



*Coloquios en la
Facultad de Física*

*Excitaciones localizadas en sólidos y biomoléculas.
Hacia nuevos avances en biología y tecnología*

Jesús Cuevas Maraver
Faustino Palmero Acebedo
Juan F. Rodríguez Archilla

Grupo de Física No Lineal

Sevilla, 2 de mayo de 2006



Esquema del coloquio

1. Breathers. Definición. Aplicaciones en biología y óptica no lineal (Jesús Cuevas)
2. Breathers cuánticos (Faustino Palmero)
3. Breathers en cristales (Juan Rodríguez Archilla)

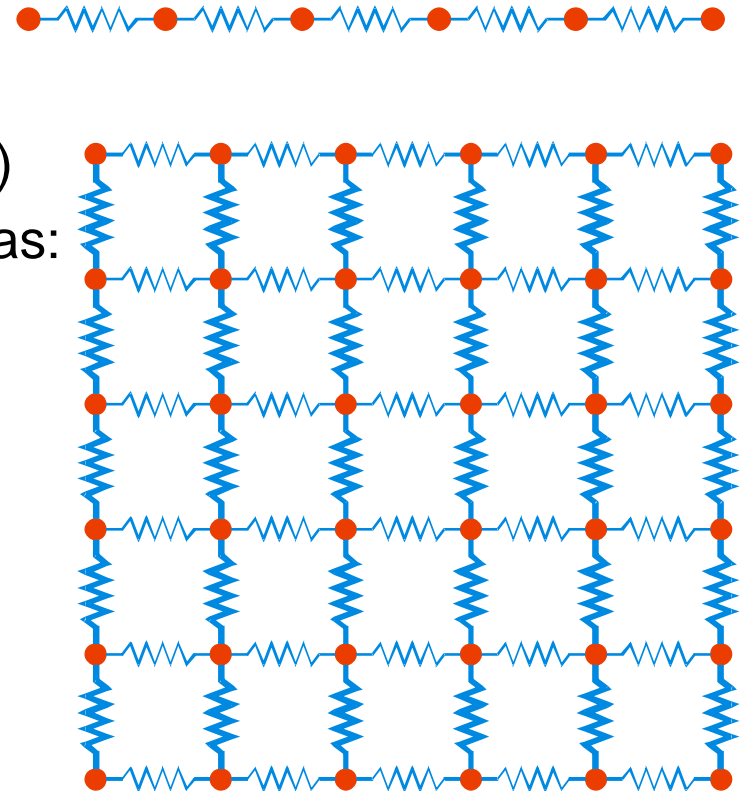


Resumen (1ª Parte)

1. Redes de osciladores. Dinámica reticular
2. Breathers estacionarios y móviles
3. Breathers y ADN
4. Breathers y Fotónica

Redes de osciladores

- Un gran número de sistemas físicos, pueden describirse mediante redes de osciladores. (Cristales, biomoléculas...)
- En las redes existen dos tipos de fuerzas:
 - Fuerzas externas o de sustrato (un cuerpo)
 - Fuerzas de interacción (dos cuerpos)
- Consideraremos redes con fuerzas no lineales:
 - Redes Klein-Gordon: Fuerzas de sustrato no lineales.
 - Redes Fermi-Pasta-Ulam (FPU): No existen fuerzas de sustrato. Fuerzas de interacción no lineales.

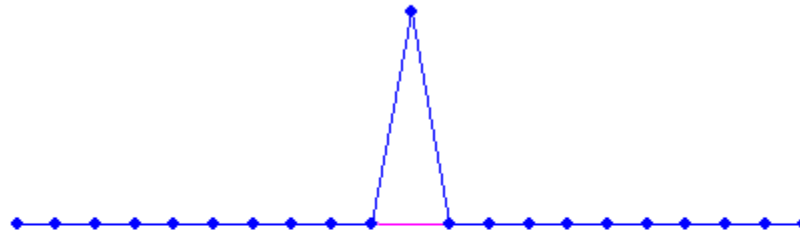




Redes de osciladores. Ejemplos

- Ejemplo de red Klein-Gordon: Cadena de péndulos.
- Los cristales suelen describirse mediante redes FPU 3D.
- En muchos casos, se aproximan las fuerzas de interacción por una fuerza de substrato efectiva transformando el sistema en una red Klein-Gordon.
- Otro tipo de redes: DNLS (Discrete Nonlinear Schrödinger).
 - Arrays de guías de ondas no lineales.
 - Cristales fotónicos.
 - Condensados de Bose-Einstein en trampas ópticas.

