

# Grupo de Física No Lineal

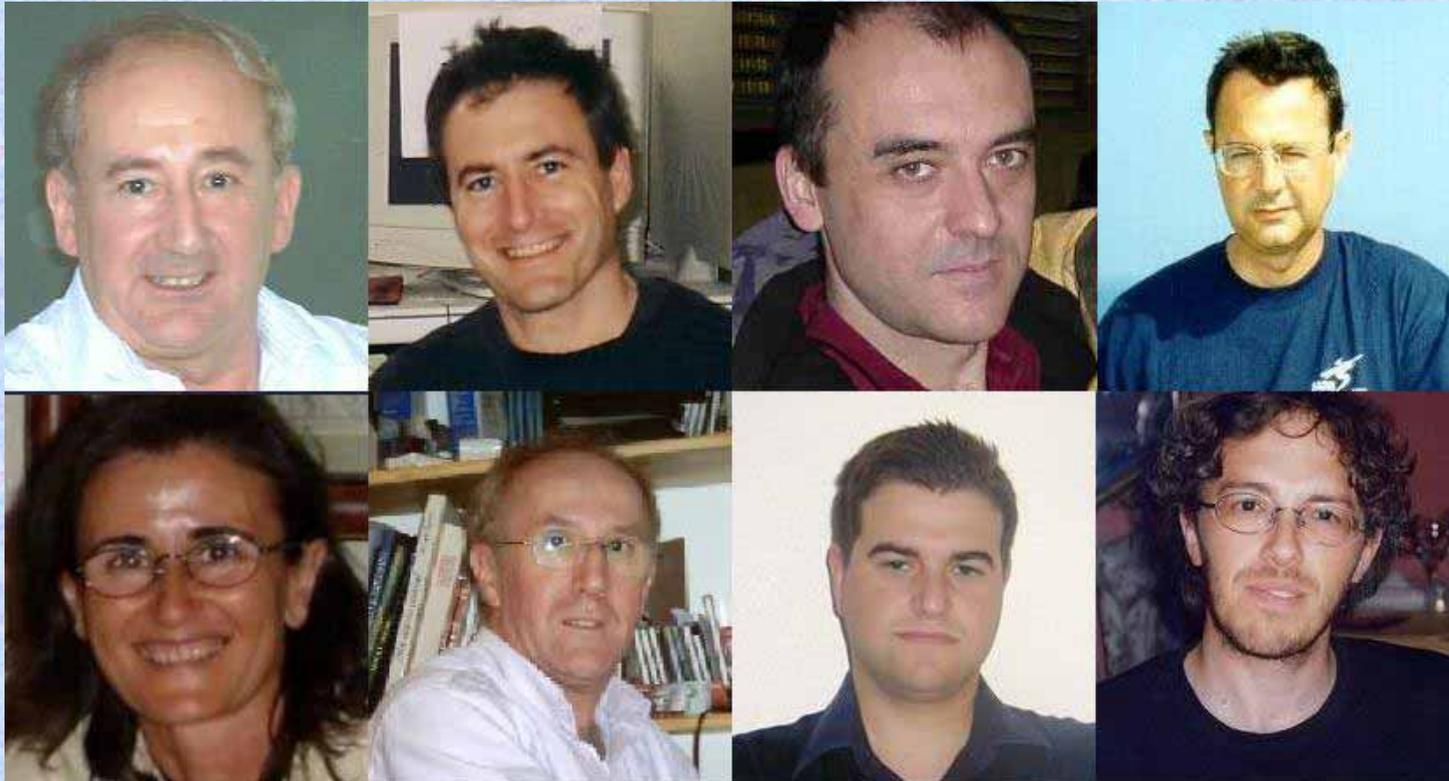


Universidad de Sevilla

<http://www.grupo.us.es/gfnl>

Departamentos: Física Aplicada I y FAMN

Centros: Facultad de Física, ETSII Informática y EUP



JFR Archilla. Imáginitica 07. Sevilla, 6 de marzo de 2007

# Breathers: introducción y aplicaciones

**Juan F Rodríguez Archilla**

- ¿Qué son los breathers?
- Breathers en biología: ADN
- Breathers en sólidos cristalinos

**Jesús Cuevas Maraver**

- Métodos numéricos en breathers

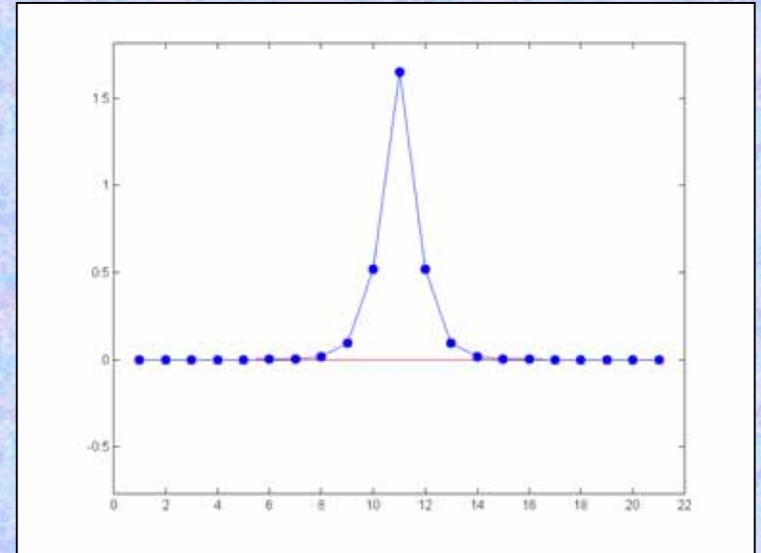
**Faustino Palmero Acebedo**

- Breathers cuánticos

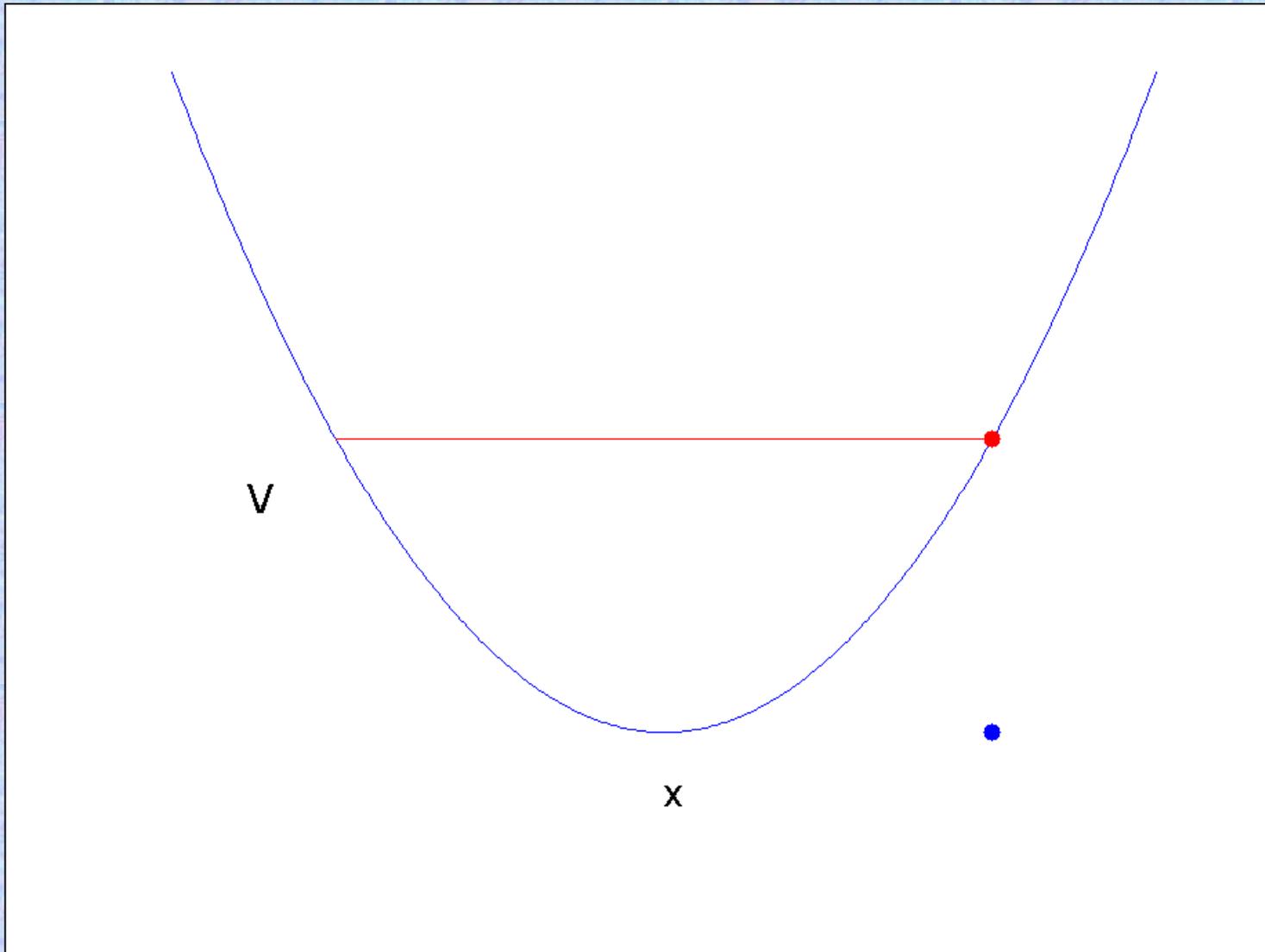
# Breathers: ¿en qué sistemas aparecen?

En sistemas de osciladores acoplados

- Oscilador lineal
- Oscilador no lineal
- Osciladores lineales acoplados: fonones
- Osciladores no lineales acoplados: breathers



# Oscilador lineal aislado: $F=-k x$ , $V=1/2 k x^2$



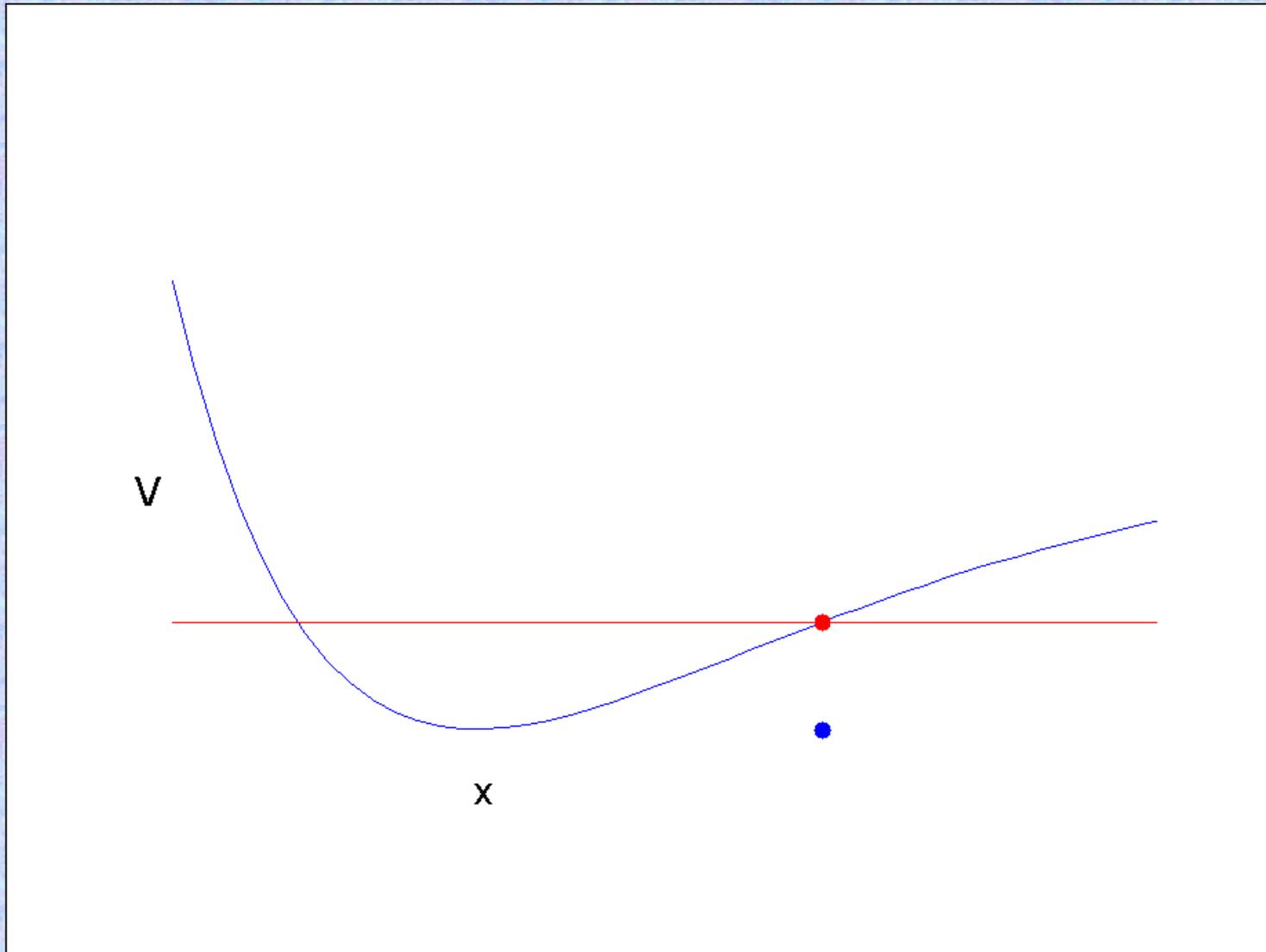
# Características del oscilador lineal

- Fuerza:  $F = -k x$ ;  $F = m x''(t)$
- Energía potencial:  $V = 1/2 k x^2$
- Ecuación diferencial:

$$x''(t) + (\omega_0)^2 x = 0$$

- Solución:  $x = A \cos(\omega_0 t + \varphi_0)$
- Una sola frecuencia:  $\omega_0 = (k/m)^{1/2}$
- Cualquier energía E

