



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO  
FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE

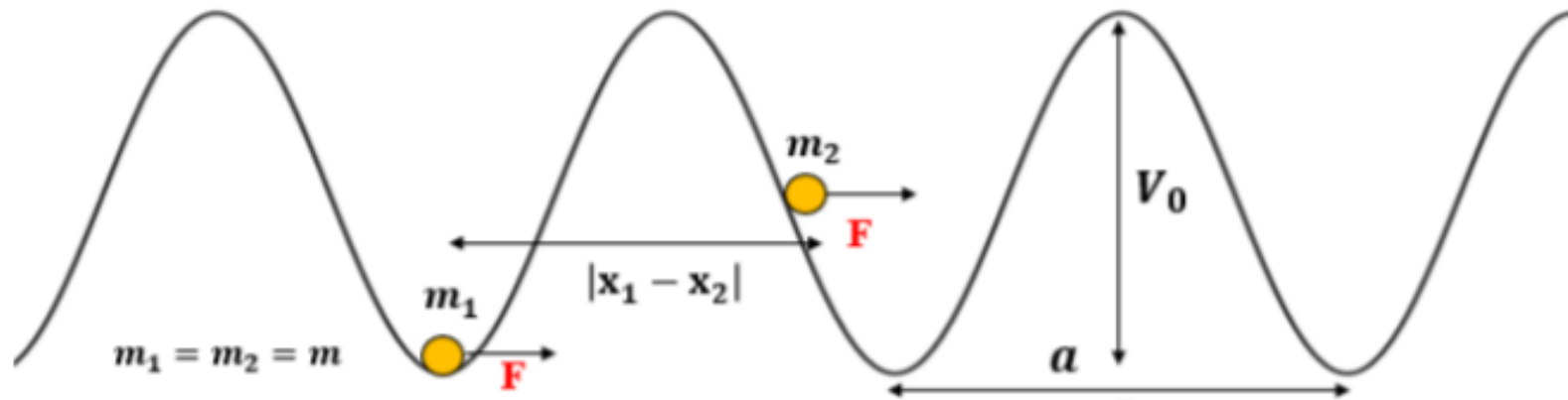
# Dynamical Resonances in a Bistable Molecular Model

Alessandro Rizzi

Relatore: Prof. Nicola Manini  
Correlatore: Prof. Luciano Reatto

Laurea Triennale in Fisica - 6 Ottobre 2021

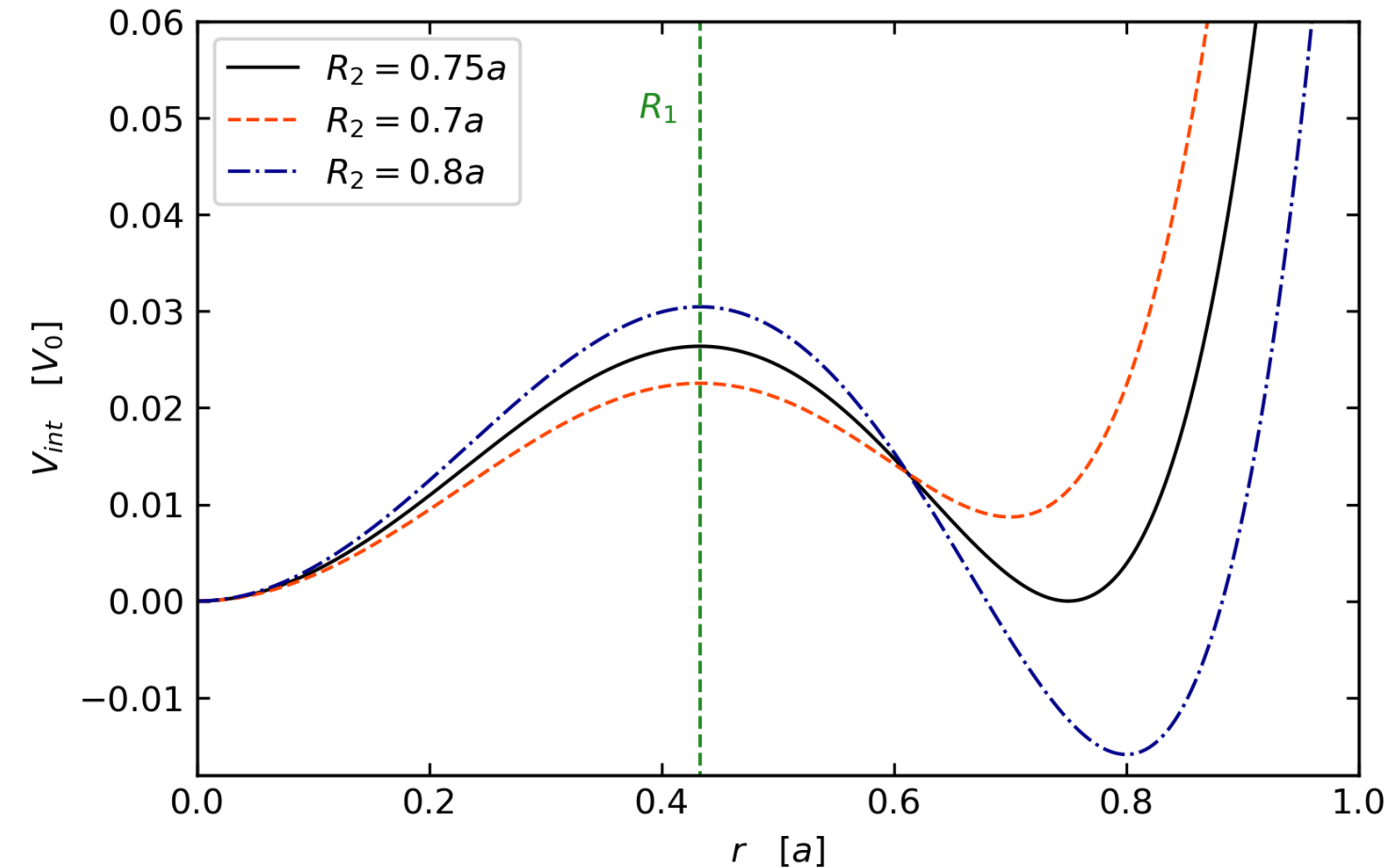
# Introduzione



- Dimero monoatomico bistabile
- Corrugazione periodica
- Moto in 1 dimensione
- Forza esterna costante
- Dissipazione viscosa
- Macromolecole biologiche bistabili
- Attrito statico già studiato da G. Cavallini
- Osservazione di oscillazioni peculiari del moto interno molecolare in regime di avanzamento costante

# Il Modello

# Il potenziale molecolare bistabile



$R_1$ : massimo locale

$R_2$ : secondo minimo

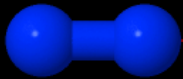
$U$ : prefattore

$$\delta = V_{\text{int}}(R_1) - V_{\text{int}}(R_2)$$

$$V_{\text{int}}(r) = f(\zeta = r^2) = U \left[ \zeta^3 - \frac{3}{2}(R_1^2 + R_2^2)\zeta^2 + 3R_1^2 R_2^2 \zeta \right]$$

# Le equazioni del moto

$$H = \sum_{i=1}^2 \left( \frac{p_i^2}{2m} + V_{\text{ext}}(x_i) - Fx_i \right) + V_{\text{int}}(|x_2 - x_1|)$$



