e u_c}} \tag{5.20}$$

sono rispettivamente l'ampiezza e la larghezza della curva, u_e ed u_c sono i due parametri che la determinano. Una volta che è risolta l'equazione (5.16) per A si ottengono μ e γ dalle (5.12 5.13), che inseriti nella (5.5) danno la soluzione cercata.

5.3.2 Un altro metodo per trovare soluzioni breathers di piccola ampiezza

In questo paragrafo mostriamo come si possono trovare le soluzioni di piccola ampiezza attraverso lo sviluppo delle relazioni di dispersione. Il metodo che abbiamo introdotto è fondamentalmente analogo, ma più automatico, della MSE quindi permette di trovare le soluzioni con meno possibilità di errori, inoltre permette un'estensione a reticoli vettoriali in cui su ogni sito sono definite più componenti tra loro accoppiate. Esso deriva dal metodo usato in ottica per trovare soluzioni solitoniche nelle fibre [Has 95, New 92] ed è spiegato in modo dettagliato in [Coc 99].

Sviluppo di un pacchetto d'onda lineare

Il metodo introdotto consiste nello scrivere il pacchetto d'onda del termine dominante, in ϵ, nella soluzione (5.5) come la sovrapposizione di onde piane i cui numeri d'onda q sono situati su un piccolo intervallo Δq (ipotesi di debole dispersione);

$$e^{i(q_0 n_0 - \omega_0 t)} A(x_1, t_1, t_2) = \int_{q_0-\Delta q}^{q_0+\Delta q} A(q) e^{i(qn - \omega(q)t)}\, dq \tag{5.21}$$

infatti sviluppando i numeri d'onda che contribuiscono all'integrale intorno a q_0, $q = q_0 + \epsilon q_1$ si ottiene

$$\begin{aligned}
A(x_1, t_1, t_2) &= \int_{-\Delta q/\epsilon}^{+\Delta q/\epsilon} A(q_0 + \epsilon q_1)\ \exp\left\{ i\epsilon q_1 (n - \omega'(q_0)t) - i\epsilon^2 \frac{q_1^2}{2} \omega''(q_0) t \right\} dq_1 &(5.22)\\
&= \int_{-\Delta q/\epsilon}^{+\Delta q/\epsilon} A(q_0 + \epsilon q_1)\ \exp\left\{ iq_1 (x_1 - \omega'(q_0)t_1) - i\frac{q_1^2}{2} \omega''(q_0) t_2 \right\} dq_1 &(5.23)\\
&= \int_{-\Delta q/\epsilon}^{+\Delta q/\epsilon} A(q_0 + \epsilon q_1)\ \exp\left\{ iq_1 s_1 - i\frac{q_1^2}{2} \omega''(q_0) t_2 \right\} dq_1 &(5.24)
\end{aligned}$$

dove nella (5.23) abbiamo introdotto, nello spirito della MSE, le differenti scale di spazio e di tempo ponendo $\epsilon n = x_1$ $\epsilon t = t_1$, $\epsilon^2 t = t_2$ e nella (5.24) abbiamo introdotto la variabile $s_1 = x_1 - \omega' t_1$ come in (5.15). Dalla (5.23) si ricava direttamente l'equazione, analoga alle

(5.11,5.26) che lega la velocità di gruppo del pacchetto d'onda alla derivata prima della relazione di dispersione :

$$\left(\frac{\partial A}{\partial t_1} + \omega' \frac{\partial A}{\partial x_1}\right) = 0 \tag{5.25}$$

dove (vedi 5.11)

$$\omega' \equiv \frac{d\omega}{dq} = K \sin(q)/\omega \equiv v_g \tag{5.26}$$

Derivando A nella (5.24) una volta rispetto a t_2 e due volte rispetto a s_1 si ricava la relazione che lega la dispersione della velocità di gruppo alla derivata seconda della relazione di dispersione:

$$i\frac{\partial A}{\partial t_2} + \frac{\omega''}{2}\frac{\partial^2 A}{\partial s_1^2} = 0 \tag{5.27}$$

con

$$\frac{\omega''}{2} \equiv \frac{1}{2}\frac{d^2\omega}{dq^2} = \frac{1}{2\omega}\left(\frac{e}{\omega}\cos q - v_g^2\right) \equiv P \tag{5.28}$$