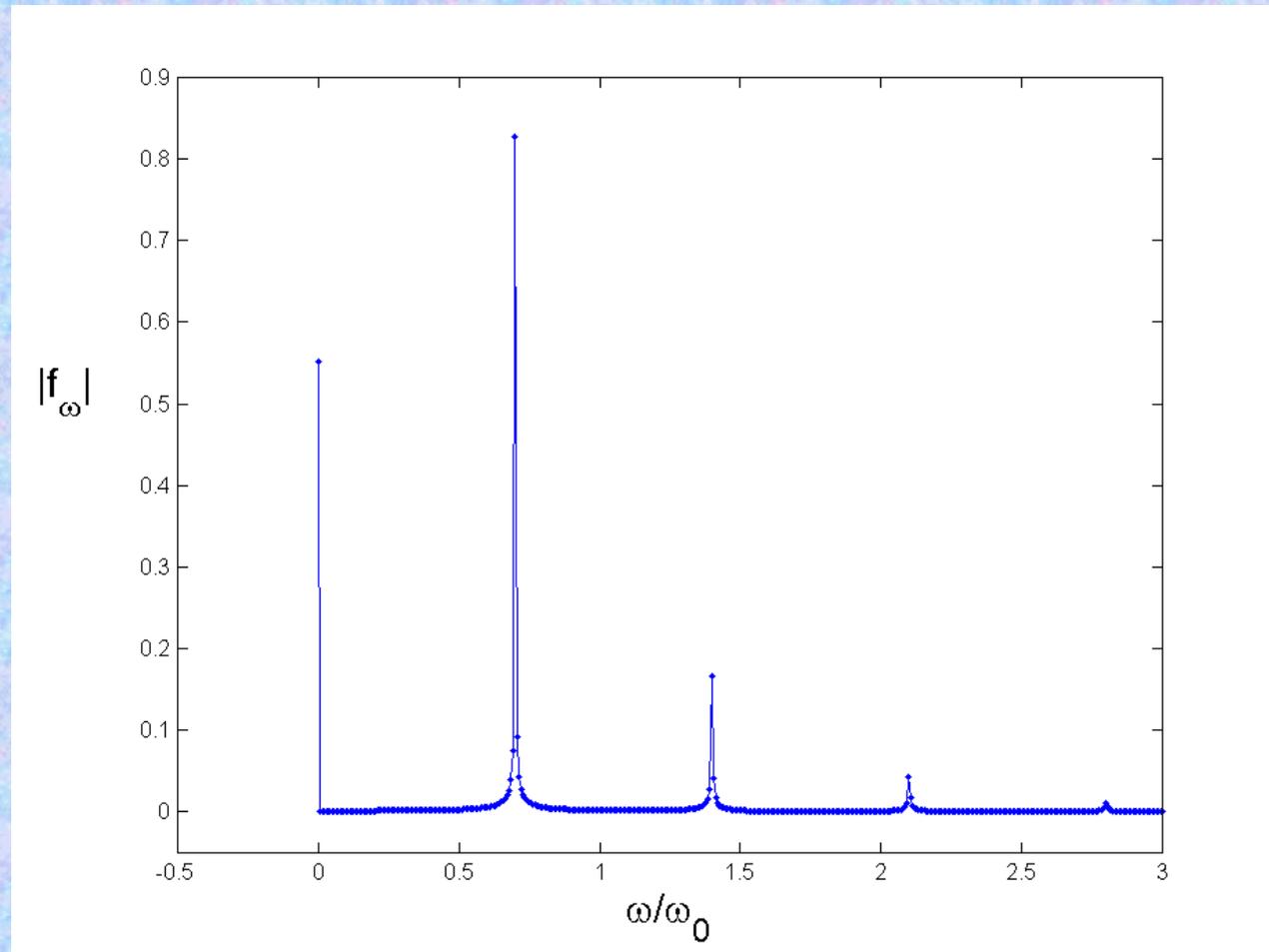
# El oscilador no lineal



# El oscilador no lineal

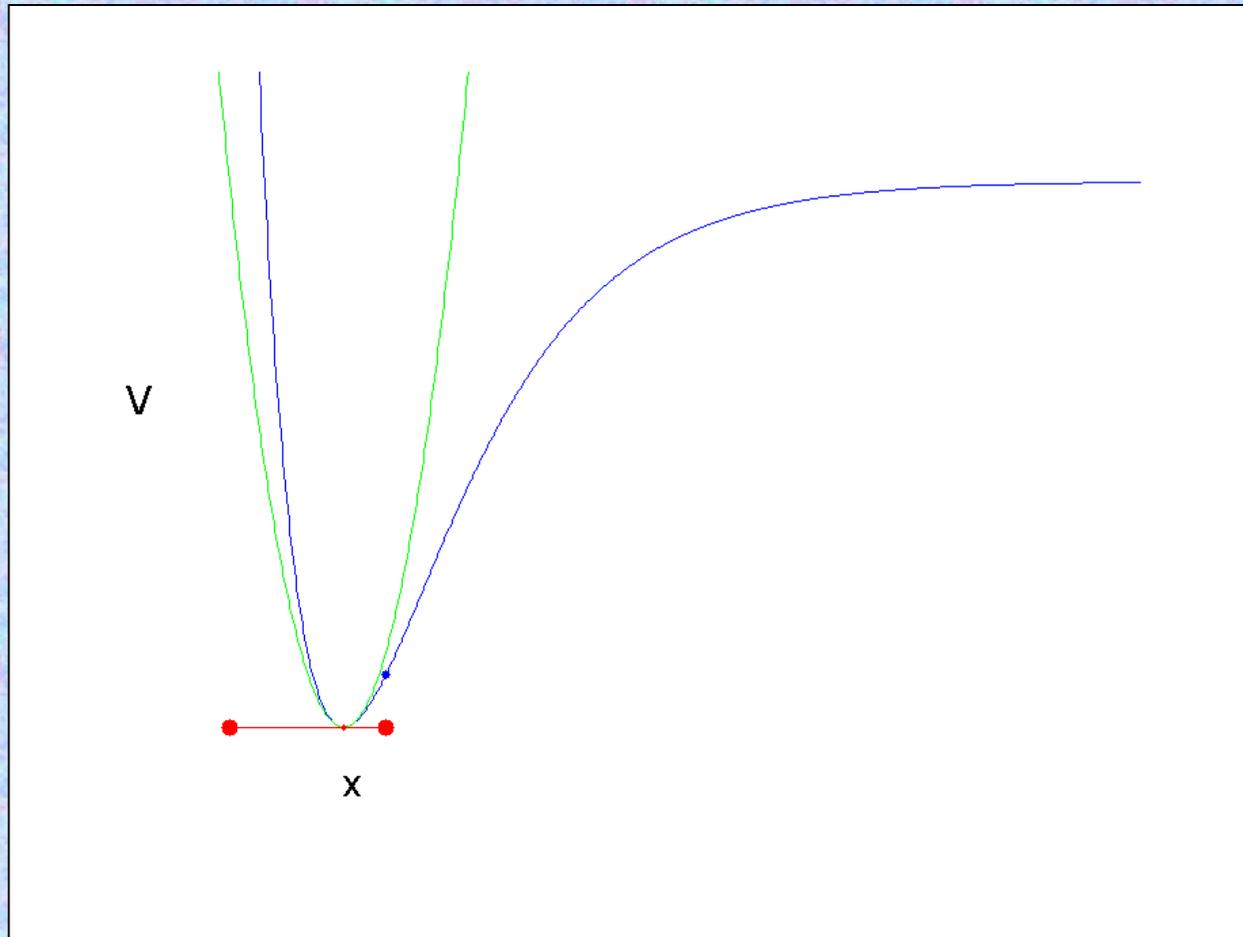
- Energía potencial:  $V(x) = \frac{1}{2} k x^2 - \frac{1}{3} a x^3$
- Fuerza:  $F = -V'(x) = -k x + a x^2 \neq -k x$
- Ecuación  $x''(t) + V'(x) = 0$
- Solución:  $x = g(\omega_b t + \varphi_0)$  ;  $g$ :  $2\pi$  periódica
- $x = a_0 + a_1 \cos(\omega_b t + \varphi_1) + a_2 \cos(2\omega_b t + \varphi_2) + \dots$
- La energía depende de  $\omega_b$ :  $E = E(\omega_b)$

# El oscilador no lineal: espectro

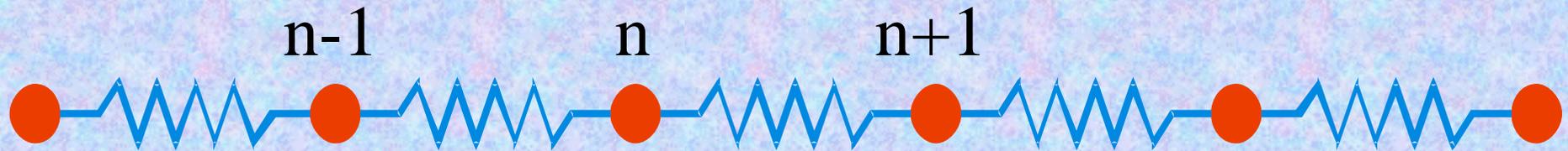


# El potencial de Morse

- Potencial  $V(x)=0.5(\exp(-x)-1)^2$



# Red de osciladores lineales acoplados

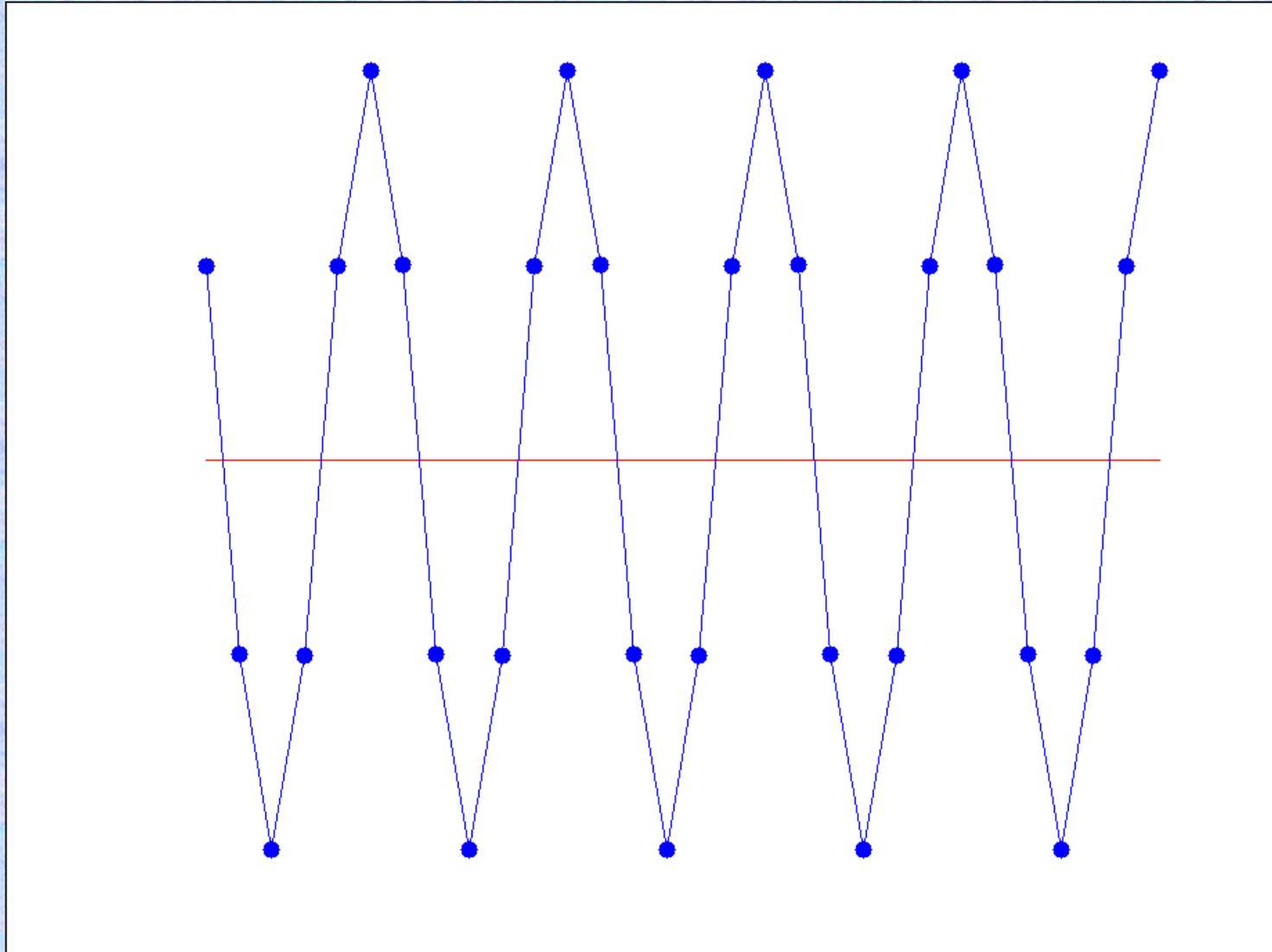


Ecuación:

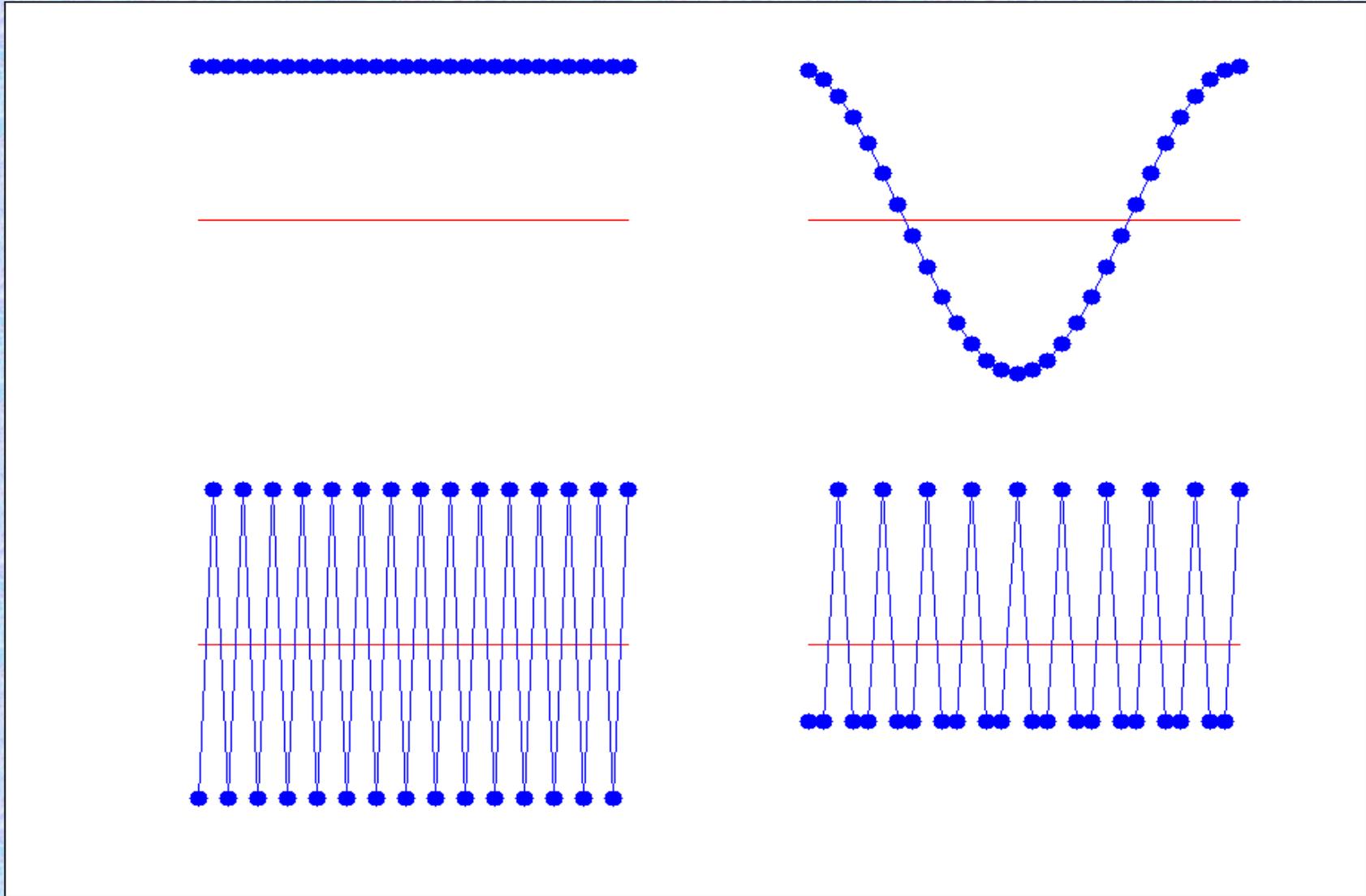
$$x_n''(t) = -V'(x_n) + \varepsilon (x_{n+1} - x_n) - \varepsilon (x_n - x_{n-1}) = 0$$

Soluciones: **fonones**

# Fonones: $x_n = A \cos(\omega_q t + q n)$

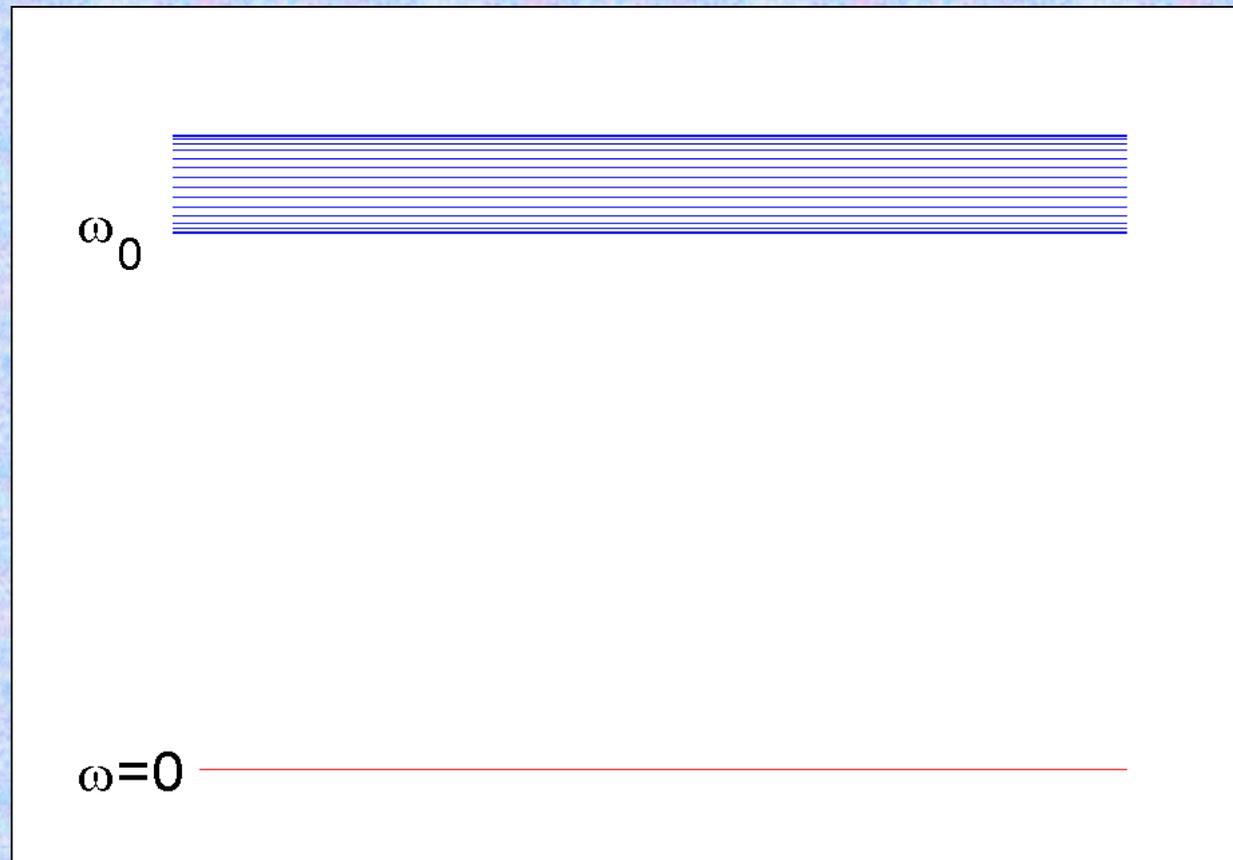


# Más fonones



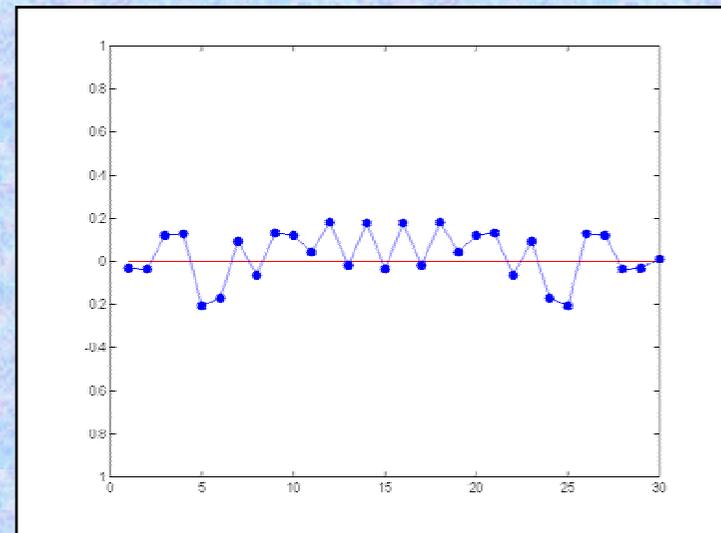
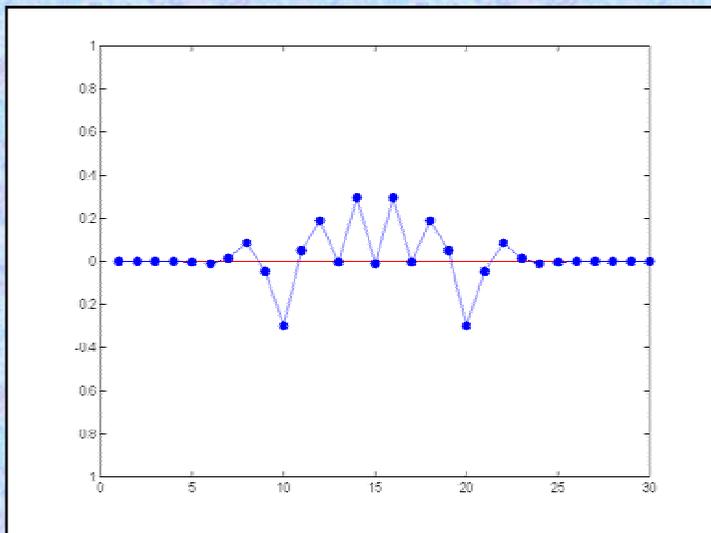
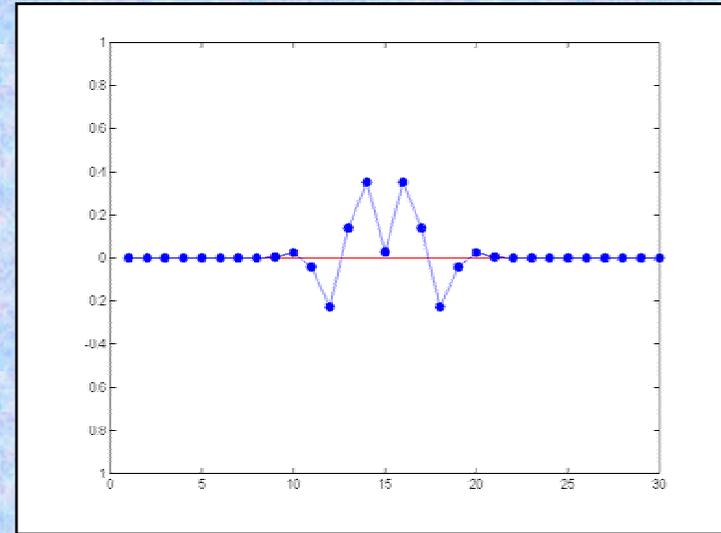
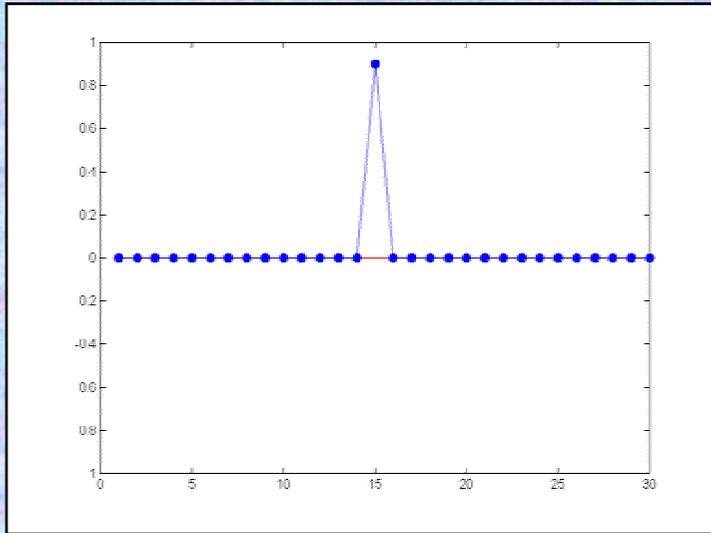
# Características de los fonones

- Extensos con amplitud uniforme
- Banda de frecuencias:



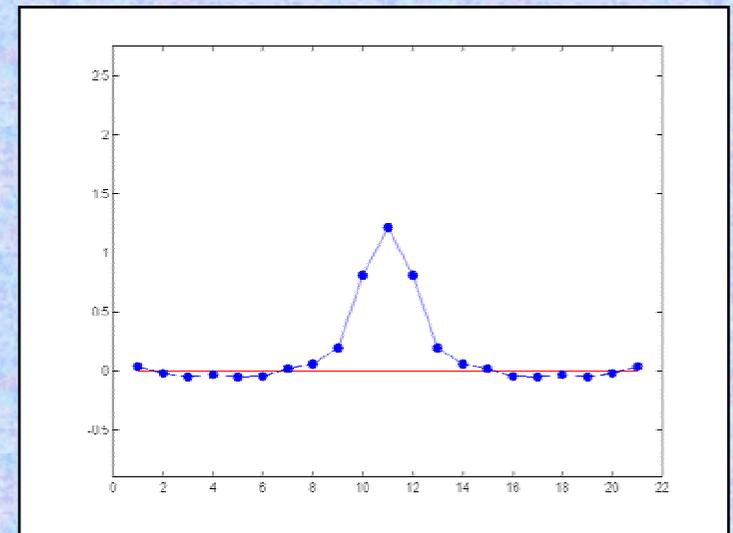
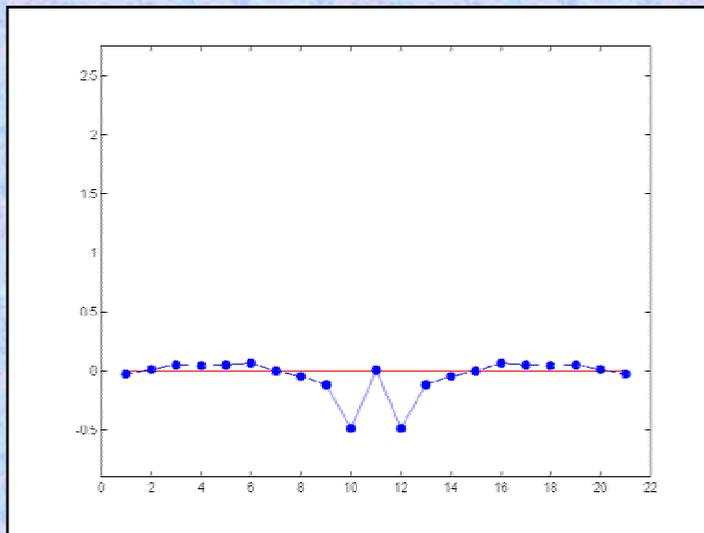
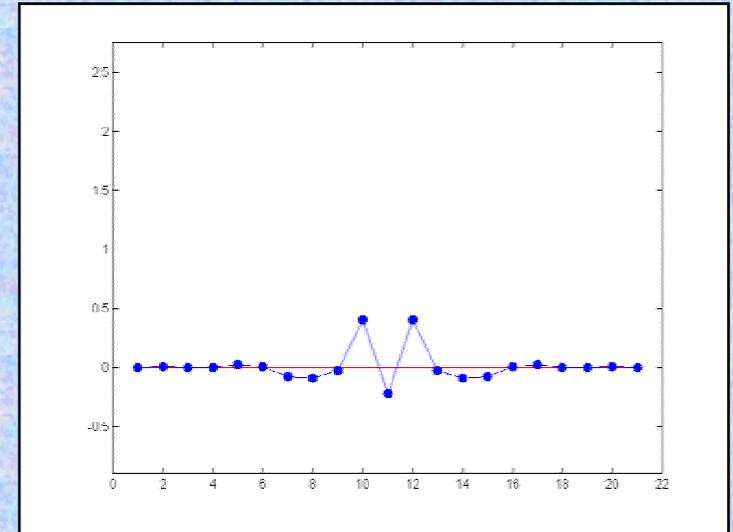
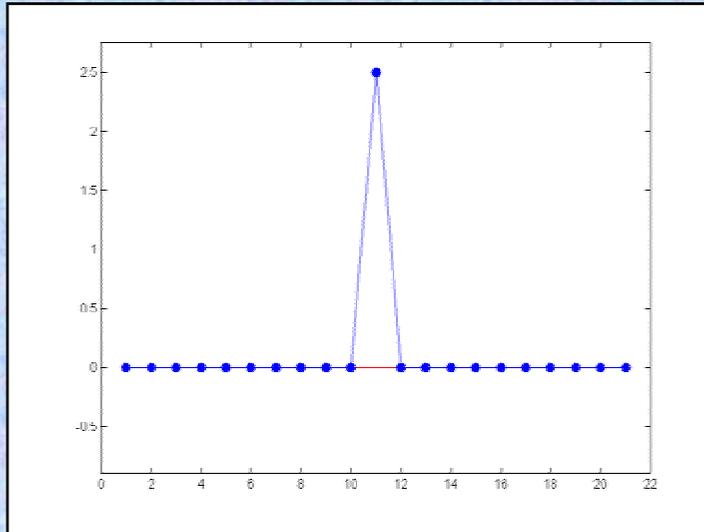
# Perturbación de una red lineal

- Su energía se dispersa entre los fonones



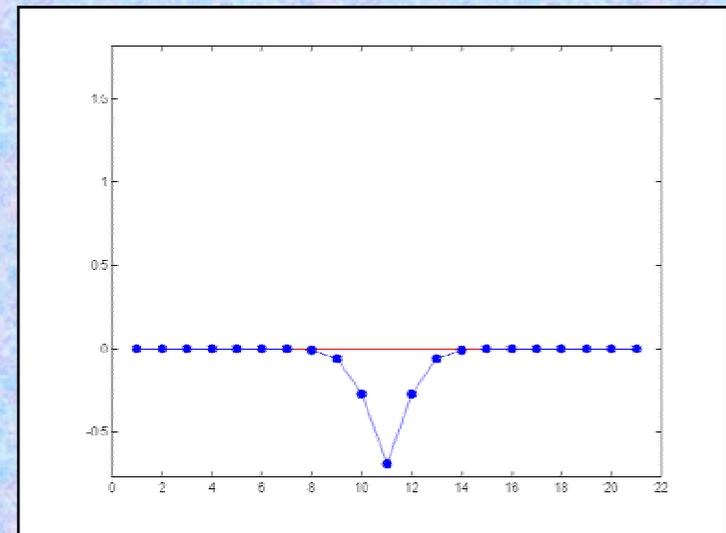
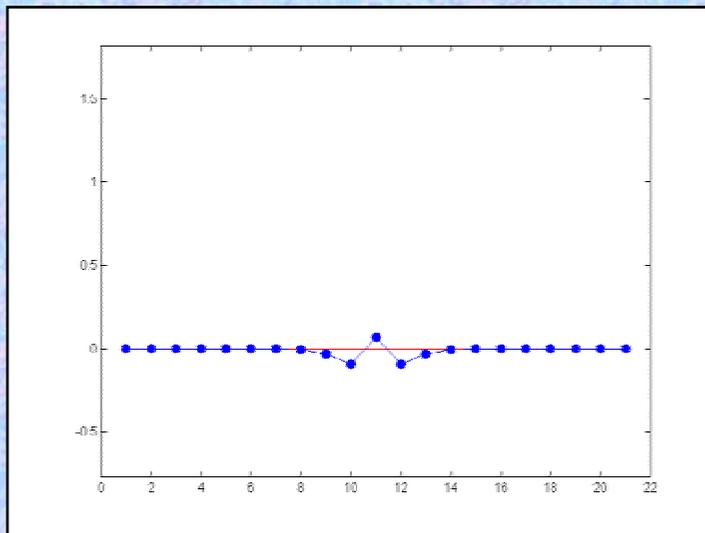
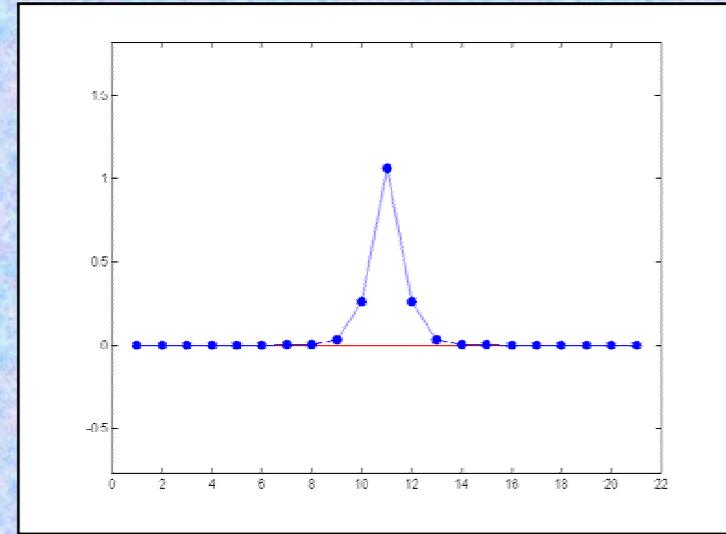
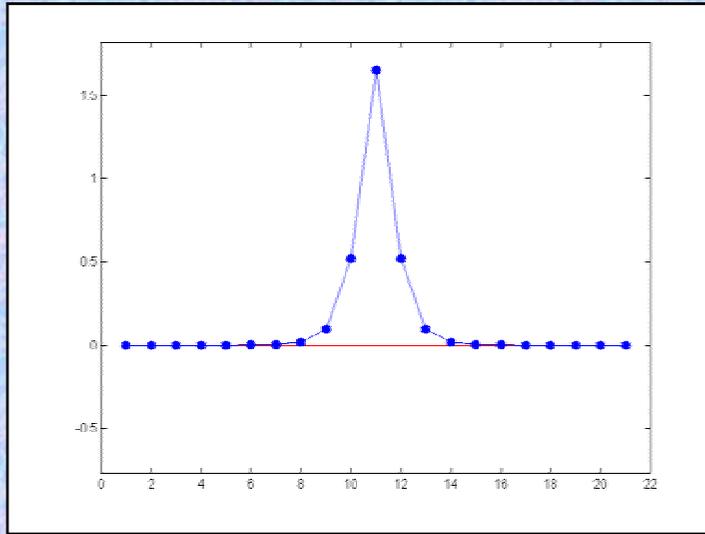
# Perturbación grande en una red no lineal