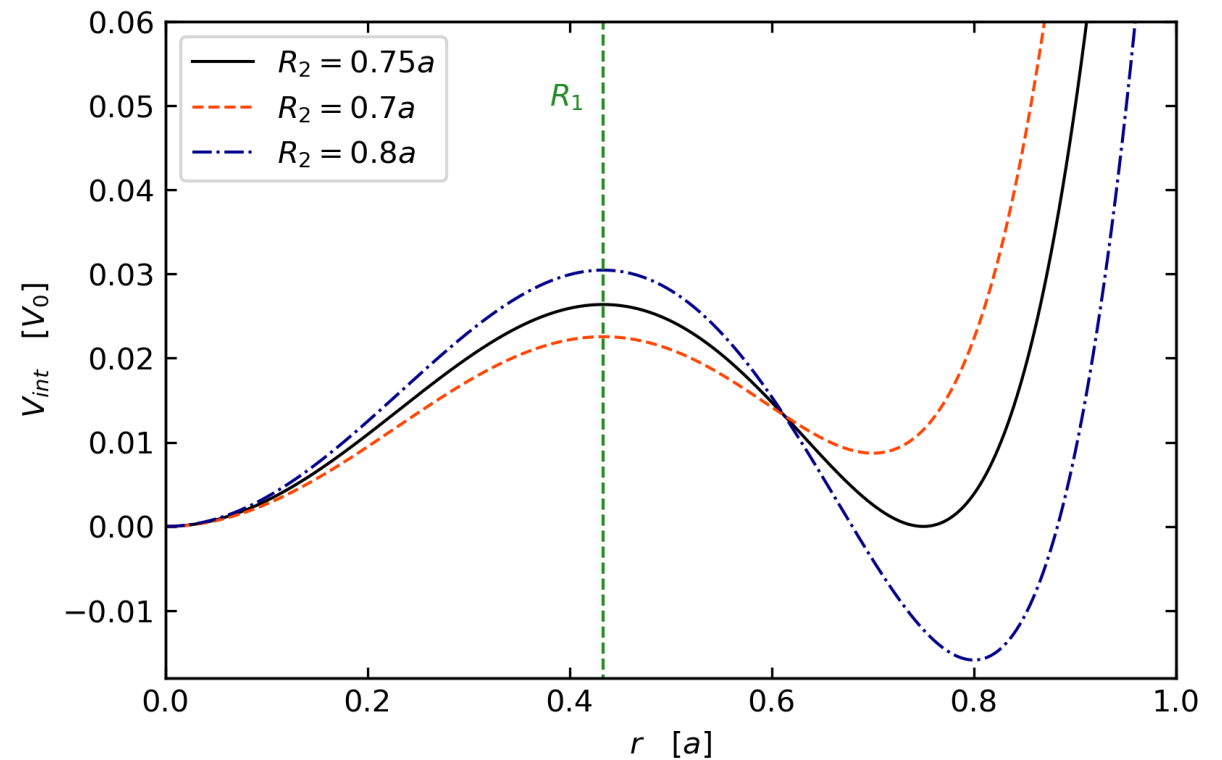
$$\ddot{x}_1 = F + \dots - m\gamma\dot{x}_1$$

$$\ddot{x}_2 = F + \dots - m\gamma\dot{x}_2$$

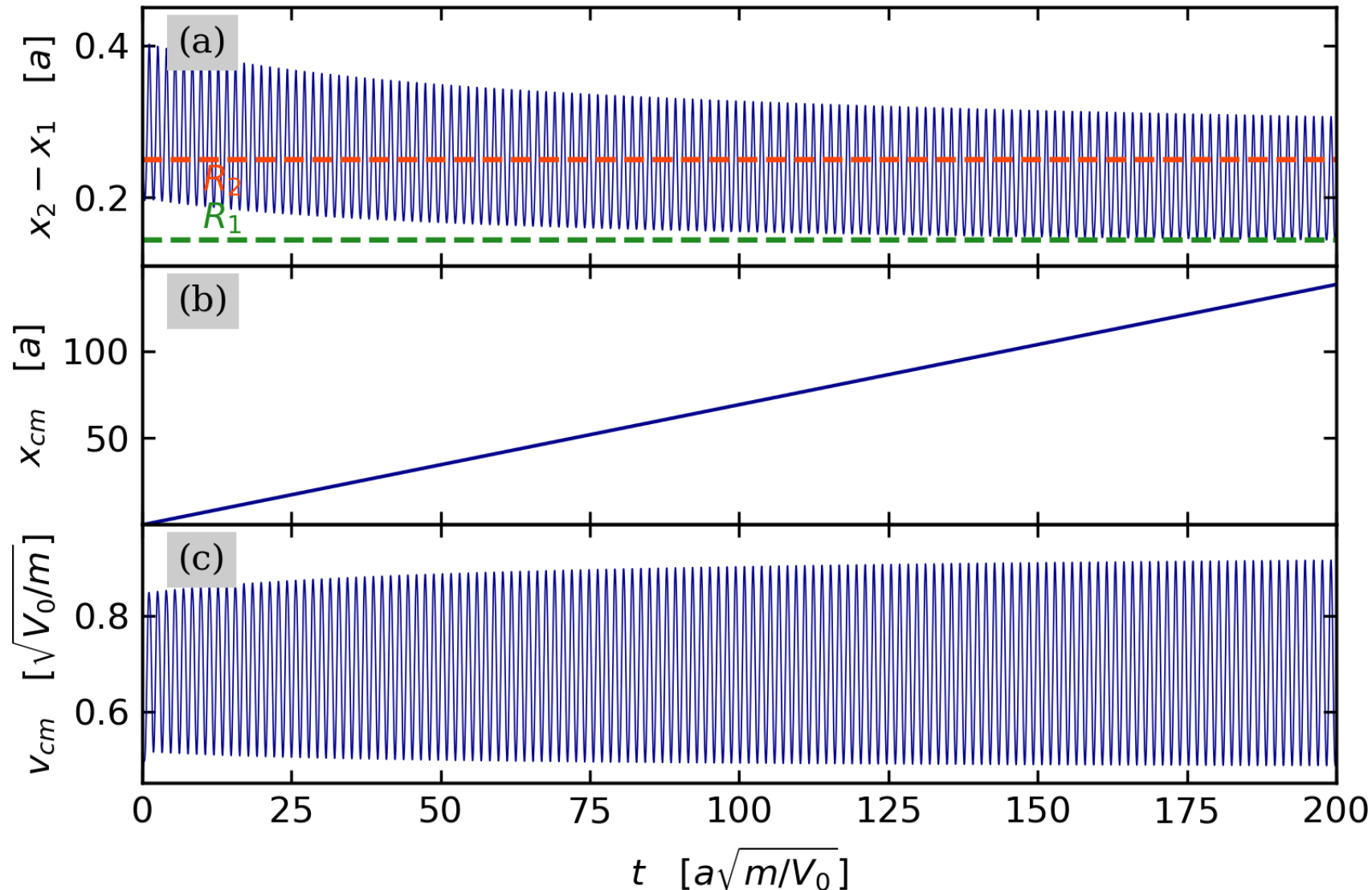


$$\mu\ddot{r} = \overbrace{-\frac{V_0\pi}{a} \cos\left(\frac{2\pi x_{\text{cm}}}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi r}{a}\right)}^{F_{\text{dri}}^{\text{eff}}} - V'_{\text{int}}(r) - 2\gamma\mu\dot{r}$$