Finora non abbiamo ancora incluso la nonlinearità ovvero il nostro pacchetto d'onda è soluzione della equazione (5.2) linearizzata. L' equazione (5.27) assomiglia infatti all'equazione NLS (5.16) salvo che manca appunto il termine in Q che deriva dalla nonlinearità; l'equazione (5.27) ci dice che in assenza di termini non lineari la dispersione della velocità di gruppo provoca un appiattimento del pacchetto d'onda, sono proprio i termini non lineari che, rifocalizzando il pacchetto d'onda, permettono il mantenimento della forma dell'inviluppo anche su tempi lunghi, cioè sulla scala t_2 (figure 5.1 5.2). Quindi una volta identificato il termine in P dell'equazione di Schrödinger bisogna semplicemente fornire un metodo per calcolare opportunamente il contributo non lineare aggiungendolo direttamente attraverso il termine in Q nell' equazione (5.27) per ottenere la (5.16).

Inclusione della nonlinearità

Riscriviamo le equazioni del moto (5.2) in forma generale per utilizzare lo stesso formalismo di [Coc 99].

$$\ddot{y_n} = -\sum_{n'} J(n-n')\, y_n' + c\, y_n^2 + C\, y_n^3 \tag{5.29}$$

dove $J(n-n')$ sono le costanti di forza del reticolo lineare. Inserendo la forma completa della soluzione scritta in (5.5), dove lo stesso parametro ϵ usato per la dispersione del pacchetto d'onda viene qui usato nell'espansione della soluzione, abbiamo che, come già visto nell M.S.E. γ e μ vengono fissati collezionando i termini in ϵ^2 di fase rispettivamente $e^{2i(q_0 n - \omega t_0)}$ ed e^0. Scrivendo $\gamma = \gamma_c A^2$ e $\mu = \mu_c |A|^2$ γ_c e μ_c possono essere derivati dalle equazioni seguenti, come si può verificare comparandole alle (5.12,5.13)

$$\left(\omega^2(2\,q_0) - 4\,\omega^2(q_0)\right)\gamma_c \;=\; c \tag{5.30}$$

$$\omega^2(0)\mu_c \;=\; 2c \tag{5.31}$$

Infine l'equazione per Q

$$Q = \frac{1}{2\omega}\left(2\,c\,\gamma_c + 2\,c\,\mu_c + 3C\right) \tag{5.32}$$

è ottenuta collezionando i termini in ϵ^3 e di fase $e^{i(q_0 n - \omega t_0)}$. In conclusione l'equazione NLS (5.16) e la soluzione breather di piccola ampiezza si ottengono in modo immediato per un reticolo scalare qualunque dallo sviluppo in serie di Taylor delle relazioni di dispersione (5.26,5.28) e dalle equazioni (5.30, 5.31,5.32) per determinare μ, γ e Q.

5.4 Il caso di reticoli vettoriali

Nell'equazioni (8), (9) risolte in [Bar 99a] che sono riscritte in modo generale nella (21) di [Coc 99] si ha un reticolo vettoriale, perchè su ogni sito (n) ci sono due componenti (quella radiale e quella angolare ($\alpha = 1, 2$)) che sono accoppiati al livello lineare attraverso il potenziale di scheletro (nei termini in $K_{y\phi}$ dell' equazione (8), (9) in [Bar 99a]) inoltre i termini non lineari includono derivate temporali (rappresentate dagli indici $d = 0, 1, 2,\ k = 0, \dots d$ nella (21) di[Coc 99]) perchè il raggio e l'angolo sono espressi in coordinate polari e non cartesiane. Questi ultimi termini accoppiano le due variabili a livello non lineare. Problemi simili sono stati studiati da Konotop ([Kon 95, Kon 96a, Kon 96b]). La differenza principale con il caso visto in precedenza è che la relazione di dispersione non è più un' equazione come in (5.6), ma è data da un sistema lineare:

$$(\hat{J}(q) - \omega_l^2(q))\vec{V}_l(q) = 0 \tag{5.33}$$

la matrice $\hat{J}(q)$ è scritta esplicitamente per le equazioni (8) nelle (15) di [Bar 99a]). La soluzione di questo problema agli autovalori determina le frequenze ω_l delle due branche ($l = 1, 2$) e la composizione degli autovettori $\vec{V}_l(q)$ nella base del raggio e dell'angolo.

La sola parte che cambia nel metodo esposto nel paragrafo precedente è quella che riguarda la scrittura del pacchetto d'onda, esso ora diventa un vettore a due componenti:

$$e^{iq_0 n_0 - \omega_l t_0}\vec{F}(x_1, t_1, t_2) = \int_{q_0-\Delta q}^{q_0+\Delta q} A(q)\,\vec{V}_l(q)\,e^{i(qn-\omega_l(q)t)}\,dq + c.c. \tag{5.34}$$

Per ciascun numero d'onda che contribuisce all'integrale le componenti del vettore $\vec{V}_l(q)$ dipendono dal numero d'onda (q) e dalla branca l.

Dunque l'espansione del pacchetto d'onda attorno ad un numero d'onda deve essere fatta tenendo conto delle modifiche degli autovalori (relazioni di dispersione) e degli autovettori del sistema lineare quando ci si sposta di poco dal numero d'onda centrale. Queste correzioni si ricavano espandendo la matrice del sistema lineare $\hat{J}(q_0 + \epsilon q_1)$ in serie di Taylor come $\hat{J}(q_0) + \epsilon\hat{J}'(q_0)q_1 + \epsilon^2\hat{J}''(q_0)q_1^2/2 + \dots$. Le matrici $\epsilon\hat{J}'(q_0)q_1$, $\epsilon^2\hat{J}''(q_0)q_1^2/2$ sono piccole rispetto all'operatore imperturbato $\hat{J}(q_0)$, i cui autovalori sono $\omega_l^2(q_0)$ ed i cui autovettori sono $\vec{V}_l(q_0)$. Per trovare le correzioni agli autovalori ed autovettori, si scrive in accordo alla teoria delle perturbazioni [Coh 77] l'espansione di essi in ϵ,

$$\begin{aligned} \vec{V}_l(q_0 + \epsilon q_1) &= \vec{V}_l + \epsilon\vec{V}_l^{(1)}q_1 + \epsilon^2\vec{V}_l^{(2)}q_1^2/2 + \dots && (5.35)\\ \omega_l(q_0 + \epsilon q_1) &= \omega_l + \epsilon\omega_l^{(1)}q_1 + \epsilon^2\omega_l^{(2)}q_1^2/2 + \dots && (5.36) \end{aligned}$$

Il sistema lineare (5.33) viene risolto ai differenti ordini in ϵ :

$$\begin{aligned}
\epsilon^0 : \quad \hat{J}\vec{V}_l &= \omega_l^2 \vec{V}_l && (5.37)\\
\epsilon^1 : \quad (\hat{J}\vec{V}_l^{(1)} + \hat{J}'\vec{V}_l)\ q_1 &= (2\omega_l\omega_l^{(1)}\vec{V}_l + \omega_l^2\vec{V}_l^{(1)})\ q_1 && (5.38)\\
\epsilon^2 : \quad (\hat{J}'\vec{V}_l^{(1)} + \frac{1}{2}\hat{J}''\vec{V}_l + \frac{1}{2}\hat{J}\vec{V}_l^{(2)})\ q_1^2 &= ((\omega_l^{(1)})^2\vec{V}_l + \omega_l\omega_l^{(2)}\vec{V}_l + \\
&\quad 2\omega_l\omega_l^{(1)}\vec{V}_l^{(1)} + \frac{\omega_l^2}{2}\vec{V}_l^{(2)})\ q_1^2 . && (5.39)
\end{aligned}$$

