

Breathers en redes Klein-Gordon no lineales

Un breather es un modo de vibración localizado en una red clásica de osciladores debido a la no linealidad de las interacciones.

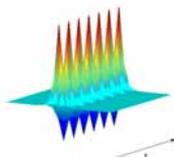
Las redes de tipo Klein-Gordon vienen descritas por el Hamiltoniano:

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} m \dot{u}_n^2 + V(u_n) + \sum_m W(|u_n - u_m|) \right]$$

u_n representa la separación respecto al equilibrio de cada oscilador, $V(u)$ es el potencial on-site y $W(u)$ es el potencial de interacción.

Si $V(u)$ es anarmónico, existen breathers siempre que ningún múltiplo de su frecuencia coincida con la de los modos lineales (Teorema de MacKay-Aubry) [1].

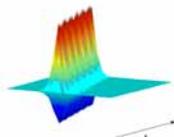
Ejemplo de breather (estacionario):



Bajo ciertas condiciones, los breathers pueden desplazarse por la red (breather móvil) constituyendo un medio para la transmisión de energía. Para producir un breather móvil, es necesario perturbar un breather estacionario, de forma que se rompa la simetría de éste.

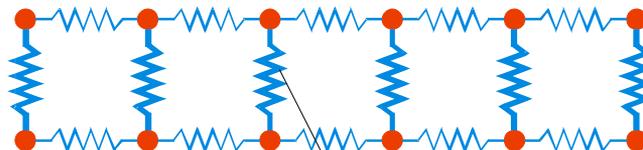
Las condiciones de existencia de breathers móviles son básicamente tres: 1) Intensidad de la fuerza de interacción por encima de un umbral; 2) Velocidad de transmisión lo suficientemente baja (en caso contrario, el breather se deforma); 3) Energía cinética inicial por encima del potencial creado por la red (energía de Peierls-Nabarro) [2].

Ejemplo de breather móvil:



El Modelo de Peyrard-Bishop

Históricamente, se introdujo para estudiar la desnaturalización del ADN [3].
Consiste en suponer que el ADN está constituido por una doble cadena de osciladores.



Interacciones de stacking
Potencial armónico

Puentes de Hidrógeno
Potencial de Morse

Se consideran sólo oscilaciones en la dirección de los puentes de hidrógeno. Se separan además, vibraciones en fase y en antifase.
Como resultado, se tienen dos hamiltonianos desacoplados: para las vibraciones en fase, equivale a una red de osciladores armónicos.
El hamiltoniano para vibraciones en antifase equivale a una red de Klein-Gordon no lineal con potencial on-site de tipo Morse. Ahora u_n representan las aperturas de la doble cadena.

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} m \dot{u}_n^2 + D(\exp(-bu_n) - 1)^2 + k(u_n - u_{n+1})^2 \right]$$

Valores típicos de las variables: $m=300$ uma, $D=0.04$ eV, $b=4.45 \text{ \AA}^{-1}$. k puede oscilar entre 0.01 y 10 eV/ \AA^2 .

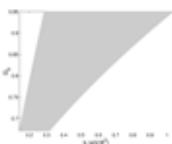
Más allá de Peyrard-Bishop: La interacción dipolar

El modelo de Peyrard-Bishop no puede considerar efectos de la geometría, ya que sólo tiene en cuenta interacciones de corto alcance (stacking).
Podemos introducir interacciones de corto alcance si consideramos el momento dipolar de los puentes de hidrógeno. En consecuencia, se añade un término al Hamiltoniano [4]:

$$H_{dip} = \sum_n \sum_p \frac{\sigma_n \cdot \sigma_p J}{|\vec{r}_n - \vec{r}_p|} u_n u_p, \quad J = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 d^3}, \quad |\vec{r}_n - \vec{r}_{n+1}| = 1$$

J es la constante de interacción dipolar. $d=3.4 \text{ \AA}$ es la distancia entre dos pares de bases vecinos. q es la transferencia de carga. Mediante cálculos químico-cuánticos se encuentra que, para el par A/T, $q=0.09e$, y para el par C/G, $q=-0.10e$ [5]. La constante J se toma a partir del promedio de ambos valores: $J=0.0031$ eV/ \AA^2 . La constante σ_{np} es igual a +1 si los dipolos del n -ésimo y p -ésimo par tienen la misma orientación y es igual a -1 si son antiparalelos.