- La energía se mantiene localizada



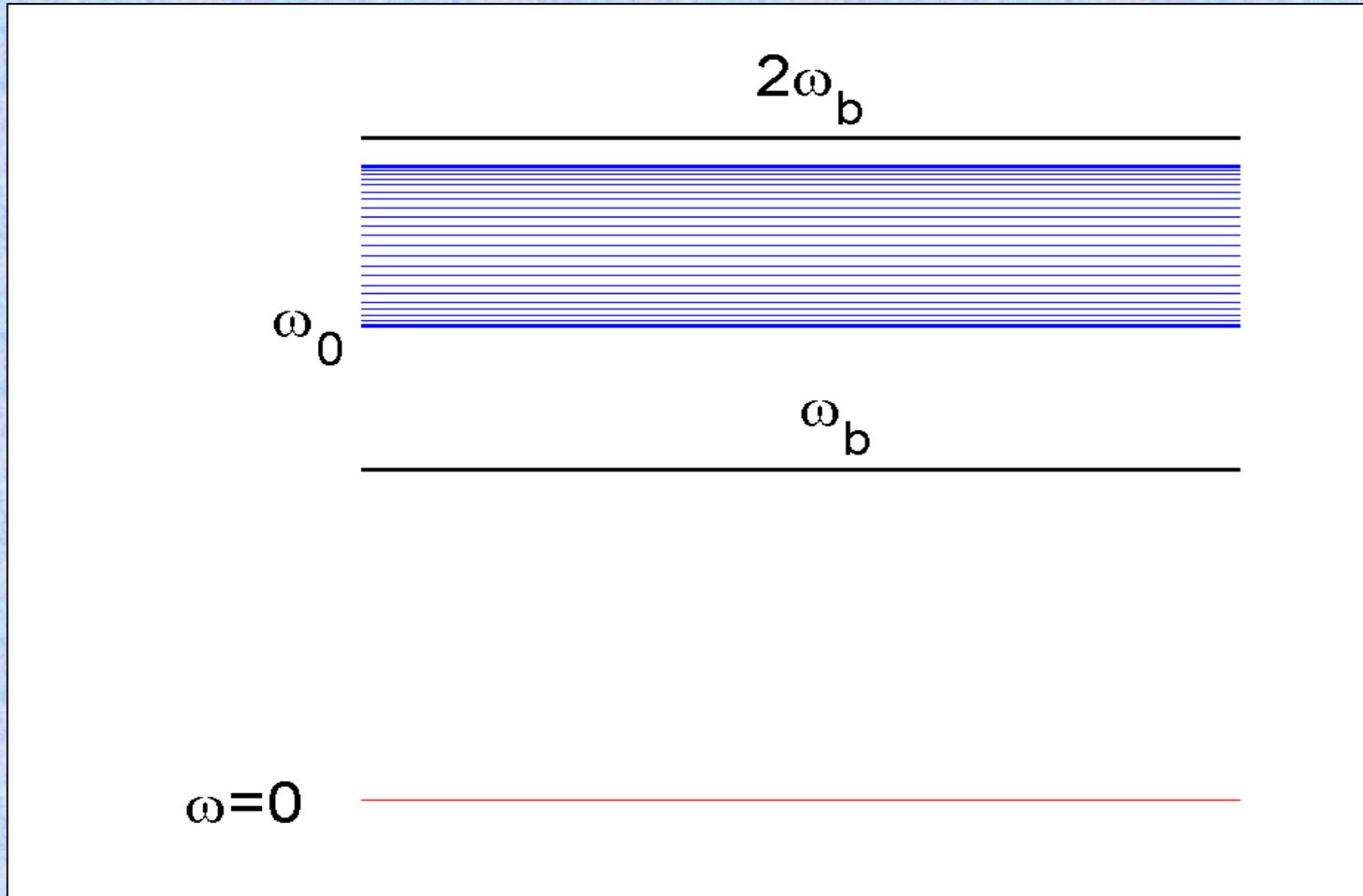
# Breather

- Solución periódica, exacta y localizada



# Frecuencia del breather y banda de fonones

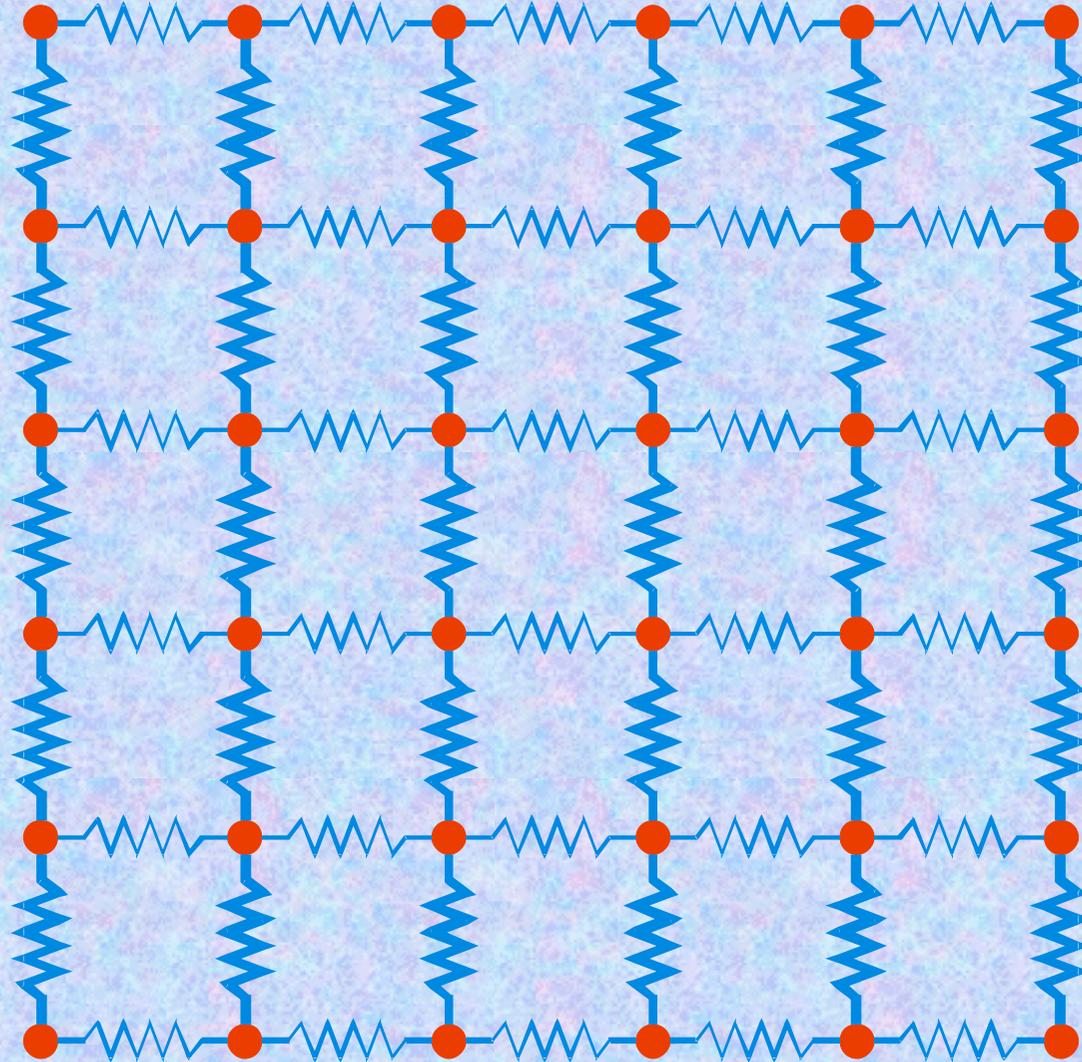
$$\omega_b=0.7, \varepsilon=0.2$$



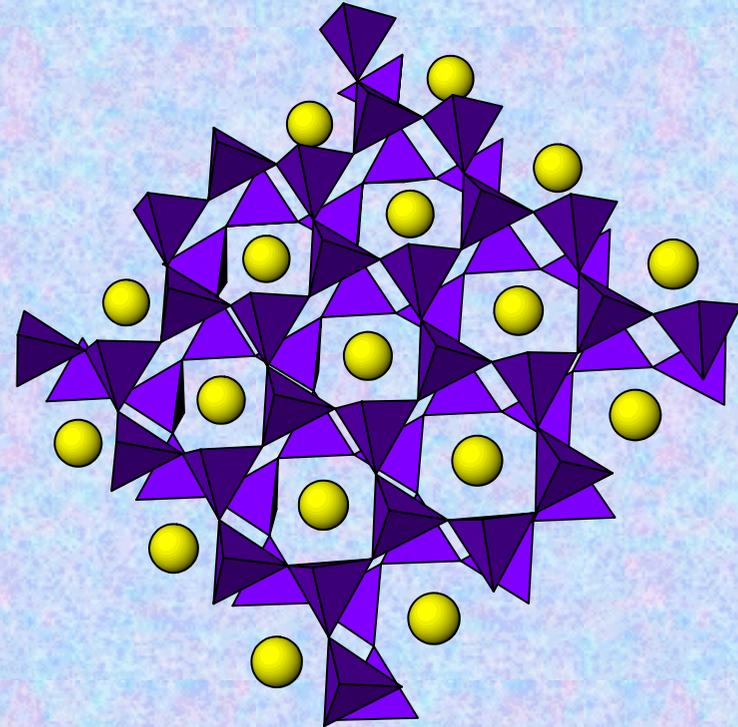
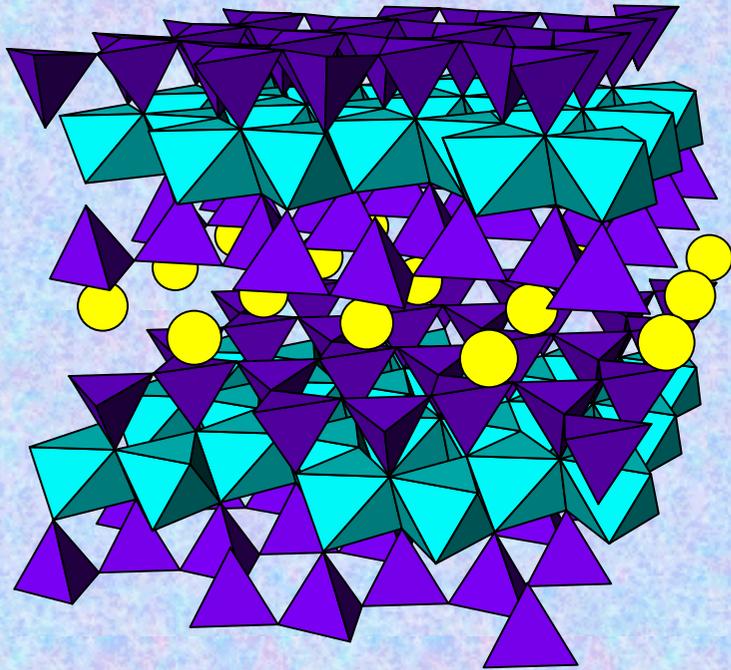
# Condiciones para la existencia de breathers

- La frecuencia del breather y sus armónicos deben estar fuera de la banda de fonones.
- El oscilador debe ser no lineal para la amplitud en cuestión.