$\omega_l^{(1)}$ e ω_l^2 che si ricavano dalla (5.38) e dalla (5.39), e sono espresse nella (11) e nella (12) di [Coc 99], sostituiscono ω' ed ω'' nella (5.26),(5.28) esse forniscono infatti la velocità di gruppo e la dispersione di essa che dà il parametro P nella NLS (5.16). La correzione agli autovettori $\vec{V}_l'$ va invece inserita nei termini in ϵ^2 della soluzione (22) di [Coc 99]. Le equazioni per determinare $\vec{\gamma}_l$ e $\vec{\mu}_l$ (24) e (25) di [Coc 99] sono del tutto analoghe alle (5.30) con l'unica differenza che sono espresse da dei sistemi lineari infatti $\vec{\gamma}_l$ e $\vec{\mu}_l$ sono dei vettori, ed è inclusa la possibilità che i termini non lineari contengano derivate rispetto al tempo. Infine anche la formula per Q espressa nella (27) e (30) di [Coc 99] è la generalizzazione della (5.32).

5.5 Risultati

nel modello a bastoncini elastici

Le soluzioni non lineari che si sono trovate sul modello a bastoncini elastici sono mostrate nelle figure 3,4,5 di [Bar 99a]. I parametri utilizzati $\alpha = 4.45\text{Å},\ D = 0.04eV,\ K = 1eV/\text{Å}^2$ erano stati scelte in modo da riottenere per $K_{yy} = 0.07eV/\text{Å}^2,\ D = 0.04eV$ (per K_{yy} vedi formula 10 di [Bar 99a]) l'ordine di grandezza delle costanti di forza D,K e di portata del potenziale α del modello PB [Dau 93a] , infine era stato posto $G_0 = K\ R_0^2/2$.

nel modello a bastoncini rigidi

In questo capitolo mostreremo i risultati che si ottengono sul modello a bastoncini rigidi (capitolo 2) per la scelta delle costanti fatta attraverso lo studio della meccanica statistica del modello (capitolo 3) e dei modi di vibrazione a temperatura ambiente (capitolo 4): $K = 0.014\ eV/\text{Å}^2$, $D = 0.15\ eV$, $E = 0.74\ eV/\text{Å}^2$, $L = 7\text{Å}$, $H = 3\text{Å}$,$\Theta = \frac{2\pi}{10}$. Lo sviluppo intorno alle posizioni di riposo a temperatura nulla dà le equazioni del moto, nelle variabili adimensionali,:

$$\begin{aligned}
\ddot{y}_n &= (1+\frac{y_n}{R})\frac{1}{R}\dot{\phi}_n^2 - (y_n - \frac{3}{2}y_n^2 + \frac{7}{6}y_n^3) - E\,(2y_n - y_{n-1} - y_{n+1}) - K_{yy}(y_{n+1} + y_{n-1} + 2y_n)\\
&\quad -\frac{K_{y\phi}}{2}(\phi_{n+1} - \phi_{n-1}) \qquad (5.40)\\
\ddot{\phi}_n &= K_{\phi\phi}(\phi_{n+1} + \phi_{n-1} - 2\phi_n)
\end{aligned}$$