Redes lineales

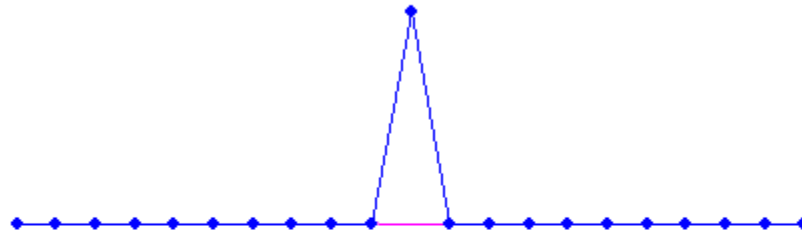




Modos de vibración

- Una perturbación aplicada a la red se dispersa.
- Explicación: Cualquier estado del sistema es una superposición de modos de vibración **extendidos**.
- Característica de los modos:
 - Tienen diferente frecuencia
 - El espectro de frecuencia está acotado (en sistemas continuos, no lo está)
 - Existen N modos, con N el número de partículas del sistema

Redes no lineales

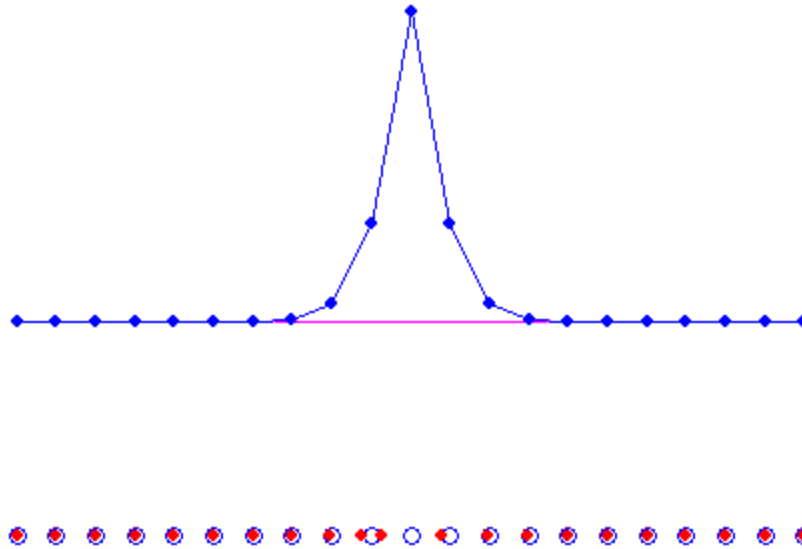




Breathers

- Parte de la excitación queda localizada
- Explicación: Se excita un modo localizado y $N-1$ modos lineales extendidos.
- El modo localizado recibe el nombre de **breather** (discreto).
- Definición de breather: Excitación localizada y periódica que existe en sistemas no lineales y discretos.
- Las condiciones de existencia vienen dadas por el teorema de MacKay-Aubry (1994): *En una red de tipo Klein-Gordon existen breathers siempre y cuando se cumpla que:*
 - La fuerzas de sustrato sean no lineales.
 - Ningún múltiplo de la frecuencia del breather coincida con la frecuencia de un fonón.