# Oscillazioni coprenti massimo e minimo

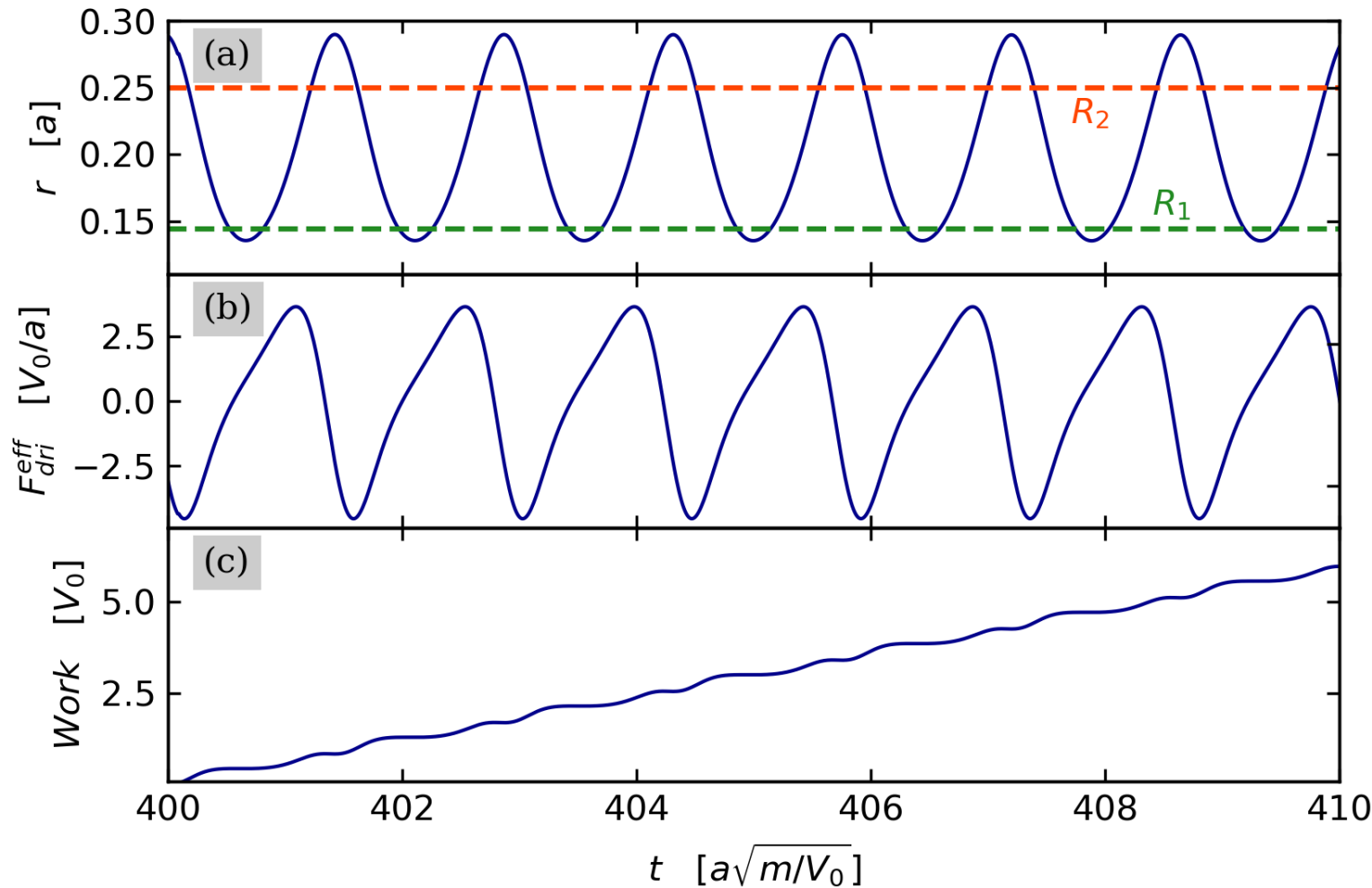


# Esempio di oscillazione



Minimo  $R_1 = \frac{\sqrt{3}}{12} a$   
 Massimo  $R_2 = \frac{1}{4} a$   
 Forza  $F = 7.5 \frac{V_0}{a}$   
 Viscosità  $\gamma = 10 \frac{1}{a} \sqrt{\frac{V_0}{m}}$   
 Prefattore  $U = 1 \frac{V_0}{a^6}$   
 Barriera  $\delta = 3.6 \times 10^{-5} V_0$

# La Effective Driving Force $F_{\text{dri}}^{\text{eff}}$



- Stessa frequenza del moto, la washboard frequency
- In ritardo rispetto a  $r$
- Lavoro monotonamente crescente





# La Effective Driving Force $F_{\text{dri}}^{\text{eff}}$

$$F_{\text{dri}}^{\text{eff}} := -\frac{2V_0\pi}{a} \underbrace{\cos\left(\frac{2\pi x_{\text{cm}}}{a}\right)}_{\text{Termine propriamente oscillatorio}} \underbrace{\sin\left(\frac{\pi r}{a}\right)}_{\text{Assume solo un certo range di valori}}$$

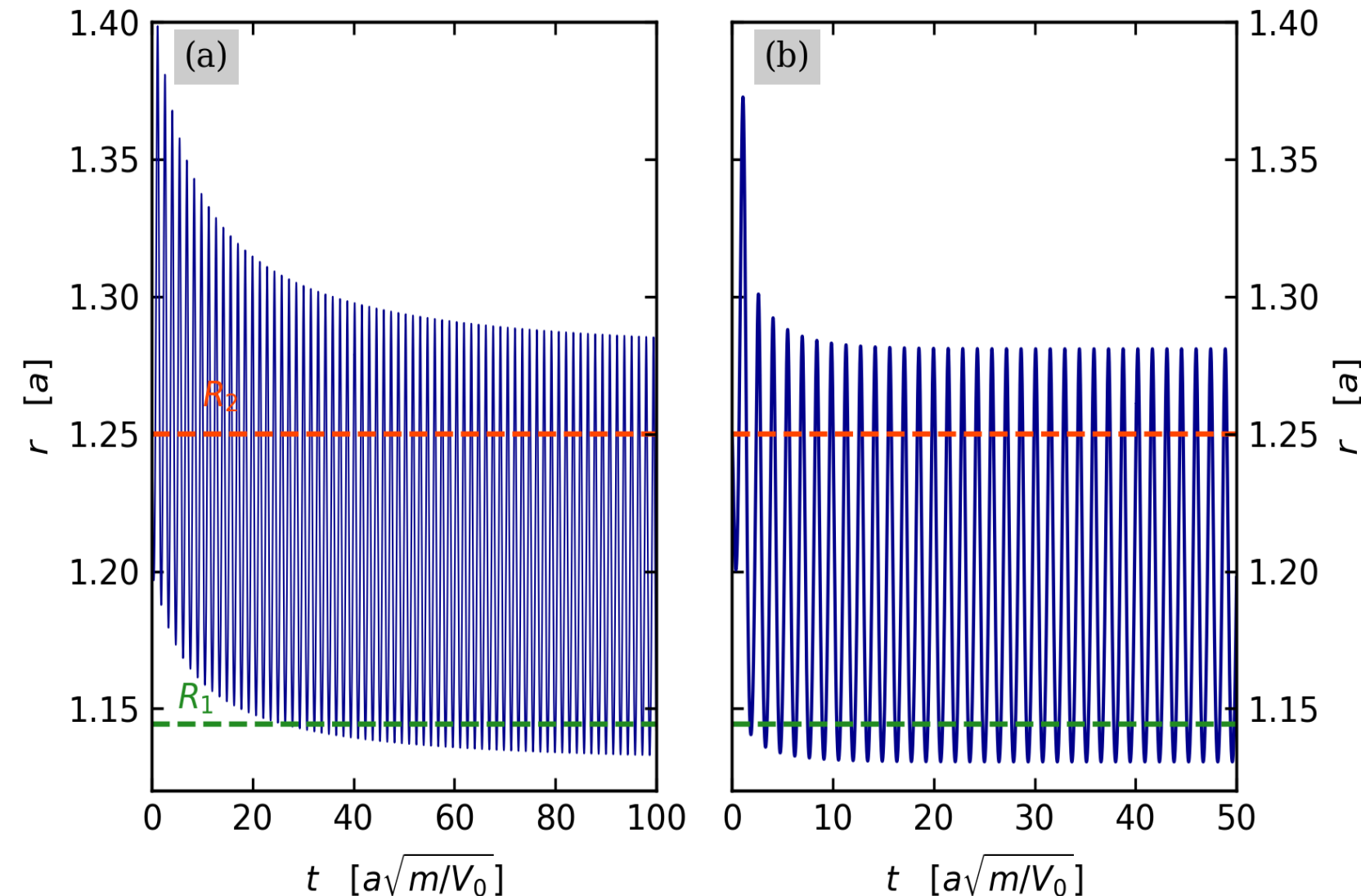
Termine propriamente  
oscillatorio

Assume solo un certo  
range di valori

Ipotesi:

$\sin\left(\frac{\pi r}{a}\right)$  non deve cambiare segno  
durante l'oscillazione