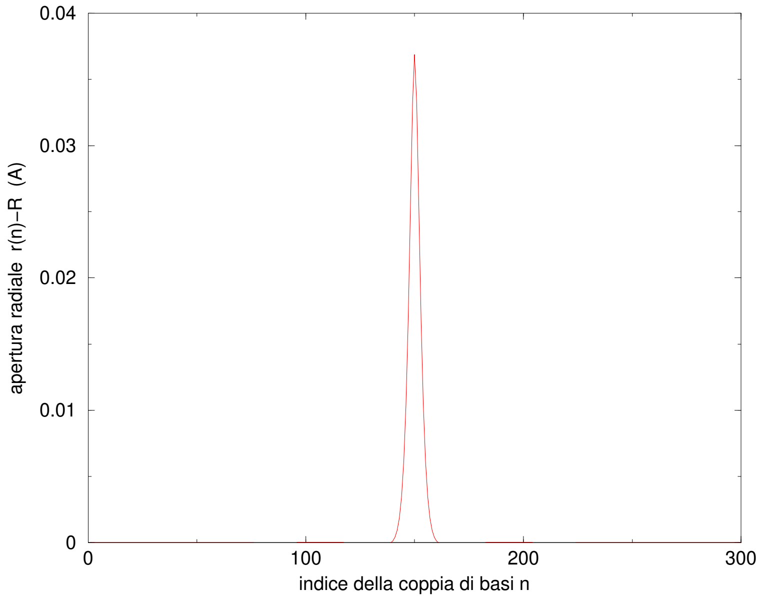

Figura 5.3: Breather radiale. I parametri utilizzati per ricavare questa soluzione sono $q = 0.1$, $\epsilon = 0.3$, $u_e = -0.1$, $u_c = 0.1$. L'ampiezza è di 0.037Å mentre la larghezza a mezza altezza è di 6 coppie di basi.

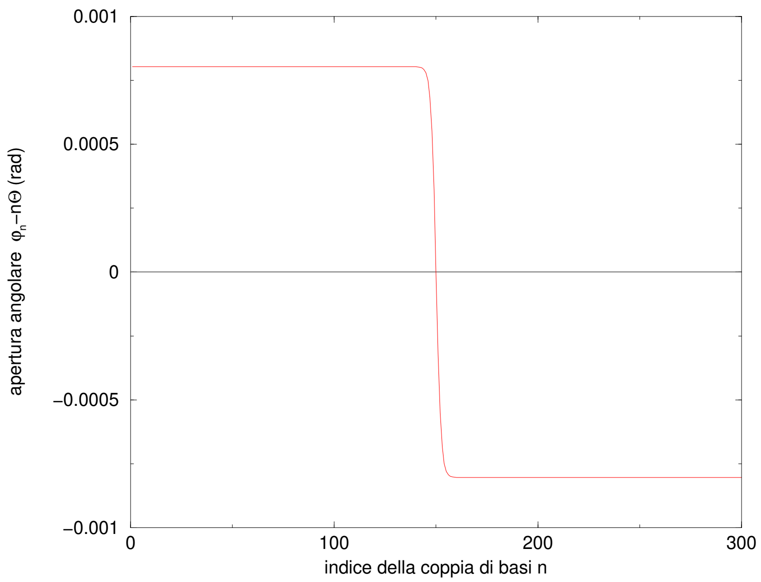

Figura 5.4: Kink angolare. I parametri utilizzati per ricavare questa soluzione sono $q = 0.1$, $\epsilon = 0.3$, $u_e = -0.1$, $u_c = 0.1$. L'ampiezza è di $8\,10^{-4} rad$ mentre l'apertura angolare è su 6 coppie di basi.

$$+\frac{K_{y\phi}}{2}(y_{n+1}-y_{n-1})-\frac{2}{R_0}\dot{y}_n\dot{\phi}_n-\frac{2}{R_0}y_n\ddot{\phi}_n-\frac{2}{R_0^2}y_n\dot{y}_n\dot{\phi}_n-\frac{1}{R_0^2}y_n^2\ddot{\phi}_n \tag{5.41}$$

dove

$$K_{yy} = (KR^2/H^2)(1-\cos\Theta)^2 \,, \tag{5.42}$$
$$K_{\phi\phi} = (KR^2/H^2)(\sin^2\Theta) \,, \tag{5.43}$$
$$K_{y\phi} = 2(KR^2/H^2)(\sin\Theta)(1-\cos\Theta). \tag{5.44}$$

Come si può vedere confrontando le (5.40,5.41) con le (8) e (9) in [Bar 99a], lo sviluppo del potenziale di scheletro V_b attorno alle posizioni di riposo a temperatura nulla, porta in realtà agli stessi termini nell'equazioni del moto, per il modello a bastoncini rigidi o elastici, a patto di rinormalizzare opportunamente la costante K.

