Conclusioni

Il modello del DNA presentato in questa tesi è differente rispetto a quelli sviluppati per descrivere l'elasticità e le transizioni strutturali della molecola. Esso è infatti più microscopico rispetto alla famiglia della WLC in quanto le unità fondamentali sono le coppie di basi. L'indice di numerazione di esse $n = 1, \dots N$ equivale alla rappresentazione discreta dell'ascissa curvilinea s. Ciò nonostante esso rimane un modello mesoscopico nel senso che non raggiunge il livello di dettaglio atomico. Tuttavia il buon accordo tra i risultati teorici e quelli sperimentali conferma che non è sempre necessaria una descrizione completa e dettagliata di un sistema per comprenderne le proprietà globali.

Finora non abbiamo incluso la possibilità di esercitare una forza di tensione sulla molecola, infatti nel modello l'asse della molecola è dritto e inestensibile. Di conseguenza esso può rappresentare solo un punto nella curva forza estensione: il valore della forza alla quale la molecola appare dritta ma mantiene la sua lunghezza naturale. Sarebbe tuttavia molto interessante e piuttosto diretto inserire una forza di tensione sull'asse della molecola. In questo caso, come nel modello della WLC estensibile, l'elongazione dell'asse a forze $10\,pN < F < 65\,pN$ sarebbe direttamente legata al modulo di elasticità intrinseco della molecola.

Il modello potrebbe essere arricchito inserendo al posto del potenziale quadratico nell' estensione dell'asse molecolare h_n:

$$V_b(h_n) = K\,(h_n - H)^2, \tag{5.45}$$

un potenziale anarmonico, come ad esempio il potenziale di Morse usato per descrivere i legami idrogeno (vedi figura 2.2). Si potrebbe così studiare la transizione alla forma S che appare per forze di tensioni $F \simeq 65pN$ ed arricchire il diagramma di fase, finora limitato alle due fasi DNA B DNA d, alle tre fasi DNA B- DNA S- DNA d. Tale miglioramento del modello è stato già discusso nelle conclusioni del terzo capitolo in relazione al fatto che le fluttuazioni dell'asse dell'elica risultano più grandi di quelle osservate sperimentalmente con la diffusione di neutroni.

Il modello inoltre descrive una sequenza omogenea. Come già discusso alla fine del capitolo 4 l'introduzione del disordine dovuto alla sequenza permetterebbe il confronto della densità dei modi con lo spettro Raman, ottenuto da Urabe *et al.*, anche a temperature $50^oC < T < 80^oC$ ovvero nel regime in cui si osserva la denaturazione multifasica per una sequenza eterogenea. Per diversificare la sequenza basterebbe inserire due differenti valori, relativi alle coppie AT o GC, per la costante di forza (D) del legame idrogeno. Inoltre questo sarebbe un passo preliminare per lo studio dei fenomeni di formazione di bolle di denaturazione in regioni specifiche della sequenza.

In effetti non è necessaria una sequenza eterogenea per avere delle bolle di denaturazione. Le fluttuazioni termiche sono sufficienti a ciò anche per una sequenza ripetuta. L'approccio di meccanica statistica d'equilibrio permette di affrontare questo problema, infatti esso può fornire le barriere di energia libera ΔF che sono in gioco nei processi di attivazione. L'esistenza di stati quasi legati nel potenziale di Morse osservata nel capitolo 3 testimonia la presenza di queste barriere di attivazione. Per calcolare il valore di ΔF degli sforzi teorici supplementari sono comunque necessari. Una volta elaborato un approccio per lo studio delle barriere di attivazione sarebbe interessante completare il diagramma di fase DNA B-DNA S- DNA d studiando le fluttuazioni tra le differenti fasi e le barriere per passare da una all'altra.

L'altra prospettiva aperta è lo studio dell'interazione con le proteine con lo scopo di modellizzare le nuove esperienze di micromanipolazione. Naturalmente questo comporta l'introduzione di una difficoltà aggiuntiva: si tratta di studiare proprietà di non equilibrio del sistema che rischiano di porre dei problemi concettuali e tecnici molto difficili da risolvere.