Ejemplo de breather

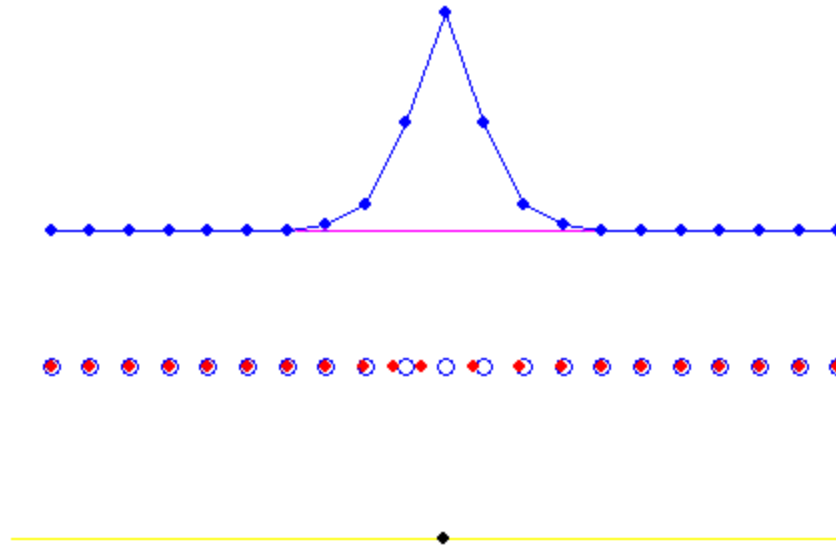




Breathers móviles

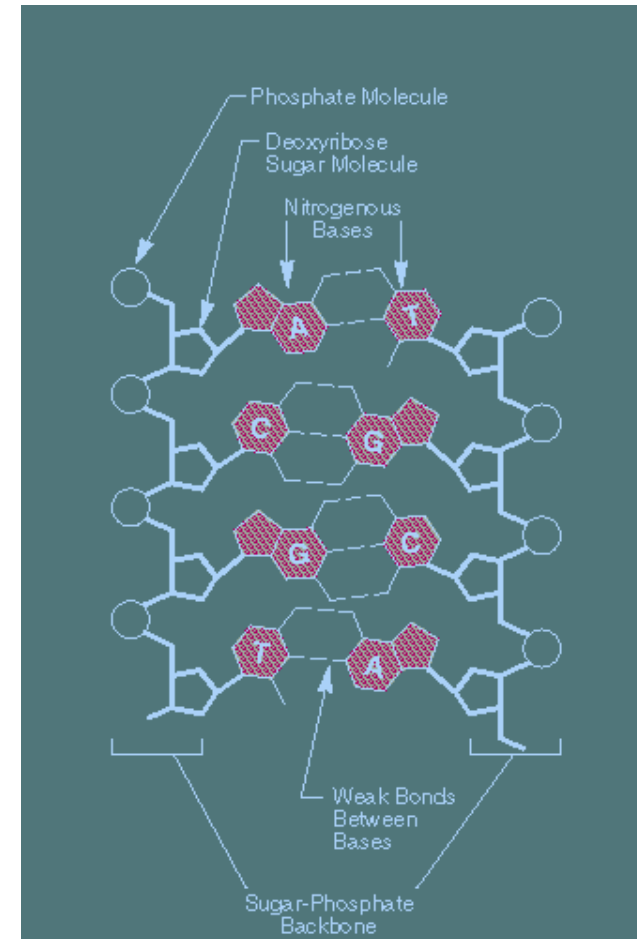
- Los breathers estacionarios son genéricos: existen en todas las redes no lineales con independencia de la expresión matemática de las fuerzas.
- Para ciertos tipos de fuerzas, los breathers estacionarios pueden ponerse en movimiento.
- **Breather móvil**: Excitación localizada (con vibración interna) que se traslada por la red.
- Debe ejercerse una perturbación que rompa la simetría del breather.
- Esta perturbación debe ser tal que se supere la **barrera de Peierls-Nabarro**. Esta se define como la diferencia de energía entre un **breather centrado en un nodo** y un **breather centrado en un enlace**.
- No son soluciones exactas: siempre van acompañadas de “radiación”.

Ejemplo de breather móvil



ADN

- El ADN es un polímero formado por unidades llamadas nucleótidos.
- Un nucleótido está formado por un azúcar (desoxirribosa), un ácido fosfórico y una base nitrogenada.
- Polinucleótido → Nucleótidos están unidos entre sí mediante enlaces fosfodiéster.
- Cuatro tipos bases nitrogenadas: Adenina (A), Citosina (C), Guanina (G) y Timina (T).
- La secuencia de bases determina el código genético.
- El ADN está formado por dos hebras complementarias. Bases unidas mediante puentes de hidrógeno. (A=T, C≡G).