# Valori sempre negativi di $\sin\left(\frac{\pi r}{a}\right)$



Minimo  $R_1 = 1.14434a$

Massimo  $R_2 = \frac{5}{4}a$

Forza  $F = 7.5 \frac{V_0}{a}$

Viscosità  $\gamma = 10 \frac{1}{a} \sqrt{\frac{V_0}{m}}$

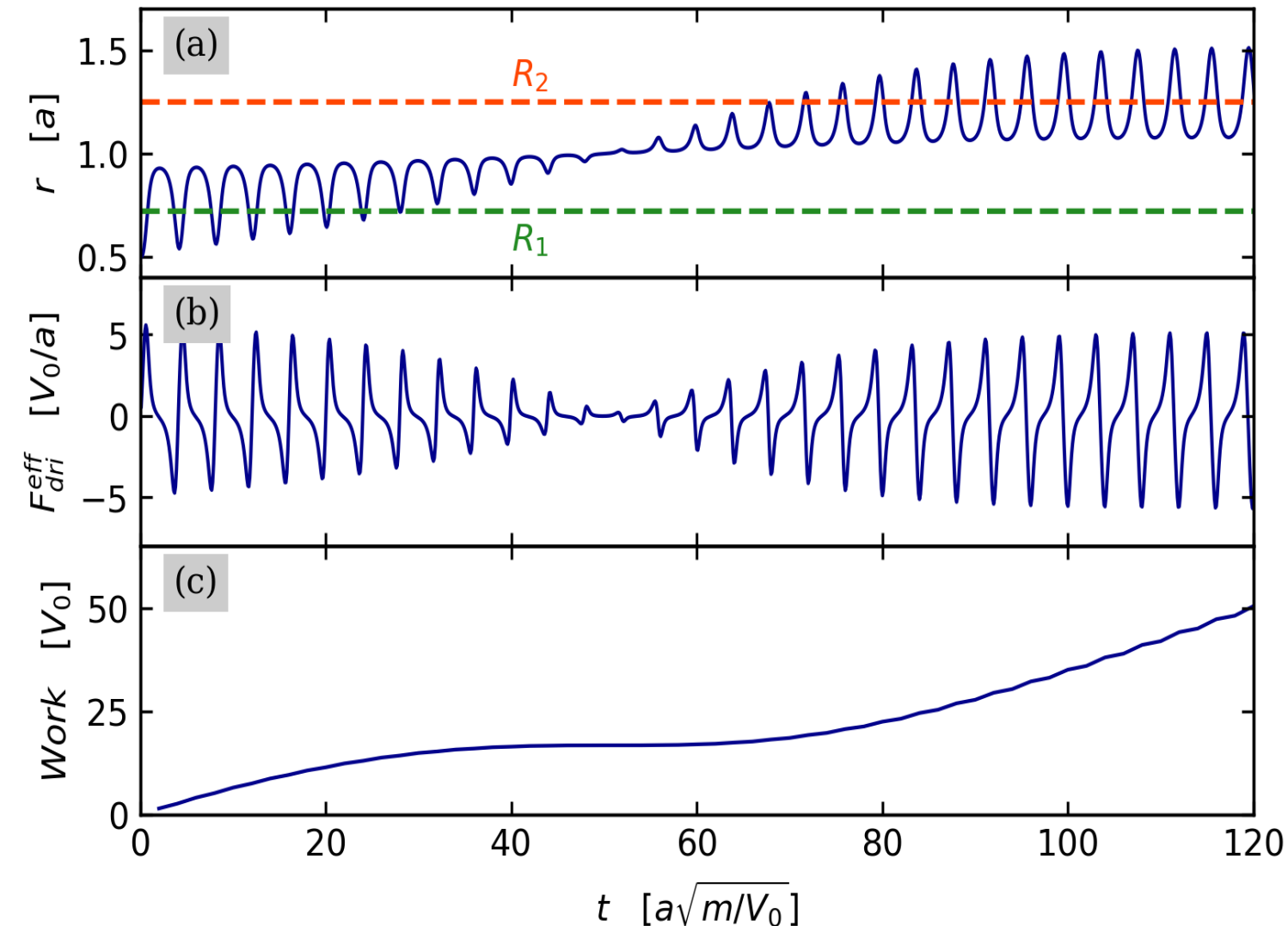
(a) Prefattore  $U = 0.1 \frac{V_0}{a^6}$

Barriera  $\delta = 8.1 \times 10^{-4} V_0$

(b) Prefattore  $U = 1 \frac{V_0}{a^6}$

Barriera  $\delta = 8.1 \times 10^{-3} V_0$

# Cambio segno di $\sin\left(\frac{\pi r}{a}\right)$



$$\text{Minimo } R_1 = \frac{5\sqrt{3}}{12}a$$

$$\text{Massimo } R_2 = \frac{5}{4}a$$

$$\text{Forza } F = 4 \frac{V_0}{a}$$

$$\text{Viscosità } \gamma = 10 \frac{1}{a} \sqrt{\frac{V_0}{m}}$$

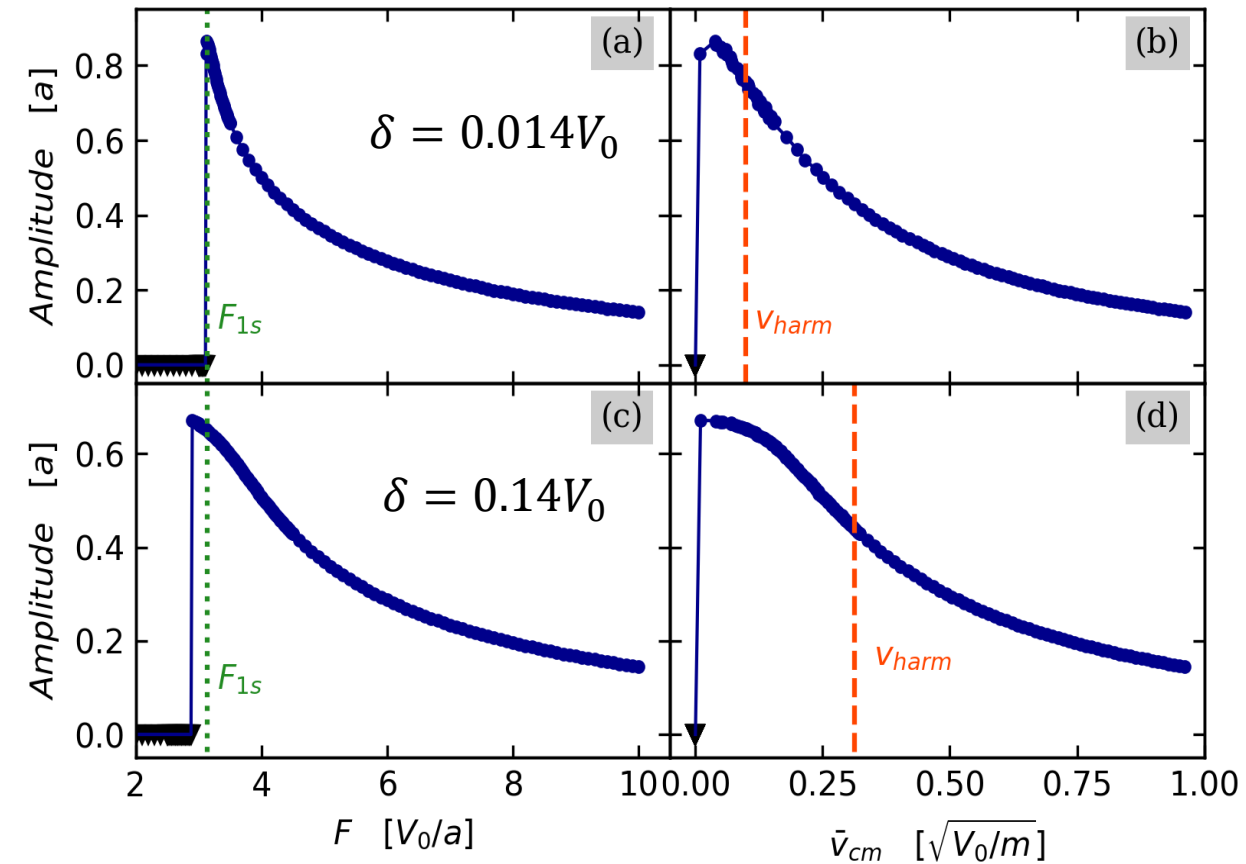
$$\text{Prefattore } U = 0.01 \frac{V_0}{a^6}$$

