RIASSUNTO

In questa tesi si presenta un modello molto semplice del DNA. Esso rappresenta la doppia elica di Watson e Crick con tre variabili per ciascuna coppia di basi che ne forniscono l'altezza lungo l'asse, il raggio,e l'angolo di rotazione elicoidale.

Le soluzioni della dinamica non lineare del modello a temperatura nulla sono delle aperture localizzate lungo la doppia elica alle quali si accompagna uno srotolamento locale.

Abbiamo anche sviluppato un approccio teorico per studiare grazie al modello i modi collettivi di vibrazione radiale, torsionale ed assiale di una molecola di DNA in soluzione a temperatura ambiente. I risultati ottenuti, in particolare lo spettro, le relazioni di dispersione e la lunghezza di coerenza dei modi sono in accordo con i dati di spettroscopia Raman e sono anche paragonati con esperimenti di diffusione di neutroni.

La meccanica statistica del modello, grazie al metodo dell'integrale di trasferimento, permette inoltre di studiare la transizione di denaturazione. Quest'ultima è descritta come una transizione di fase del primo ordine che può essere indotta oltre che da un aumento della temperatura T della soluzione anche da una coppia di torsione Γ applicata su un estremo della molecola, quando l'altro estremo è mantenuto fisso. La regione di coesistenza tra la fase del DNA B e la fase del DNA d (denaturato) viene naturalmente parametrizzata con il grado di superavvolgimento σ. I risultati teorici che si ottengono sono ad esempio il grado di srotolamento della doppia elica con la temperatura, l'energia libera di denaturazione, il diagramma di fase nel piano $T,\ \Gamma$ e le isoterme nel piano $\sigma,\ \Gamma$. Essi sono in buon accordo con i dati sperimentali che derivano da metodi classici come l' elettroforesi su gel, la spettroscopia UV, o misure calorimetriche e con i nuovi metodi di micromanipolazione su una singola molecola da DNA.

RESUME

Dans cette thèse un modèle très simple de l'ADN est introduit. Il décrit la double hélice de Watson et Crick avec trois variables par paire de bases qui correspondent à la hauteur le long de l'axe, le rayon et l'angle de rotation helicoïdale.

Les solutions de la dynamique non linéaire du modèle à température nulle sont des ouverture localisées le long de la double hélice couplées avec un déroulement local.

On a aussi développé une approche théorique pour étudier grace au modèle les modes collectifs des vibrations radiales, axiales et torsionelles d'une molécule d'ADN en solution et à température ambiante. Les résultats obtenus, en particulier le spectre, les relations de dispersion et la longueur de cohérence des modes sont en accord avec les données de spectroscopie Raman et sont aussi comparés avec des expériences de diffusion de neutrons.

La mécanique statistique du modèle, grâce à la méthode de la matrice de transfert, permet d'étudier la transition de dénaturation. Cette dernière est décrite comme une transition de phase du premier ordre qui peut être induite par une augmentation de la température T de la solution ou par un couple de torsion Γ appliqué à un bout de la molécule, en tenant l'autre extrémité fixe. La région de coexistence entre la phase fermée ADN B et la phase ouverte ADN d est paramétrisée de manière naturelle par le degré de déroulement σ. Les résultats théoriques que l'on obtient sont par exemple le déroulement de la double hélice avec la température, l'énergie libre de dénaturation, le diagramme de phase dans le plan $T,\ \Gamma$, et les isothermes dans le plan σ, Γ. Ces résultats sont en bon accord avec les données expérimentales obtenues par des méthodes classiques comme l'électrophorèse sur gel, la spectroscopie UV, les mesures calorimétriques et des nouvelles méthodes de micromanipulation sur une seule molécule d'ADN.