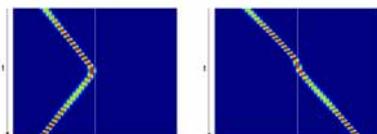
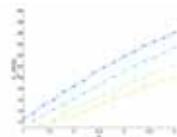
La siguiente figura muestra el rango de existencia de breathers móviles para el modelo Peyrard-Bishop con interacción dipolar. En la figura, $\Omega_b = \omega_b / \omega_0$, siendo ω_b la frecuencia del breather y $\omega_0 = 1.13$ THz.



Gracias al largo alcance de la interacción dipolar, se pueden modelar distintas geometrías. Un ejemplo típico es la cadena curvada [6]:



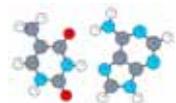
Consideramos el paso de un breather móvil por la zona curvada. Para velocidades pequeñas, el breather móvil la atraviesa, mientras que para curvaturas grandes, se refleja. La siguiente figura muestra la velocidad crítica en función de la curvatura para diferentes frecuencias (de arriba hacia abajo: 0.95, 0.90, 0.85 y 0.80), suponiendo que la zona curvada es una parábola. También se muestran ejemplos de la interacción del breather móvil con la zona curvada.



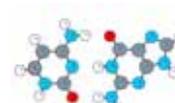
Efecto de las inhomogeneidades

El modelo de Peyrard-Bishop permite el estudio del efecto del código genético en la desnaturalización del ADN, así como en la transmisión de energía [7].
La forma más sencilla de tener en cuenta la secuencia de bases se basa en el hecho de que el par A/T tiene 2 puentes de hidrógeno, mientras que el C/G tiene 3, como muestra la figura.

Par T-A

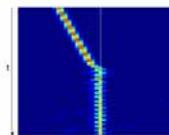
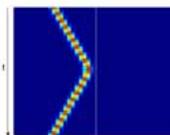


Par G-C

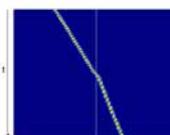


Se suele tomar la aproximación $\frac{D_{A/T}}{D_{C/G}} = \frac{2}{3}$

Interacción un breather móvil con una inhomogeneidad: Si tenemos la secuencia A...ACA...A, el breather se refleja al llegar a la inhomogeneidad. Con la secuencia C...CAC...A, el breather se atrapa en la inhomogeneidad [8].



Desventaja del modelo de Peyrard-Bishop: la base A (C) no se puede distinguir de la T (G). La introducción de la interacción dipolar permite distinguir entre las cuatro bases.
Interacción de un breather móvil con una interfase dipolar: Estudiamos la secuencia A...AT...T, o, equivalentemente, C...CG...G, utilizando el modelo con interacción dipolar [7].
Para velocidades bajas, el breather es atrapado; para velocidades altas, el breather atraviesa la interfase disminuyendo su velocidad.
Este comportamiento se observa también cuando tenemos un sólo dipolo orientado en sentido antiparalelo, es decir, con las secuencias A...ATA...A, o bien, C...CGC...C.



Bibliografía

- [1] RS MacKay, S Aubry. Nonlinearity 7 (1994) 1623
- [2] S Aubry, T Cretegny. Physica D 119 (1998) 34
- [3] M Peyrard, AR Bishop. Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 2755
- [4] J Cuevas, JFR Archilla, YuB Gaididei, FR Romero. Physica D 163 (2002) 106
- [5] J Cuevas, EB Starikov, JFR Archilla, D Hennig. Mod. Phys. Lett B 18 (2004) 1319
- [6] J Cuevas, F Palmero, JFR Archilla, FR Romero. Phys. Lett. A 299 (2002) 221
- [7] J Cuevas, F Palmero, JFR Archilla, FR Romero. J. Phys. A 35 (2002) 10519
- [8] A Álvarez, FR Romero, JFR Archilla, J Cuevas, PV Larsen. Eur. Phys. J. 51 (2006) 119