5.5.1 Descrizione delle soluzioni

La forma delle soluzioni

In figura 5.3,5.4, sono mostrate le soluzioni ottenute per i parametri: $\epsilon = 0.3$, $u_e = -0.1$, $u_c = 0.1$, $q = 0.1$ (le soluzioni mostrate in figura 3 di [Bar 99a] sono molto simili) La principale caratteristica è quella che esse mostrano nella variabile radiale ed in quella angolare due tipi di eccitazioni non lineari differenti; esse si spostano insieme, nel tempo, lungo la catena, rimanendo stabili: nel raggio (figura 5.3) la soluzione è un breather, mentre nell' angolo (figura 5.4) la soluzione è un kink.

- Il breather di figura 5.3 riproduce l'apertura localizzata che si cercava: l'altezza è di $\simeq 0.04$ Å, mentre la larghezza a mezza altezza è circa di 6 coppie di basi, l'energia corrispondente a questa apertura è di $1.2\,k_BT$.

- Il kink di figura 5.4 corrisponde ad avere $\varphi_n - n\Theta = -8\;10^{-4} rad$ per tutte le coppie di basi n minori a quella dove inizia l'apertura radiale e $\varphi_n - n\Theta = 8\;10^{-4} rad$ per tutte le coppie di basi maggiori a quella dove finisce l'apertura radiale. All' apertura radiale corrisponde dunque una diminuzione dell'angolo di twist $\theta_n = \varphi_n - \varphi_{n-1} = 1.6\,10^{-3} rad$. Dal punto di vista matematico questo termine deriva dal fatto che la soluzione lineare dell'equazione del moto della variabile angolare ammette una costante additiva arbitraria chiamata σ_2 nella (22) di [Bar 99a]. Questo corrisponde a ruotare di un angolo costante arbitrario l'intero sistema. Il valore di σ_2 viene determinato agli ordini ϵ^2 ed ϵ^3 attraverso l'accoppiamento non lineare tra raggio e angolo che deriva dai termini cinetici espressi nelle variabili polari (vedi equazioni (29)). Esso risulta proporzionale (vedi (31) di [Bar 99a]) all'integrale del modulo dell'inviluppo del breather e dunque dà alla soluzione angolare la forma di kink.

5.5.2 L'evoluzione temporale delle soluzioni

La soluzione mostrata in fig 5.3 e 5.4 è stata integrata numericamente con un algoritmo Runge-Kutta. Essa si è dimostrata stabile per tempi dell'ordine dei nano secondi, inoltre