Funciones principales del ADN

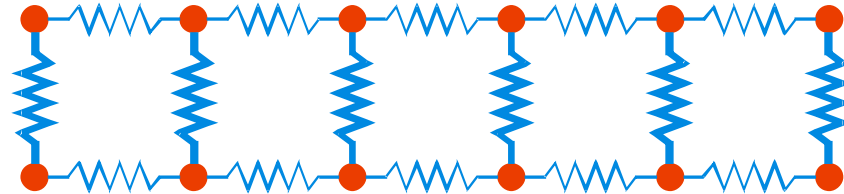
- Duplicación: En la mitosis celular debe crearse una nueva molécula de ADN.
- Transcripción: Un gen (secuencia de bases en ADN) debe traducirse en proteínas. Para ello, un fragmento de la secuencia es “copiado” a una molécula de ARN.
- Para producirse estos procesos es necesaria la apertura de la doble hélice. Breathers pueden jugar un papel importante.
- Otro fenómeno: desnaturalización → Apertura parcial o total de la doble hélice debido al cambio de las condiciones ambientales (altas temperaturas, pH extremo, ...)



Modelo de Peyrard-Bishop

- Se introduce para explicar la desnaturalización del ADN.
- Además, existen breathers (estacionarios y móviles) en dicho modelo.
- El modelo considera el movimiento de las bases. Sustituye una doble cadena de osciladores con sólo fuerzas internas por una sola con:
 - Fuerzas de sustrato (correspondientes a los puentes de hidrógeno).
 - Fuerzas de interacción de corto alcance (apilamiento).
- Sólo tiene en cuenta los movimientos en oposición de fase (aperturas o contracciones) en la dirección de los puentes de hidrógeno.
- Permite introducir fácilmente inhomogeneidades en el sustrato → Número de puentes de hidrógeno por par de bases.
- Modelo de Dauxois-Peyrard-Bishop → Fuerzas de interacción no lineales.