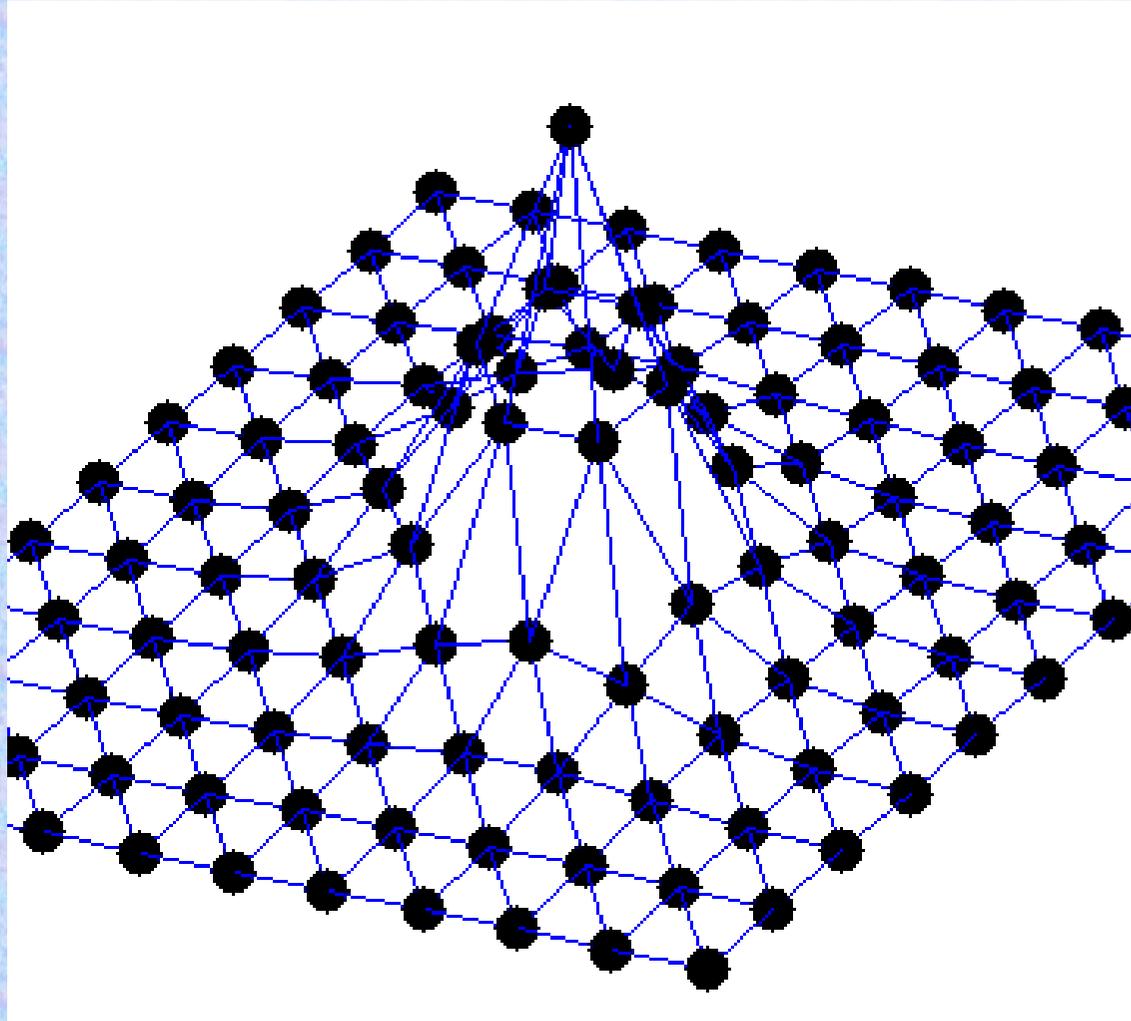
# Redes en dos dimensiones



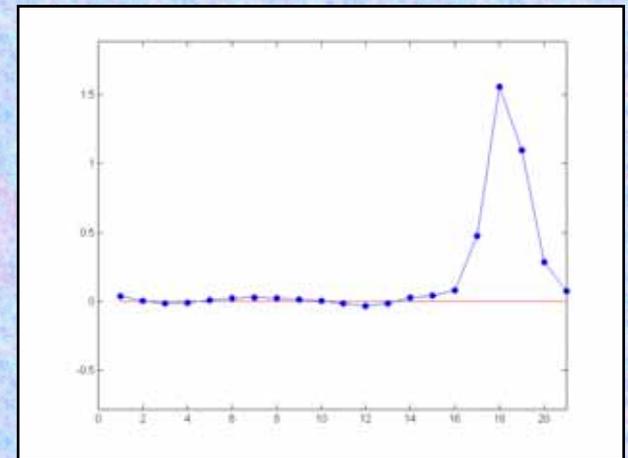
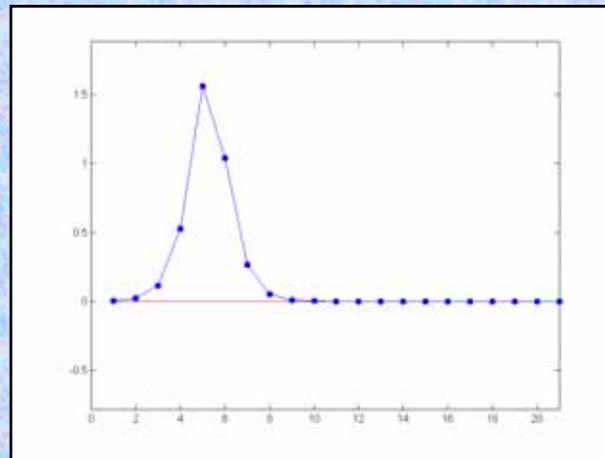
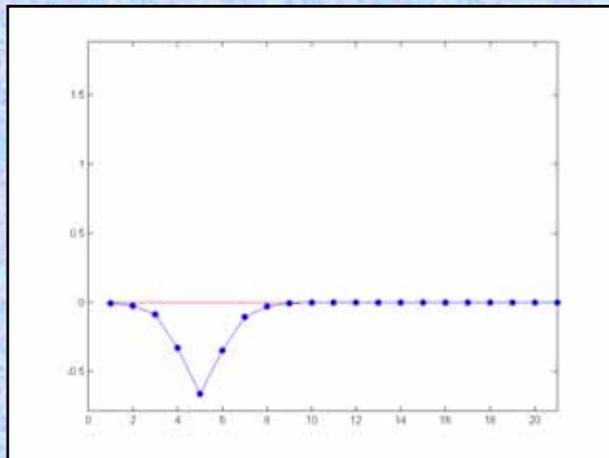
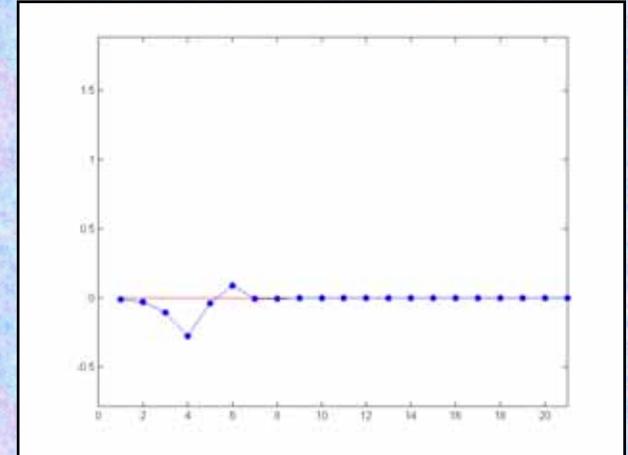
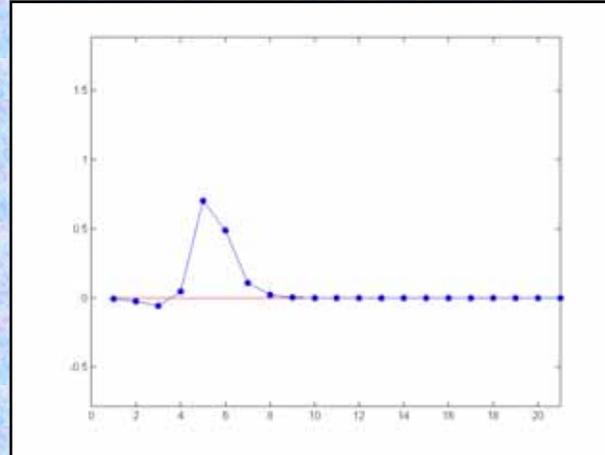
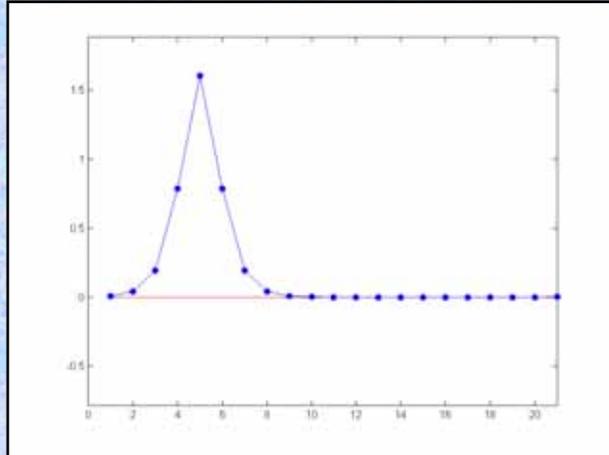
# Ejemplo: la mica muscovita



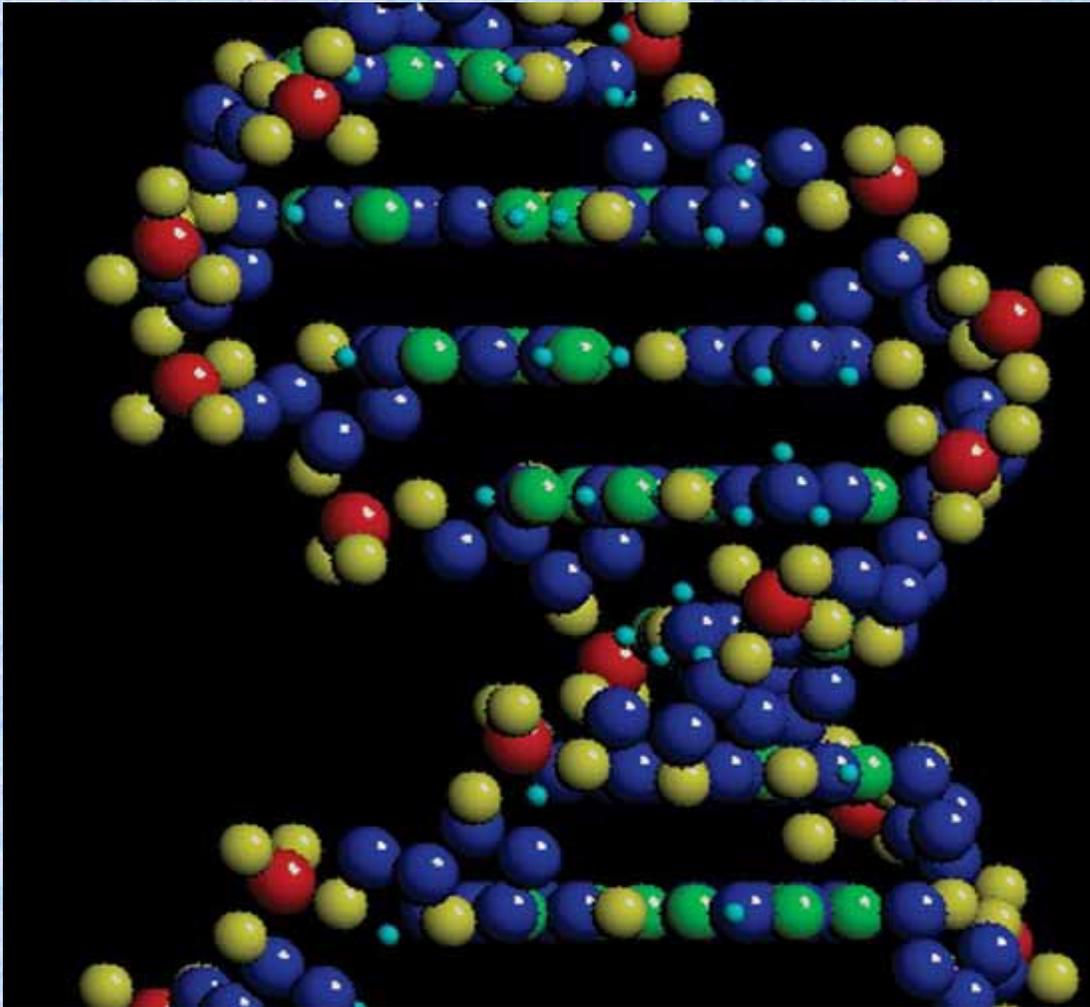
# Breathers en la mica muscovita



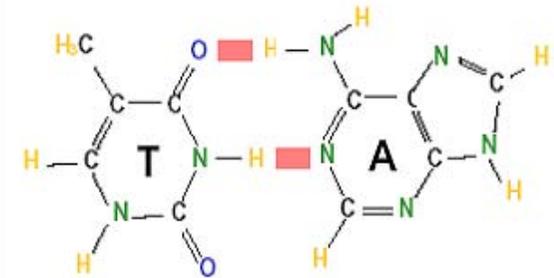
# Breathers móviles



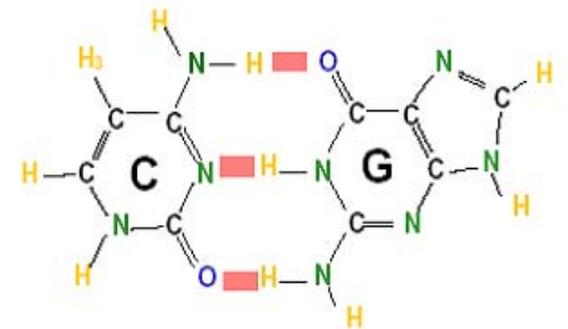
# Breathers en biología: el ADN



A pairs with T, with two H-bonds

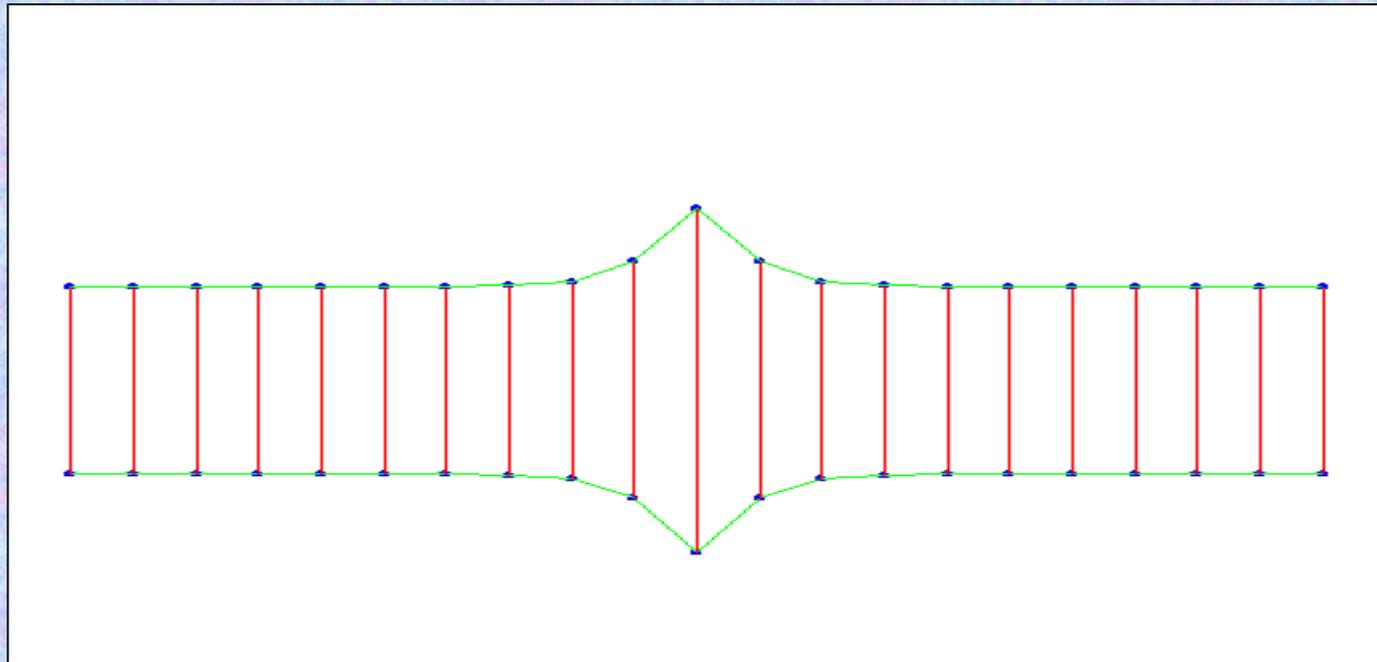


G pairs with C, with three H-bonds



# Breathers en el ADN

- Transcripción
- Transmisión de información
- Polarones: ¿ordenadores biológicos?