$$\text{Barriera } \delta = 5.7 \times 10^{-3} V_0$$

$$R_1 < a < R_2$$

# Risonanze al variare della velocità

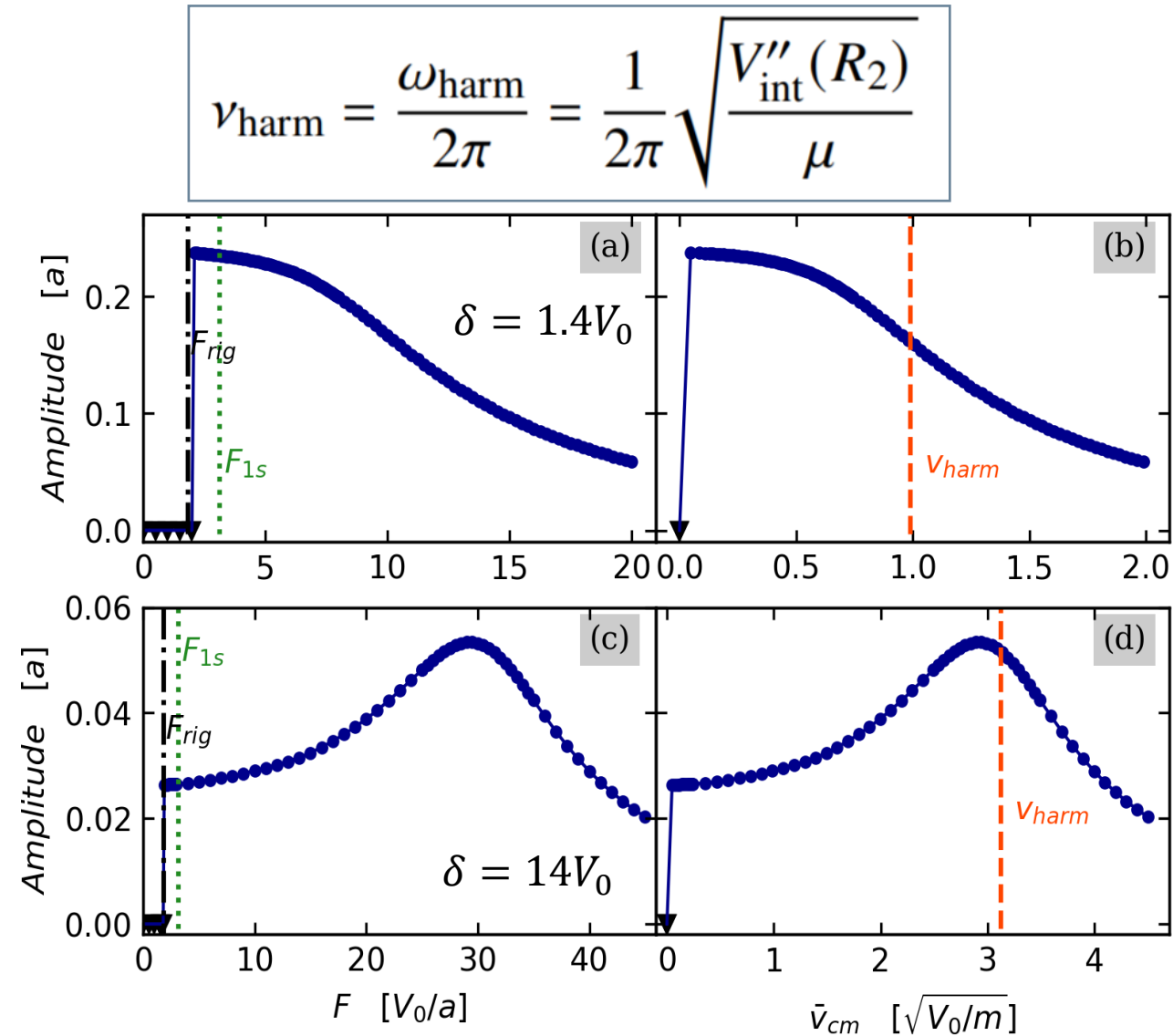
# Risonanze



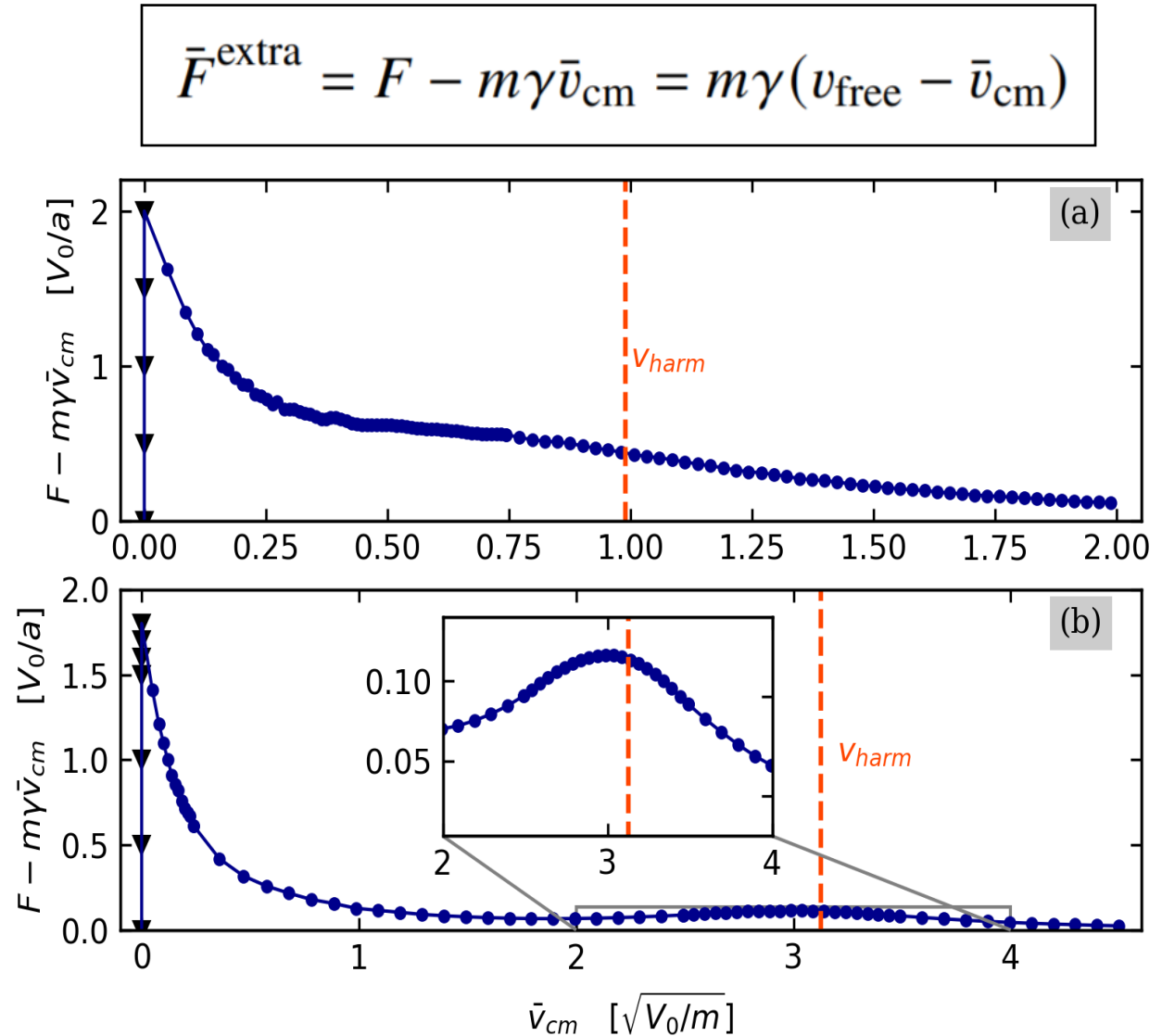
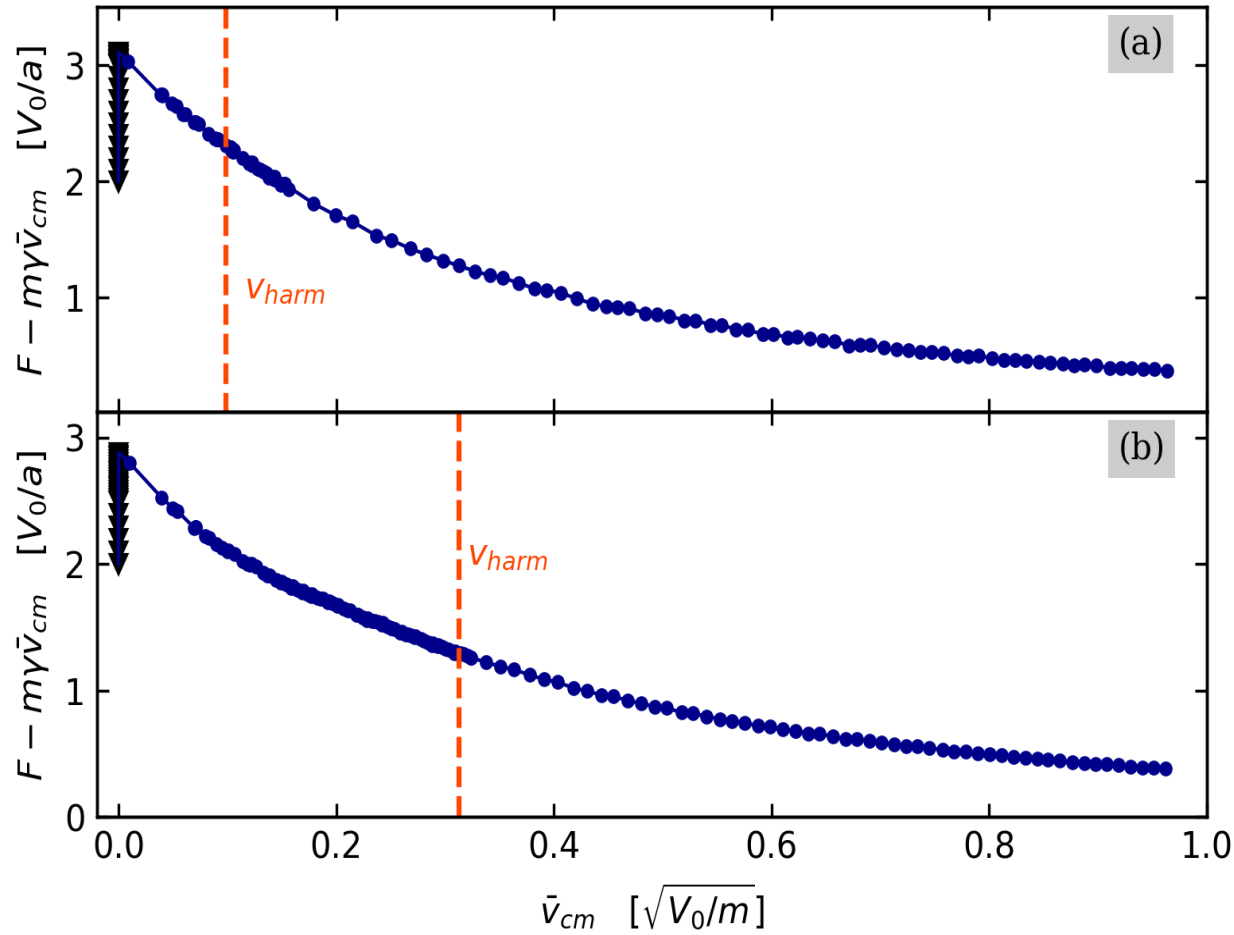
$$R_1 = 1.144, R_2 = \frac{5}{4}a$$