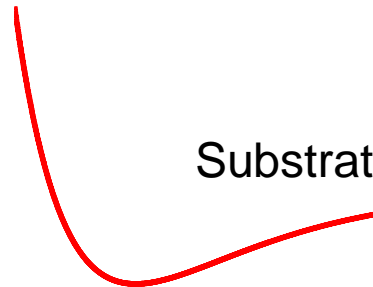
Modelo de Peyrard-Bishop



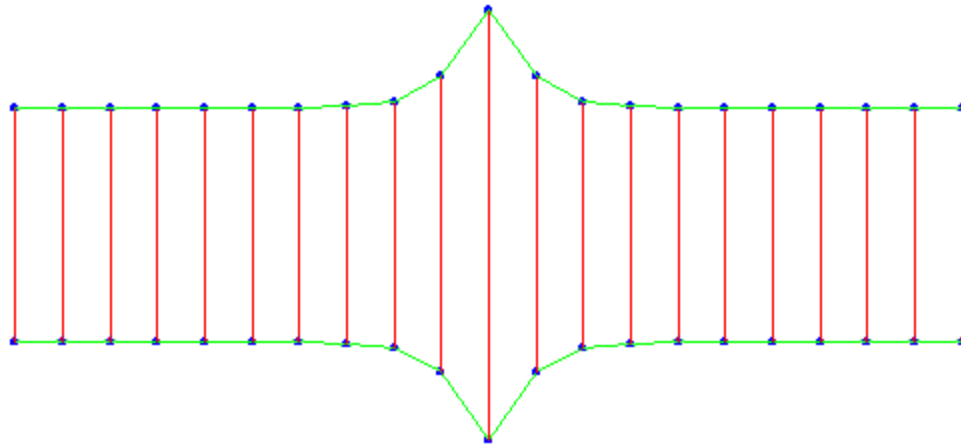
||



+



Modelo Peyrard-Bishop: Breathers





Interacción dipolar en ADN

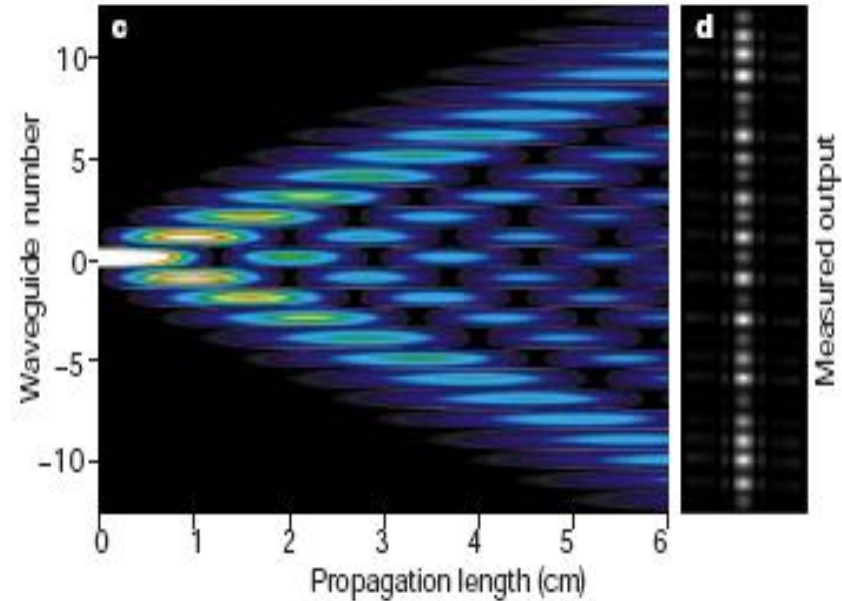
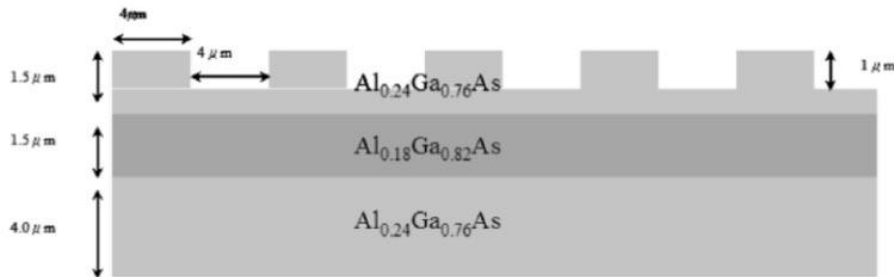
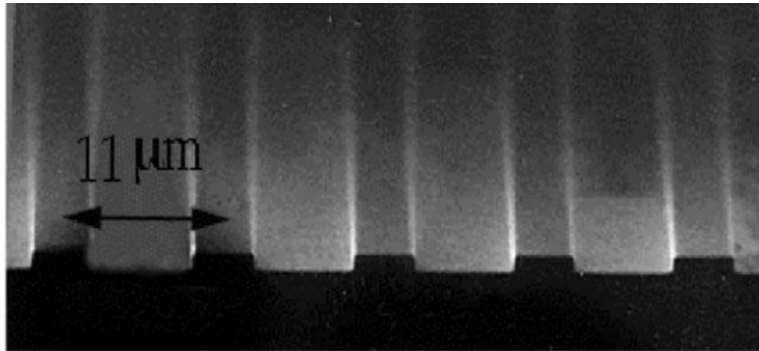
- Desventajas del modelo Peyrard-Bishop:
 - No permite tener en cuenta la geometría.
 - No distingue entre las bases A/T y C/G.
- Se puede mejorar teniendo en cuenta el momento dipolar de los puentes de hidrógeno:
 - Es una interacción de largo alcance → Permite modelar fácilmente estructuras helicoidales y plegadas.
 - Es sensible a la orientación de los dipolos → Permite distinguir entre los cuatro pares de bases.



Breathers y fotónica

- Existen breathers de tipo DNLS en sistemas ópticos.
- Sistemas ópticos discretos:
 - Cristales Fotónicos (fotones juegan el papel de electrones en electrónica).
 - Arrays de guías de ondas.
- Nos centraremos en este último tipo de sistema:
 - Una guía de ondas es un dispositivo que transporta ondas electromagnéticas (generalmente, microondas y luz visible).
 - Un ejemplo es la fibra óptica.
 - Las ondas en el interior de la guía (lineal) son superposiciones de diferentes modos.