# Breathers en sólidos cristalinos

- Transformaciones reconstructivas en silicatos laminares

M. D. Alba, M. Naranjo y J. M. Trillo, CSIC/Universidad de Sevilla

- Quodons en la mica moscovita

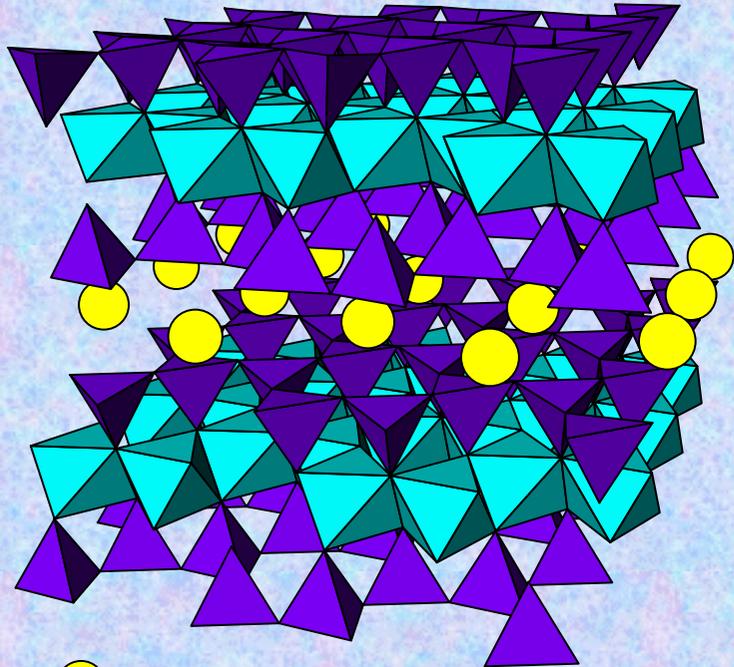
FM Russell y JC Eilbeck, Universidad Heriot-Watt, Edimburgo

- Desplazamiento de defectos en el silicio

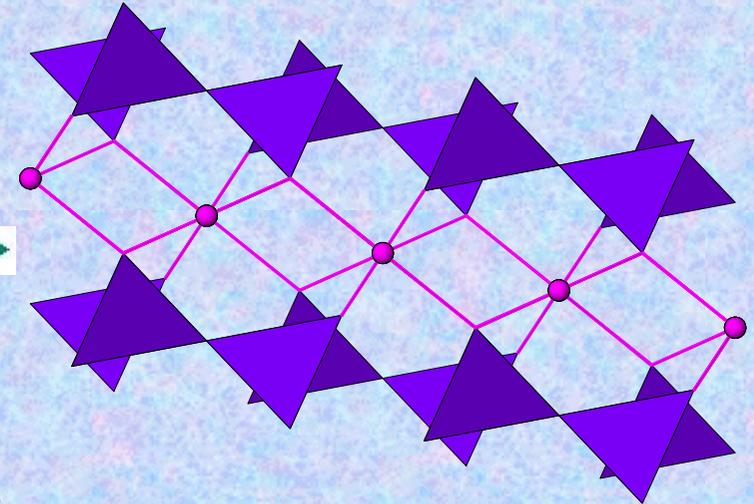
P Sen, Universidad Jawaharlal Nehru, Nueva Delhi

# Transformación reconstructiva de la moscovita

moscovita



Disilicato de lutecio



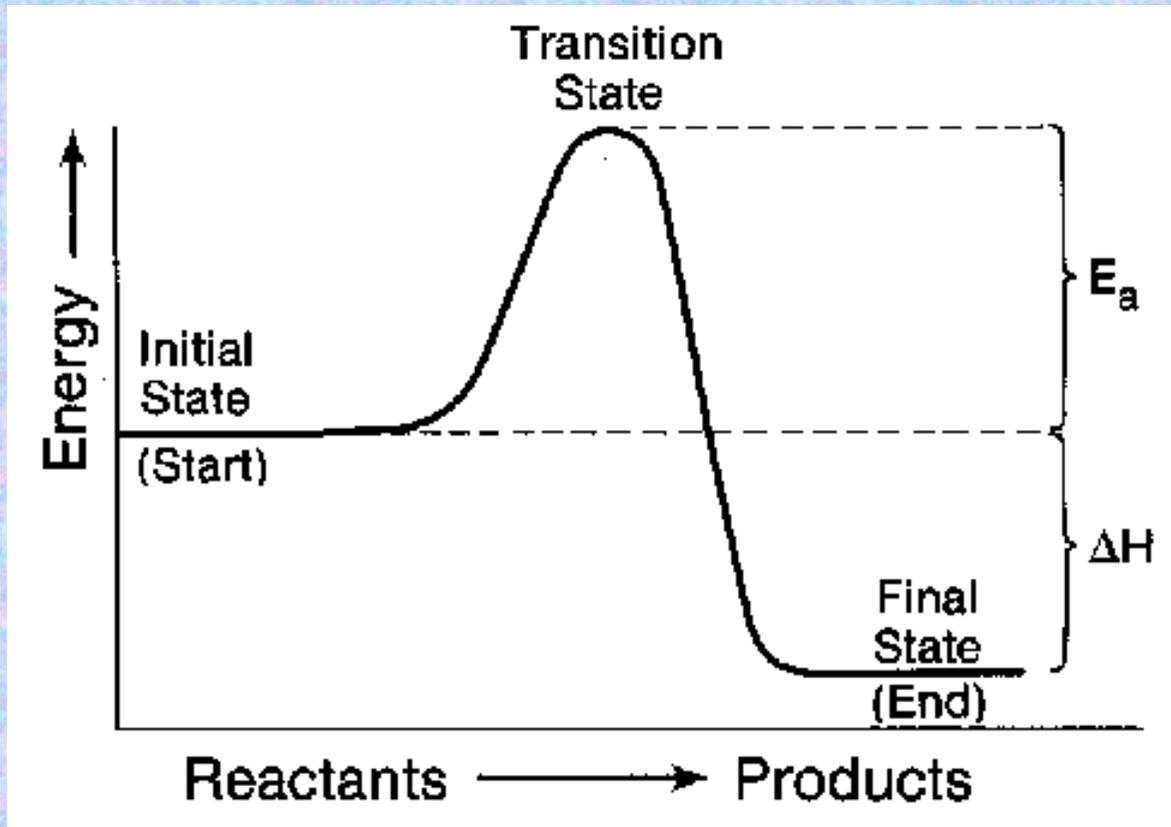
**300° C, 3 días**



Experiencias realizadas M. D. Alba, M. Naranjo and J. M. Trillo CSIC/ U de Sevilla

# Ley de Arrhenius

$$k = A \exp(-E_a/RT)$$

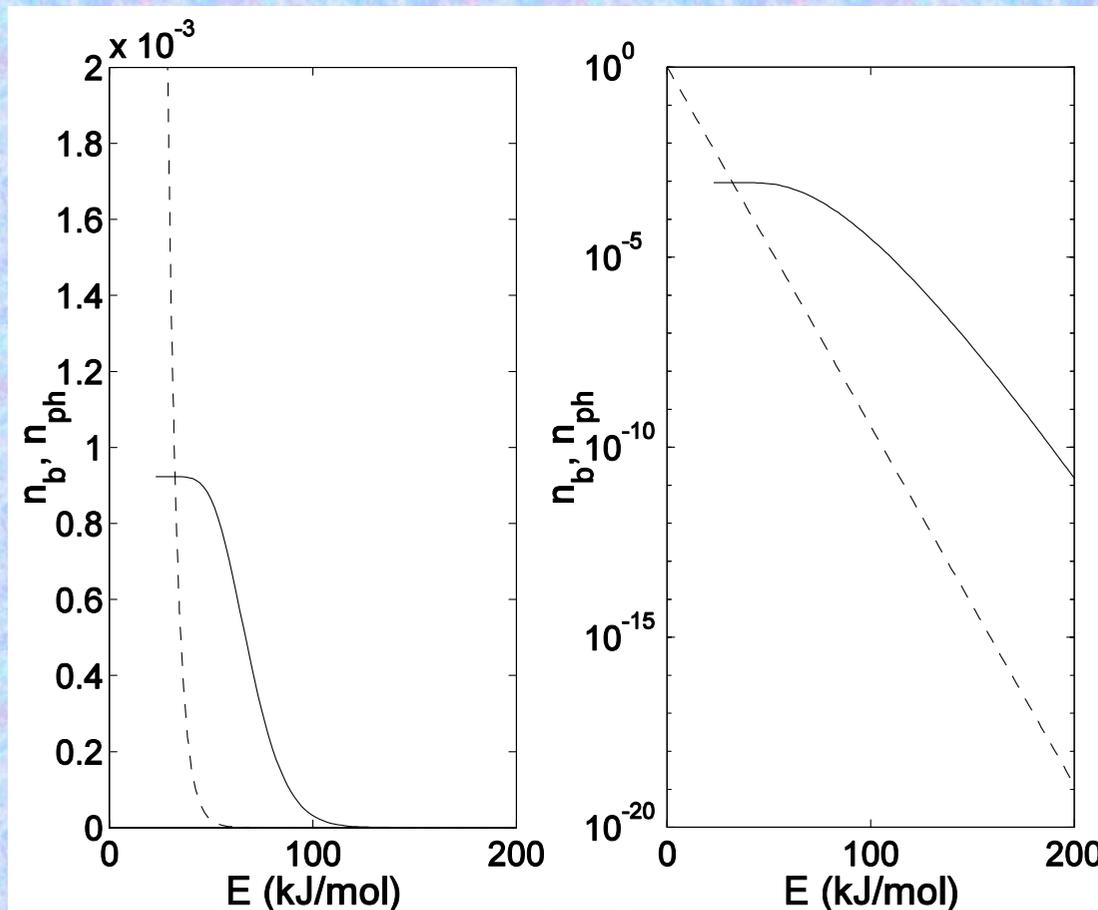


$$N_{E_a}/N = \exp(-E_a/RT)$$

# Velocidad de reacción y estadística de breathers

Ritmo de creación de breathers:  $\sim \exp(-E_a/RT)$

Ritmo de destrucción de breathers:  $\sim 1/(E-\Delta)^z$



Densidad de fonones  
y breathers

———— breathers

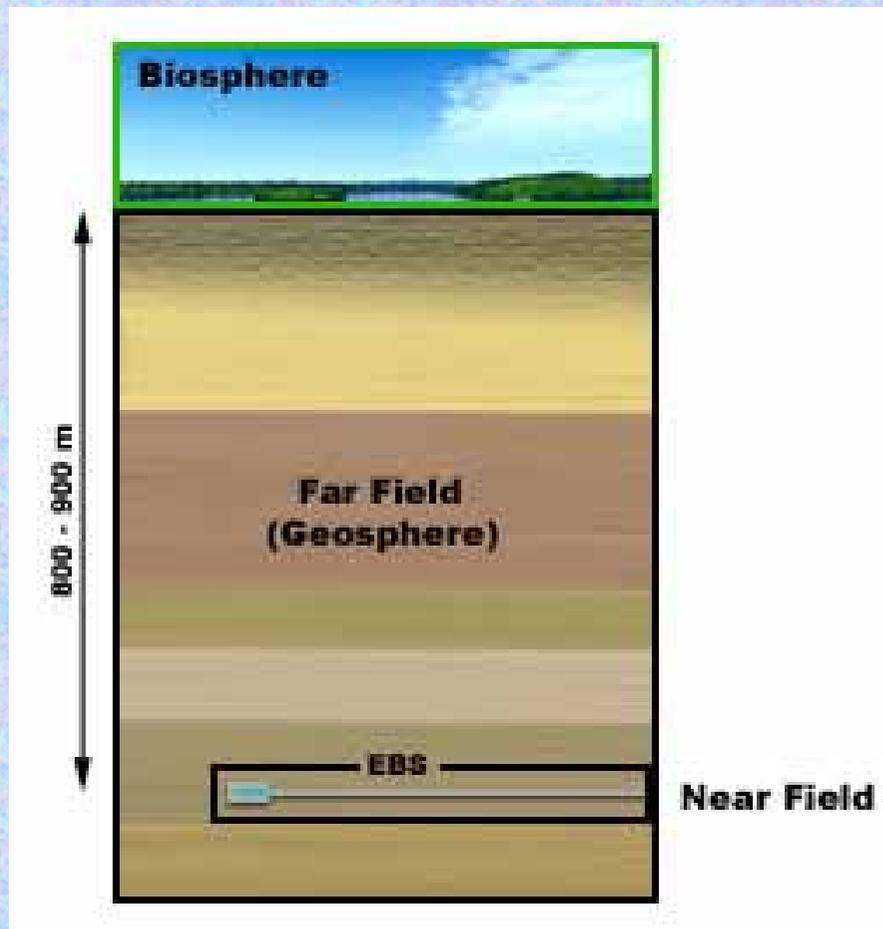
----- fonones

# CONCLUSION

- HAY MUCHOS MENOS BREATHERS QUE MODOS LINEALES, PERO MUCHOS MÁS CON ENERGÍA MAYOR QUE LA ENERGÍA DE ACTIVACIÓN
- Los breathers discretos son buenos candidatos para explicar las transformaciones reconstructivas a baja temperatura

**¿Qué interés tienen las transformaciones reconstructivas a baja temperatura?**

# Aplicación: Depósitos nucleares profundos para residuos nucleares

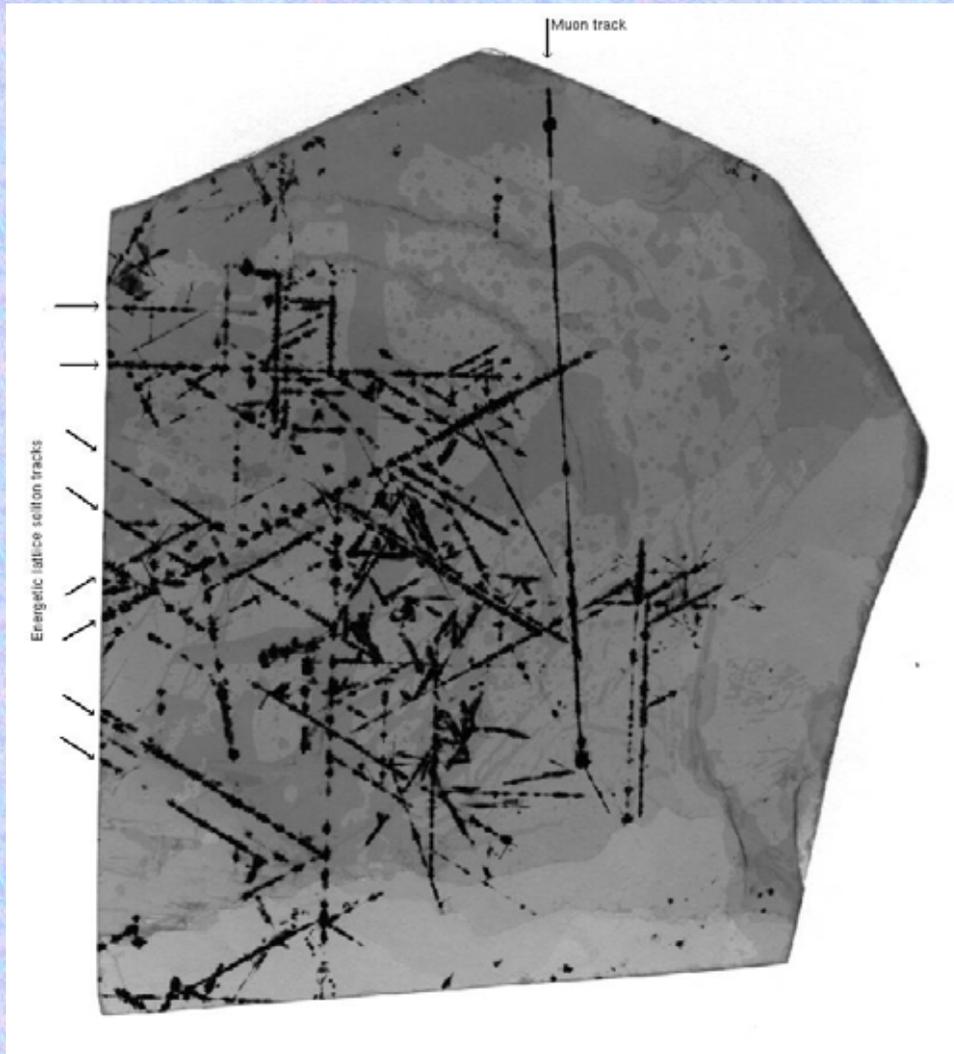


**EBS:**

Engineered barrier system  
Sistema de barrera artificial

- El lutecio en el laboratorio simula elementos radioactivos pesados
- La transformación reconstructiva atrapa los elementos radioactivos