$$\gamma = 10 \frac{1}{a} \sqrt{\frac{V_0}{m}}$$

$\delta$  aumenta



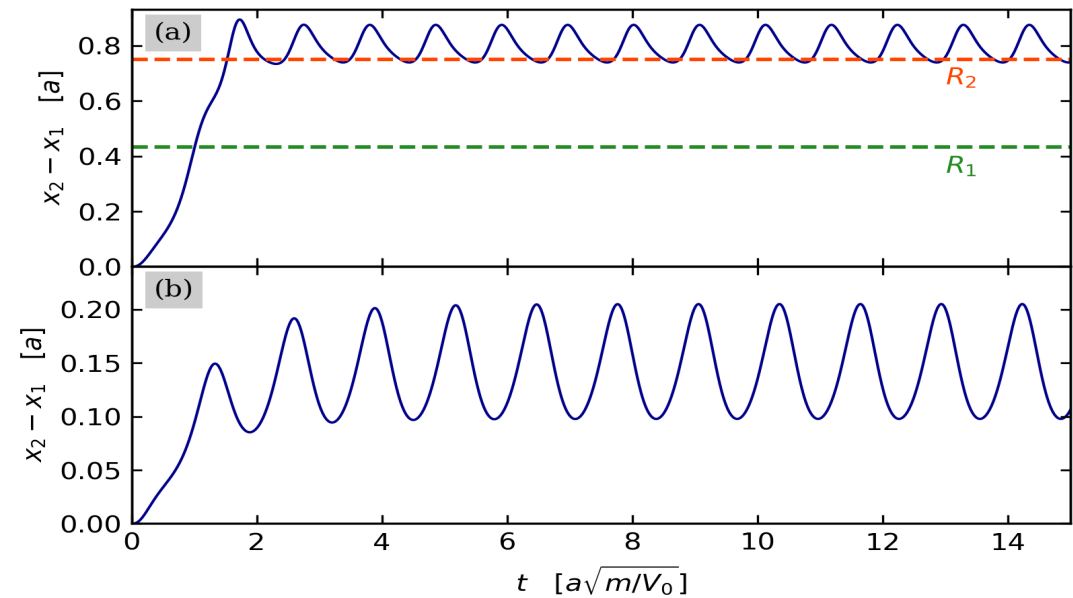
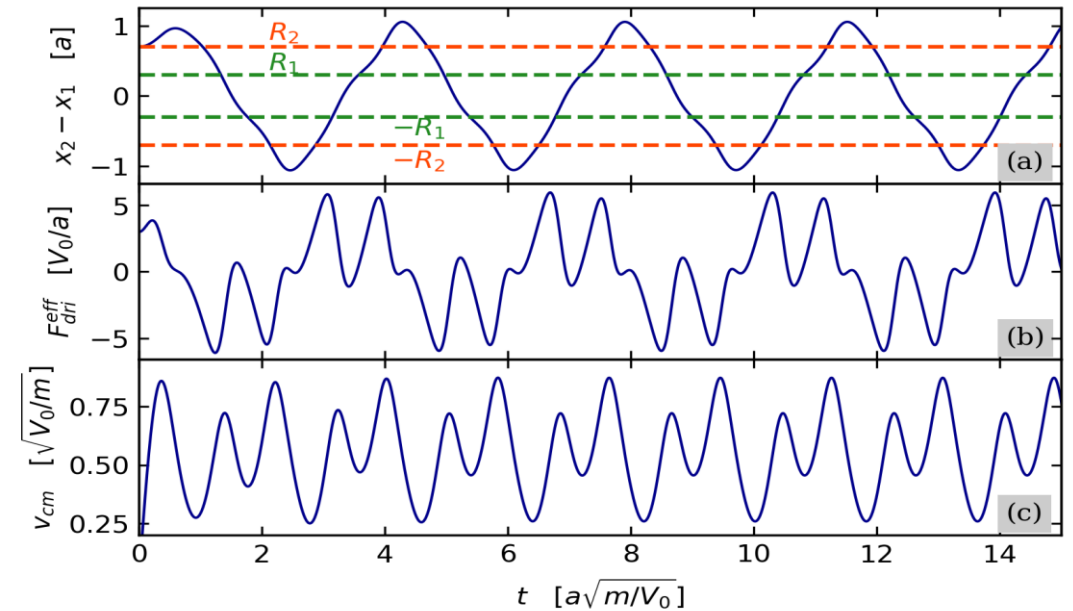
# Extra Attrito



$$\bar{F}^{\text{extra}} = F - m\gamma\bar{v}_{cm} = m\gamma(v_{\text{free}} - \bar{v}_{cm})$$

Studiati anche:

- › Caso sottosmorzato
- › Diversi  $\gamma$  per le due particelle



# Discussione e Conclusioni

Possibili sviluppi futuri:

- › Effetti di una temperatura finita
- › Diverse masse per le particelle
- › Modello bidimensionale