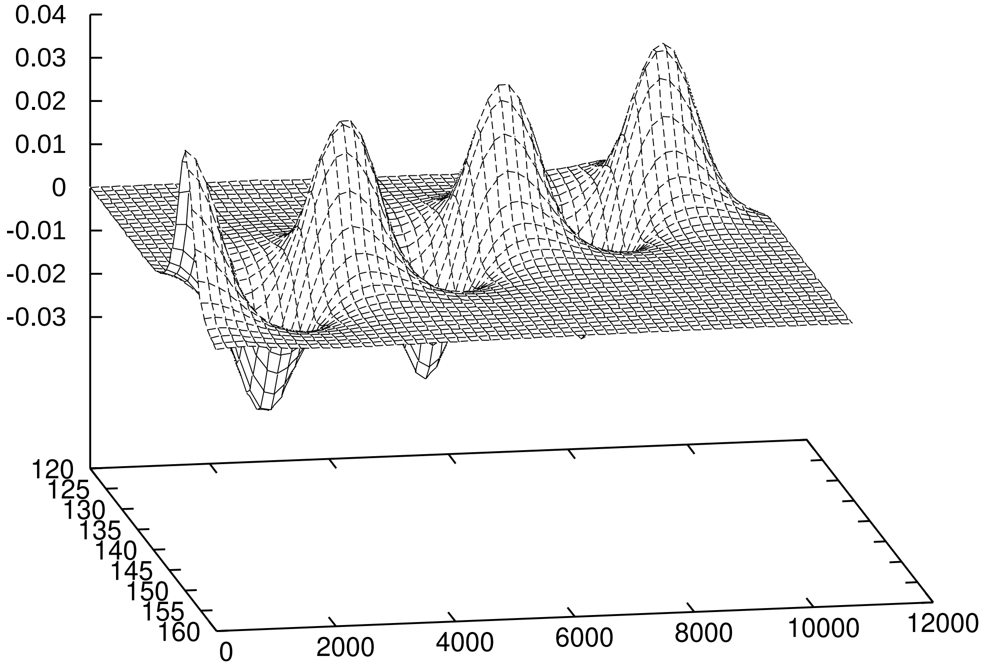

Figura 5.5: evoluzione temporale del breather radiale dato dalla soluzione di figura (4.3), sull'asse x è rappresentato l'indice della coppia di basi (ci siamo ristretti, per ottenere una rappresentazione migliore, all'intervallo in cui l'ampiezza della soluzione non è nulla $120 < n < 160$), sull'asse y è rappresentato il tempo in u.t. ($1u.t. = 1.02\ 10^{-14}s$), anche se tempi maggiori non sono mostrati abbiamo verificato la stabilità della soluzione fino a un tempo dell'ordine di $10^{-9}s$, sull'asse z è mostrata l'ampiezza della soluzione. Il breather si propaga lungo la catena ad una velocità di $0.2\ b.p./10^{-12}\ s$.