# Quodons en la mica moscovita

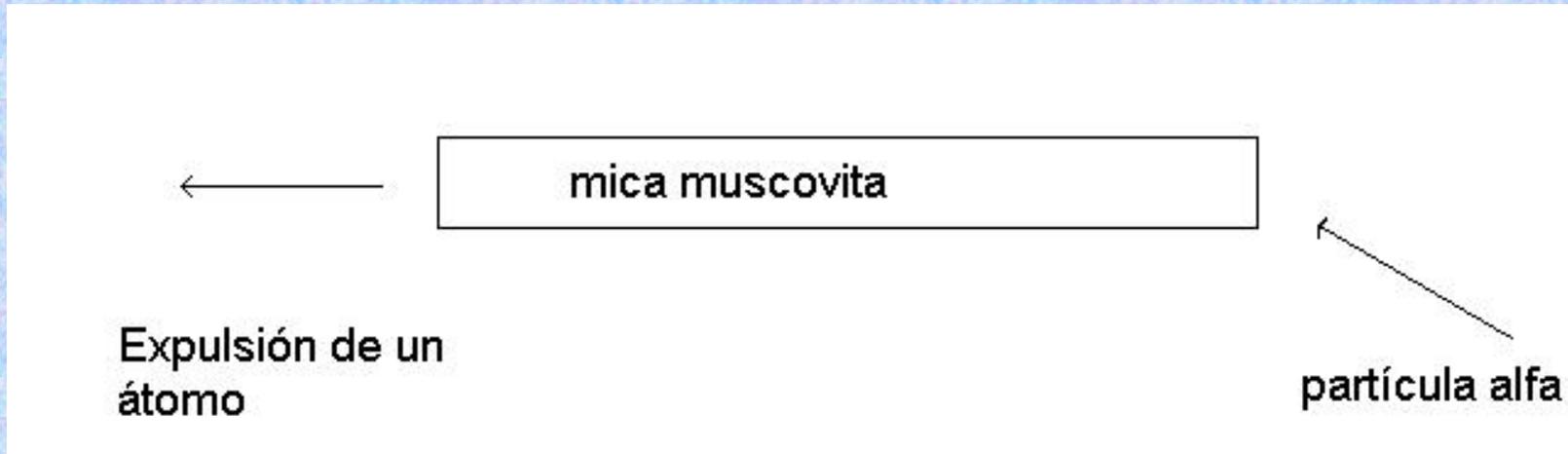


Líneas: depositos de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$

Causa:

- 0.1% Partículas:
  - muones: producidos por interacción de neutrinos
  - Positrones: producidos por interacción electromagnética de los muones y decaimiento de K
- 99.9% **Desconocida**  
¿Vibraciones localizadas de la red: quodons?

# Sputtering



Trayectorias a lo largo de las direcciones de la red en el plano de  $K^+$

FM Russell y JC Eilbeck, Europhysics Letters, 2007, to appear.

# Problemas pendientes

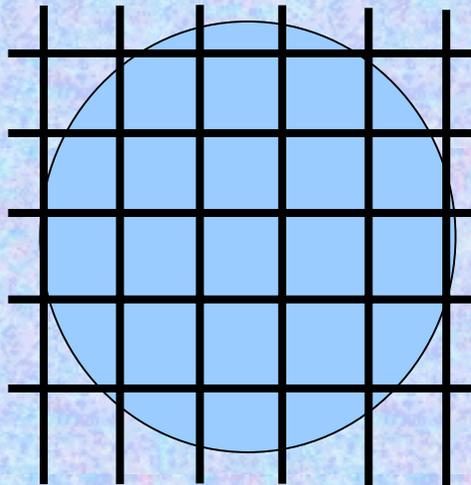
- ¿Causas de la larga vida de los quodons?  $\sim 10^8$  unidades de la red
- ¿Precursores de los quodons?
- ¿Qué tipos de red soportan quodons y cuales son mejores?

## Aplicaciones

- ¿Reparación de defectos o templado en materiales dañados?
- ¿Diseño de superconductores a alta temperatura?

# Migración de defectos en el silicio

**Si(100)**



**Iones 100~200 MeV en dirección perpendicular**

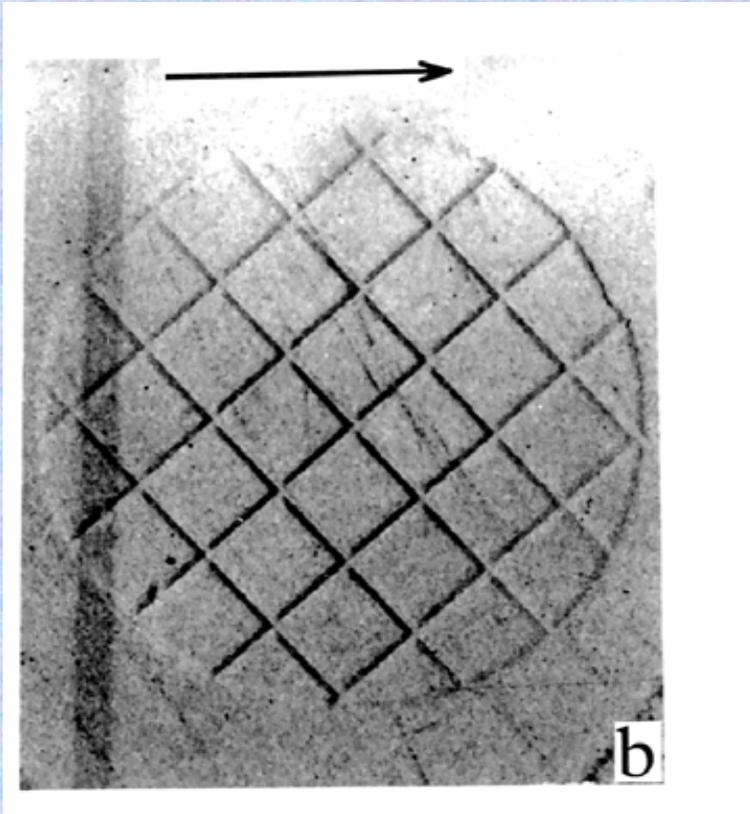
**La red de alambre de Ni está encima de la muestra de Si(100). Distancias de 5mm – 300 mm**

**Los iones son detenidos por los alambres de Ni**

**— alambre de Ni**  
**40 micras grosor, separación de 850 micras**

# Resultados de topografía de rayos X

**Imagen XRT del Si(100)  
irradiado con iones 200 MeV Ag**

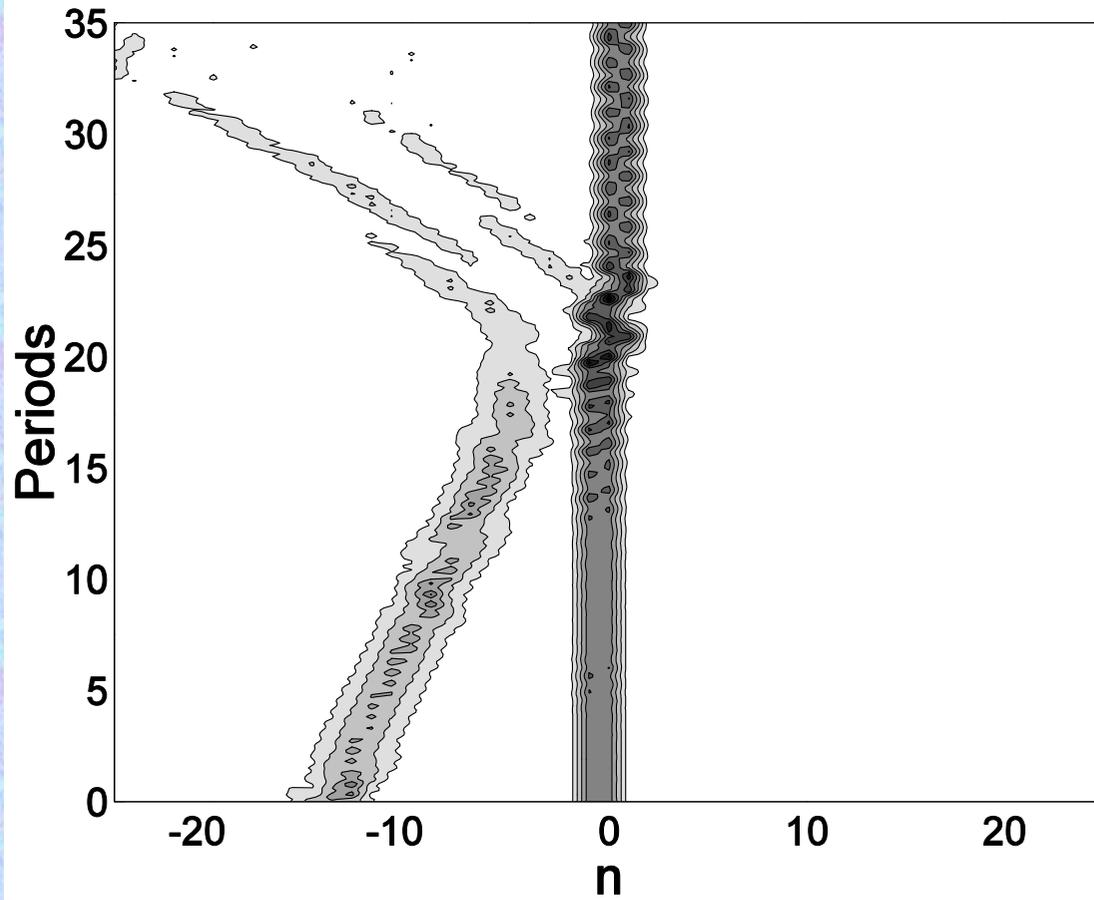


- Los defectos se mueven a la interfaz de irradiación
- La zona irradiada queda libre de defectos
- **EXPLICACIÓN:**  
¿Breathers producidos por los iones son capaces de mover los defectos?

**P. Sen and J. Akhtar in Current Science Vol. 85, p. 1723 (2003)**

# Simulaciones numéricas

(d)  $C=0.50$ ,  $b=0.5$ ,  $\lambda=0.1498$



Las vacantes e intersticiales pueden:

1. avanzar
2. retroceder
3. permanecer

Comportamiento relacionado con los breathers de vacante

# Conclusiones

- La evidencia experimental sugiere que excitaciones no lineales producidas por la interacción de iones con la red de silicio son capaces de movilizar los defectos
- Las simulaciones numéricas muestran que un breather es capaz de movilizar los defectos

# Aplicaciones

- Obtención de cristales de silicio libre de defectos
- Interfaces de radiación: *nanoestructuras reordenadas artificialmente*
  - Uniones p-n con voltaje de ruptura de 6 V  $\rightarrow$  48 V
  - Nanoestructuras ¿silicio emisor de luz?

# Publicaciones

*Discrete breathers for understanding reconstructive mineral processes at low temperatures*, JFR Archilla, J Cuevas, MD Alba, M Naranjo and JM Trillo, J. Phys. Chem. B 110, 24112, 2006

*Interaction of moving discrete breathers with vacancies*, J Cuevas, JFR Archilla, B Sánchez-Rey and FR Romero, Physica D 216,115, 2006

*Classical and quantum nonlinear localized excitations in discrete systems.* FR Romero, JFR Archilla, F Palmero, B Sánchez-Rey, A Alvarez, J Cuevas and JM Romero, In SG Pandalai, editor, *Recent Research Developments in Physics*, vol 6, part II, pages 531-570. Kerala, India, 2005.

<http://www.grupo.us.es/gfnl> :

¡51 publicaciones y 5 preprints sobre breathers desde 2001!