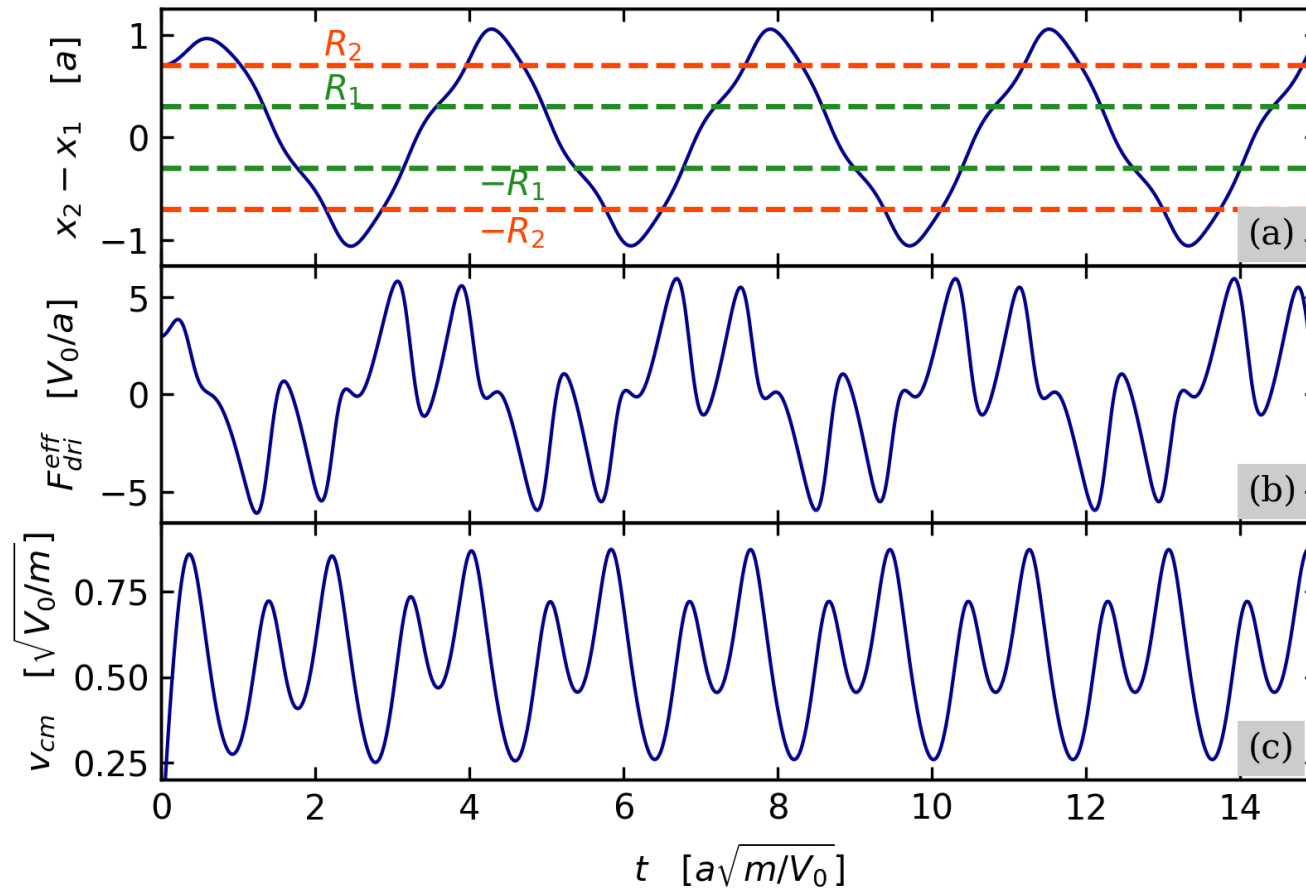
Possibili applicazioni:

- › Macromolecole biologiche (proteine o DNA)