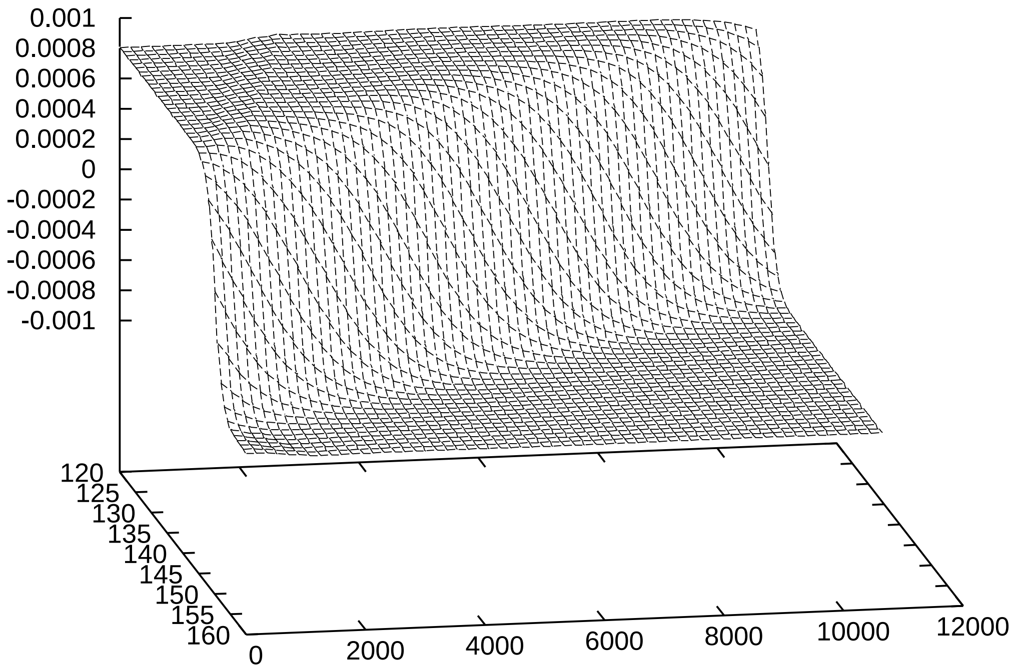

Figura 5.6: evoluzione temporale del kink angolare di figura (4.4), sull'asse x è rappresentato l'indice della coppia di basi (ci siamo ristretti, per ottenere una rappresentazione migliore, all'intervallo in cui l'ampiezza della soluzione non è nulla $120 < n < 160$), sull'asse y è rappresentato il tempo in u.t. ($1u.t. = 1.02\ 10^{-14}s$), anche se tempi maggiori non sono mostrati abbiamo verificato la stabilità della soluzione fino a un tempo dell'ordine di $10^{-9}s$, sull'asse z è mostrata l'ampiezza della soluzione. Il kink si propaga lungo la catena ad una velocità di $0.2\ b.p./10^{-12}\, s$.

essa si propaga lungo la catena con una velocità dell'ordine di $0.2 b.p./ps$ (b.p. sta per coppie di basi) vedi figure 5.5 e 5.6.

5.6 Conclusioni

La maggiore limitazione dell'analisi fatta in questo capitolo è nell' equazione del moto di partenza (vedi eq. (8) e (9) in [Bar 99a] e (5.40) (5.41)) : come visto nel capitolo precedente, non è sempre possibile trascurare l'interazione viscosa con l'acqua e modellizare il sistema con una dinamica Hamiltoniana; inoltre è stata fatto uno sviluppo attorno alle posizioni di riposo a temperatura nulla, ma la struttura dei modi lineari a temperatura finita è profondamente differente da quella a temperatura nulla. L'ampiezza della fluttuazione radiale delle soluzioni mostrate, dell'ordine di 0.04Å, è per un fattore 10 inferiore alla portata massima dell'interazione dovuta al legame idrogeno. Inoltre l'energia dell'ordine di $1k_BT$ per sei coppie di basi è molto minore dell'energia libera di denaturazione di una bolla di questa dimensione. Quindi queste soluzioni corrispondono a fluttuazioni delle coppie di basi nel legame idrogeno e non possono essere messe direttamente in relazione con il breathing del DNA: esso corrisponde a movimenti di maggiore ampiezza che comportano l'apertura delle coppie di basi. Bisogna sottolineare che le soluzioni trovate sono di piccola ampiezza per una limitazione insita nel metodo analitico analizzato. È stato suggerito da Peyrard e collaboratori che anche se i breathers sono di piccola ampiezza essi possono essere amplificati attraverso processi di collisione e intrappolamento generato dalla discretizzazione e dalla presenza di impurezze o disomogeneità lungo la catena [Dau 93b, Dau 93c, For 94, Ban 96, Tin 96].

Al di là dell'interesse biologico, il modello ha fornito comunque l' esempio di un sistema non-lineare che ha come base un reticolo vettoriale. Questo ha permesso lo sviluppo di un metodo generale per trovare soluzioni breathers in reticoli vettoriali, inoltre ha permesso di trovare soluzioni interessanti per l'accoppiamento di due tipi di soluzioni non-lineari: un breather ed un kink.

Nel modello a bastoncini rigidi poichè $K = 0.014 eV/\mathring{A}^2$, i modi lineari sono essenzialmente disaccoppiati e la branca acustica è legata al raggio e quella ottica all'angolo (vedi le relazioni di dispersione in figura 4.4). Tuttavia l'accoppiamento breather+kink trovato nel modello precedente (vedi figura 3 di [Bar 99a]) è riprodotto, da questo si deduce che l'accoppiamento importante per ottenere questo tipo particolare di soluzioni deriva dal termine non lineare cinetico.