Guías de ondas



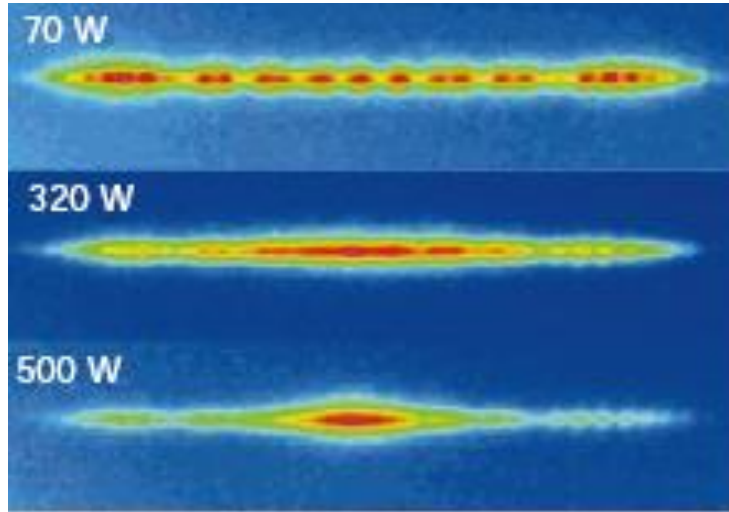
- En un array de guías de ondas, varias guías de ondas (con un solo modo) están colocadas de forma que sus modos individuales se solapan.
- Se comportan como osciladores lineales acoplados (difracción)



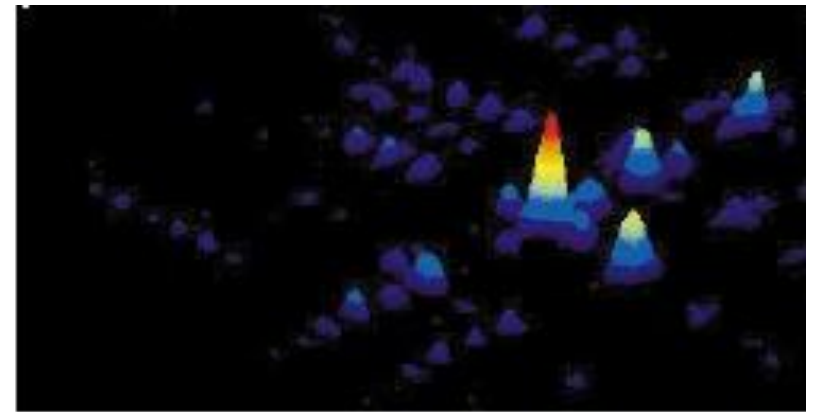
Fenómenos ópticos no lineales

- Efecto Kerr:
 - Cambio en el índice de refracción debido a la aplicación de un campo eléctrico. Efecto Kerr electro-óptico → El cambio es proporcional al cuadrado del campo eléctrico.
 - Ejemplo de material: Arseniuro de Galio y Aluminio.
- Efecto fotorrefractivo:
 - El material responde a la luz alterando su índice de refracción.
 - Se utiliza para almacenamiento holográfico.
 - Ejemplo de estos materiales: Titanato de Bario, Niobato de estroncio y bario (SBN).

Observación experimental



Breathers en arrays 1D de AlGaAs (Kerr)



Breathers en arrays 2D de SBN:75 (Fotorrefractivo)



Características de breathers en guías de ondas

- Tipo Kerr:
 - La barrera de Peierls-Nabarro aumenta con la potencia del haz de luz:
 - Sólo existen breathers móviles para haces de potencia baja.
 - No existen breathers móviles en arrays en 2D y 3D.
- Fotorrefractivos:
 - La barrera de Peierls-Nabarro no sigue un comportamiento monótono. Puede incluso anularse.
 - Pueden existir breathers móviles incluso para potencias altas.
 - Se han encontrado breathers móviles en 2D.
 - Existen breathers móviles que no emiten radiación.
 - La potencia necesaria para la creación de breathers es menor que en los materiales tipo Kerr.



Interacción de breathers móviles en guías de ondas

- Comparemos el comportamiento de dos haces idénticos que se propagan en dirección contraria.
- Tipo Kerr:
 - A velocidades bajas, los breathers se reflejan.
 - A velocidades altas, los breathers se atrapan.
- Fotorrefractivos:
 - Para potencias bajas, el comportamiento es el mismo.
 - Para potencias altas, se generan tres breathers tras la interacción.

Ejemplos de colisiones