Grazie per l'ascolto

# Caso sottosmorzato



Minimo  $R_1 = 0.3a$

Massimo  $R_2 = 0.7a$

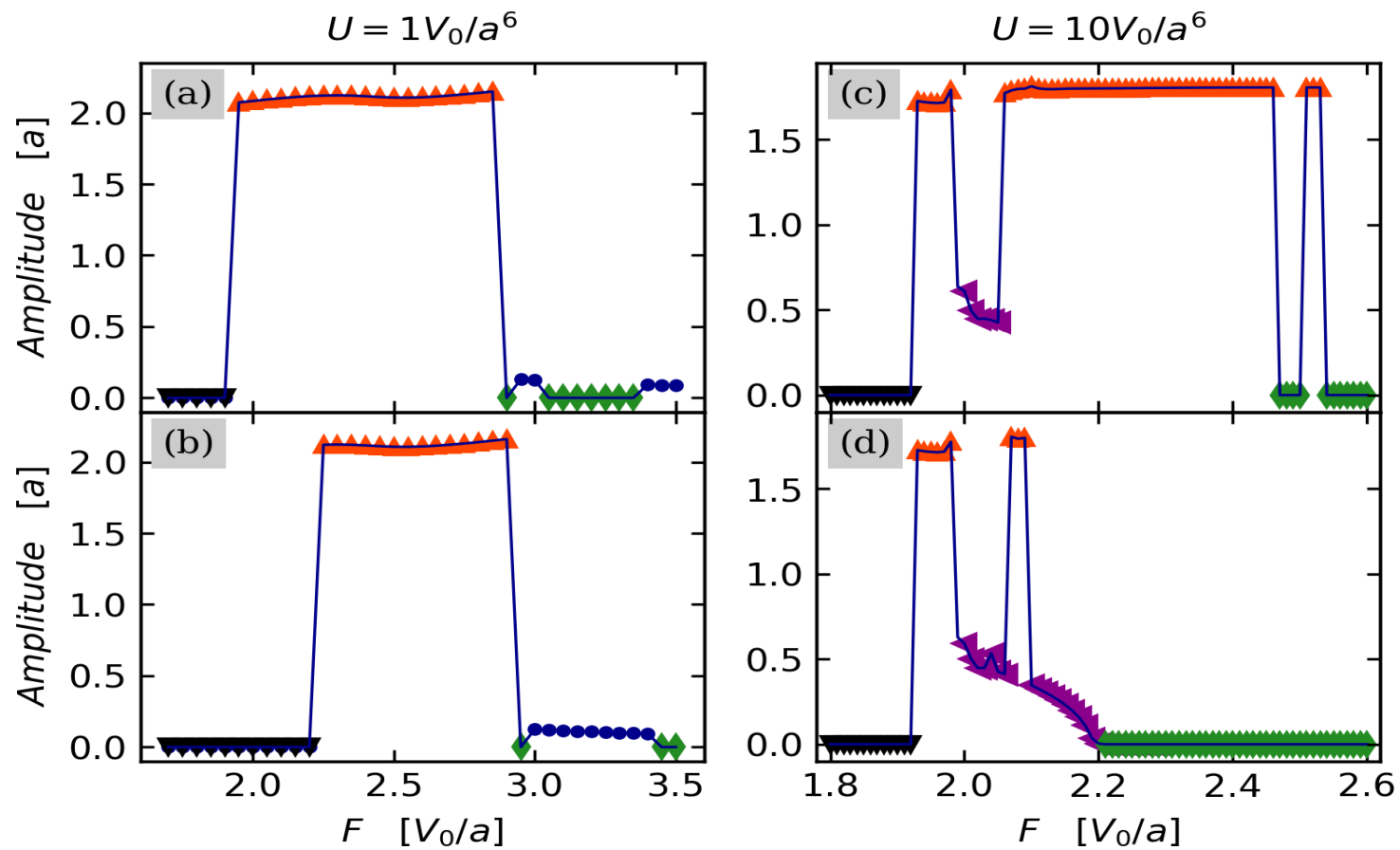
Forza  $F = 2.6 \frac{V_0}{a}$

Viscosità  $\gamma = 2 \frac{1}{a} \sqrt{\frac{V_0}{m}}$

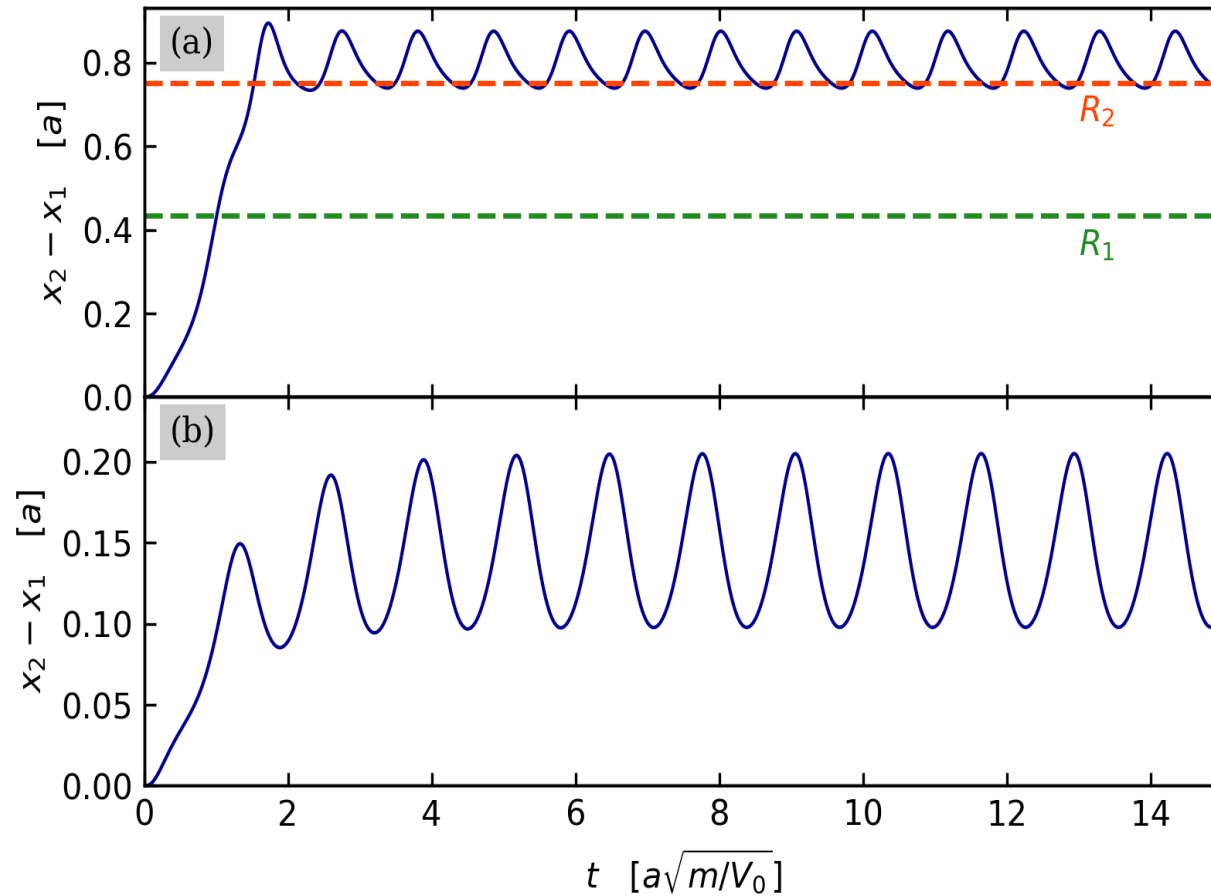
Prefattore  $U = 1 \frac{V_0}{a^6}$

Barriera  $\delta = 3.2 \times 10^{-2} V_0$

# Caso sottosmorzato



# Diversi $\gamma$



$$\text{Minimo } R_1 = \frac{\sqrt{3}}{4} a$$

$$\text{Massimo } R_2 = \frac{3}{4} a$$

$$\text{Forza } F = 7.5 \frac{V_0}{a}$$

$$\text{Prefattore } U = 10 \frac{V_0}{a^6}$$

$$\text{Barriera } \delta = 0.26 V_0$$

$$\text{Viscosità } \gamma_1 = 10 \frac{1}{a} \sqrt{\frac{V_0}{m}}$$

$$(a): \gamma_2 = 0.5 \gamma_1$$

$$(b): \gamma_2 = 0.8 \gamma_1$$

# Sistema di unità naturali

Physical quantities	Model units
length	$a$
mass	$m$
energy	$V_0$
time	$a\sqrt{\frac{m}{V_0}}$
frequency and viscosity $\gamma$	$\frac{1}{a}\sqrt{\frac{V_0}{m}}$
force	$\frac{V_0}{a}$
velocity	$\sqrt{\frac{V_0}{m}}$
potential prefactor $U$	$\frac{V_0}{a^6}$

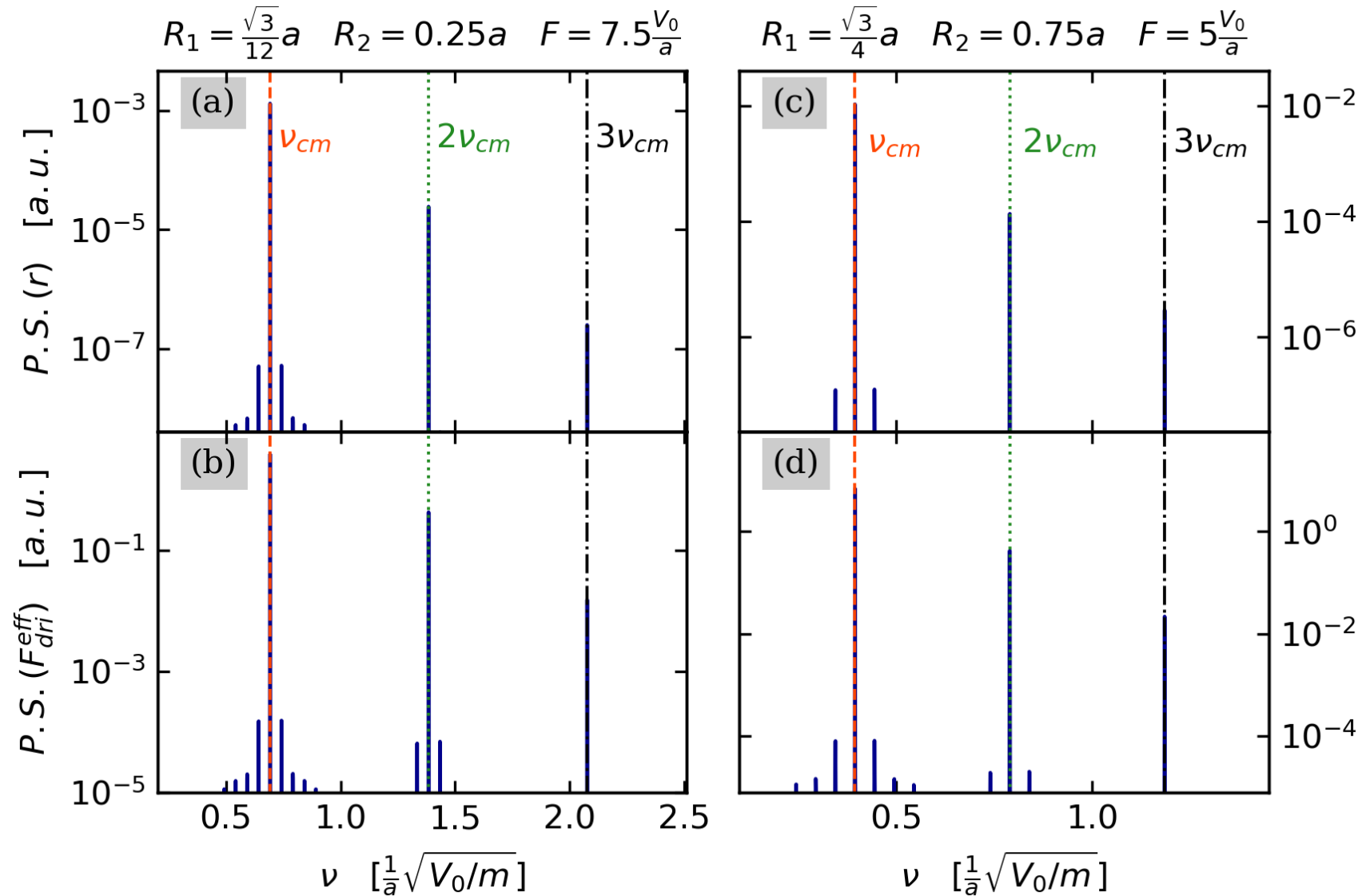
## Equazioni del moto

$$m\ddot{x}_1 = F - \frac{V_0\pi}{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) + V'_{\text{int}}(r) - m\gamma\dot{x}_1$$

$$m\ddot{x}_2 = F - \frac{V_0\pi}{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right) - V'_{\text{int}}(r) - m\gamma\dot{x}_2$$

$$V'_{\text{int}}(r) = U \left[ 6 (x_2 - x_1)^5 - 6 (x_2 - x_1)^3 (R_1^2 + R_2^2) + 6 (x_2 - x_1) R_1^2 R_2^2 \right]$$

# Spettro di Potenza



# Metodo di integrazione RKF45

- › Migliora il tradizionale RK al quarto ordine
- › Passo di integrazione adattivo
- › Consente di ottenere la precisione desiderata ottimizzando lo sforzo computazionale